

ISSN 2077-3110

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXI Международного семинара

Воронеж 2020

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российская академия наук

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Воронежский государственный технический университет»

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Институт проблем химической физики РАН»

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXI Международного семинара
(г. Воронеж, 30 ноября 2019 г.)

Воронеж 2020

УДК 53.072:519.673(06)

ББК 22.1я4

Ф503

Физико-математическое моделирование систем: материалы XXI
Ф503 Международ. семинара; ФГБОУ ВО «Воронежский государственный
технический университет». – Воронеж: Изд-во ВГТУ, 2020. – 200 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*
С. А. Кострюков (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *ученый секретарь*
В. В. Пешков (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *ответственный 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», 2020

ВЛИЯНИЕ СТОХАСТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ПОЛЕ ДЕФОРМАЦИИ МОДЕЛЬНОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ СВЯЗАННОЙ СТРУКТУРЫ

О. П. Абрамова, С. В. Абрамов

Донецкий национальный университет
oabramova@ua.fm

Методом численного моделирования исследовано поведение поля деформации модельной фрактальной связанной структуры с двумя элементами цилиндрического типа. При этом поля деформаций связанных структур рассматриваются как сумма и произведение (скалярное и матричное) полей деформаций отдельных структур. Показано, что для рассматриваемых структур поведение поля деформации существенно зависит от выбора стохастических процессов, реализуемых в процессе итераций.

Ключевые слова: связанные фрактальные структуры, аттракторы, комплексное поле деформации, упорядочение операторов, квантовый хаос.

Введение

Ранее в работах [1 - 3] для описания суммарного поля деформации связанных фрактальных структур в итерационном процессе использовалась сумма операторов полей смещений отдельных фрактальных структур. Поле деформации связанной структуры существенно зависит от порядка следования отдельных операторов полей смещений в итерационном процессе. На примерах квантовых точек [4], эллиптических [1, 2] и круговых [3] цилиндров показано влияние упорядочения отдельных операторов полей смещений на суммарное поле деформации связанной структуры. Наличие переменных полуосей и переменных модулей приводит к стохастическому поведению комплексного поля деформации таких структур. На основе пар одинаковых фрактальных структур с противоположной ориентацией полей деформации были введены комплексные нулевые операторы [3]. Показано, что перестановка отдельных операторов в нулевом операторе для связанной структуры приводит к появлению ненулевого комплексного поля деформации. При этом на фоне стохастических пиков появляются шумовые дорожки. Шумовая дорожка представляет собой стохастическое кольцо, внутренность которого является регулярной областью.

Для описания квантового хаоса используются случайные матрицы [5]. Элементы случайных матриц могут формироваться в результате итерационного процесса. При этом возникает необходимость использования коммутаторов и антикоммутаторов, произведений отдельных операторов полей деформаций.

Целью данной работы является описание полей деформаций фрактальных связанных структур, состоящих из двух цилиндров – кругового и эллиптического. При этом поля деформаций связанных структур рассматриваются как сумма и произведение (скалярное и матричное) полей деформаций отдельных структур.

Описание поля деформации модельной фрактальной связанной структуры

Рассматривается модельная фрактальная связанная структура, 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 [1 - 3] нелинейные уравнения для безразмерной комплексной функции смещения u узла решетки имеют вид

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

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

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

где u_0 – постоянное (критическое) смещение; α_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 $p_{0i}, p_{1i}, p_{2i}, p_{3i}, b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}, n_{0i}, n_{ci}, m_{0i}, m_{ci}, j_{0i}, j_{ci}$ характеризуют различные фрактальные структуры; параметры R_i определяют ориентацию полей деформации отдельных структур в связанной системе. Для структур (I) и (II) полям деформаций $u = u_{R1}$ и $u = u_{R2}$ соответствуют матрицы \mathbf{M}_{R1} и \mathbf{M}_{R2} , элементы которых находятся независимо друг от друга методом итераций. При этом итерационная процедура по индексу n для уравнений (1) – (3) моделирует два независимых стохастических процесса на прямоугольной дискретной решетке с размерами $N_1 \times N_2$. Для суммы матриц $\mathbf{M}_{R1}, \mathbf{M}_{R2}$ выполняется соотношение

$$\mathbf{M}_{R1} + \mathbf{M}_{R2} = \mathbf{M}_{R2} + \mathbf{M}_{R1}. \quad (4)$$

Для связанных структур (I, II), (II, I) полям деформаций соответствуют упорядоченные операторы

$$u = u_{(I,II)} = u_{R1} + u_{R2}, \quad u = u_{(II,I)} = u_{R2} + u_{R1} \quad (5)$$

и матрицы $\mathbf{M}_{(I,II)}, \mathbf{M}_{(II,I)}$, элементы которых находятся методом итераций. Итерационная процедура по индексу n для уравнений (1) – (3) моделирует два других независимых стохастических процесса для матриц $\mathbf{M}_{(I,II)}, \mathbf{M}_{(II,I)}$. При этом выполняются соотношения

$$\mathbf{M}_{(I,II)} = \mathbf{M}_{R1} + \mathbf{M}_{R2} = \mathbf{M}_{R2} + \mathbf{M}_{R1} = \mathbf{M}_{(II,I)}; \quad \mathbf{M}_{(I,II)} - \mathbf{M}_{(II,I)} = 0. \quad (6)$$

Для описания отклонения поля деформации связанных структур (I, II) и (II, I) вводим упорядоченный оператор

$$u_\delta = (u_{R1} + f_2(u_{R2})) - (u_{R2} + f_1(u_{R1})), \quad (7)$$

которому соответствует матрица \mathbf{M}_δ . Итерационная процедура по индексу n моделирует стохастический процесс для матрицы \mathbf{M}_δ , который не совпадает со стохастическими процессами для матриц $\mathbf{M}_{(I,II)}$, $\mathbf{M}_{(II,I)}$, \mathbf{M}_{R1} , \mathbf{M}_{R2} . При этом

$$\mathbf{M}_\delta \neq \mathbf{M}_{(I,II)} - \mathbf{M}_{(II,I)}; \quad \mathbf{M}_\delta \neq 0. \quad (8)$$

Из (8) следует, что стохастические процессы для матриц $\mathbf{M}_{(I,II)}$, $\mathbf{M}_{(II,I)}$ становятся зависимыми. Если в (7) положить $f_2(u_{R2}) = u_{R2}$, $f_1(u_{R1}) = u_{R1}$, то $\mathbf{M}_{(I,II)} = \mathbf{M}_{(II,I)}$, что подтверждает условия независимости стохастических процессов (6). Аттракторы поля деформации связанной фрактальной структуры располагаются на поверхности, ядро которой определяется из условия

$$Q \cdot Q_2 = 0. \quad (9)$$

При численном моделировании полагалось, что $N_1=240$, $N_2=240$, $\alpha_i = 0.5$, $u_{0i}=29.537$, $p_{0i} = 1.0423$, $b_{1i} = b_{2i}=1$, $n_{0i} = 121.1471$, $m_{0i} = 120.3267$, $n_{c1}=m_{c1}=57.4327$, $j_{0i}=31.5279$, $j_{ci}=11.8247$, $p_{1i}=p_{2i}=p_{3i}=0$, $b_{3i} = 0$. При этом во фрактальных связанных структурах (I, II) и (II, I) структура (I) представляет собой круговой цилиндр, а структура (II) – эллиптический цилиндр с переменными полуосями n_{c2}, m_{c2} . Переменные полуоси выбирались так, чтобы площадь сечения эллипса $S = \pi n_{c2}m_{c2}$ не изменялась и равнялась площади сечения кругового цилиндра $S = 824.6316\pi$ из [2, 3]. Для эллиптического цилиндра (II) полуоси n_{c2}, m_{c2} задавались следующим образом: вариант 1 – $n_{c2} = 43.0746$, $m_{c2} = 19.1443$ (эллиптический цилиндр находится внутри кругового цилиндра); вариант 2 – $n_{c2} = 55.2537$, $m_{c2} = 14.9245$ (эллиптический цилиндр приближается к круговому цилиндру вдоль оси On); вариант 3 – $n_{c2} = 119.9327$, $m_{c2} = 6.8758$ (эллиптический цилиндр выходит за границы кругового цилиндра вдоль оси On). На рис. 1 показано поведение аттракторов для всех трех вариантов фрактальных структур (I, II) и комплексного поля деформации $u_{(I,II)}$. Различное поведение аттракторов (рис. 1, а-в) и сечений комплексного поля деформации (рис. 1, г-и) подтверждают стохастический характер поля деформации структуры (I, II) и её зависимости от полуосей эллиптического цилиндра (II). Явный вид поведения поля деформации структуры (II, I) в данной работе не приводится. Однако выполненные исследования позволяют сделать оценку отклонений (8) $\text{Re} \mathbf{M}_\delta \approx 10^{-9}$, $\text{Im} \mathbf{M}_\delta \approx 10^{-25}$, что указывает на зависимость стохастических процессов в (7).

Далее рассмотрим фрактальные связанные структуры (III) и (IV), поля деформаций которых u_3 и u_4 описываются произведением полей деформаций структур (I) и (II). Полям деформаций структур (III) и (IV) соответствуют матрицы $\mathbf{M}_3 = \mathbf{M}_{R1} \cdot \mathbf{M}_{R2}$ и $\mathbf{M}_4 = \mathbf{M}_{R2} \cdot \mathbf{M}_{R1}$. Здесь символ «точка» описывает операцию обычного матричного умножения. На рис. 2 показано поведение комплексного поля деформации для структур (III) и (IV). При этом были выбраны параметры структуры (II), соответствующие варианту 2. Аттракторы структур (III) и (IV) сов-

падают с аттрактором из рис. 1, б. Сечения (рис. 2, б, д), проекции на плоскость nOu (рис. 2, а, г) подтверждают стохастическое и фрактальное поведение поля деформации структуры (III), которое существенно отличается от поведения поля деформации структуры (IV) (рис. 2, в, е). Это подтверждает не коммутативность операции матричного умножения $\mathbf{M}_3 - \mathbf{M}_4 = \mathbf{M}_{R1} \cdot \mathbf{M}_{R2} - \mathbf{M}_{R2} \cdot \mathbf{M}_{R1} \neq 0$.

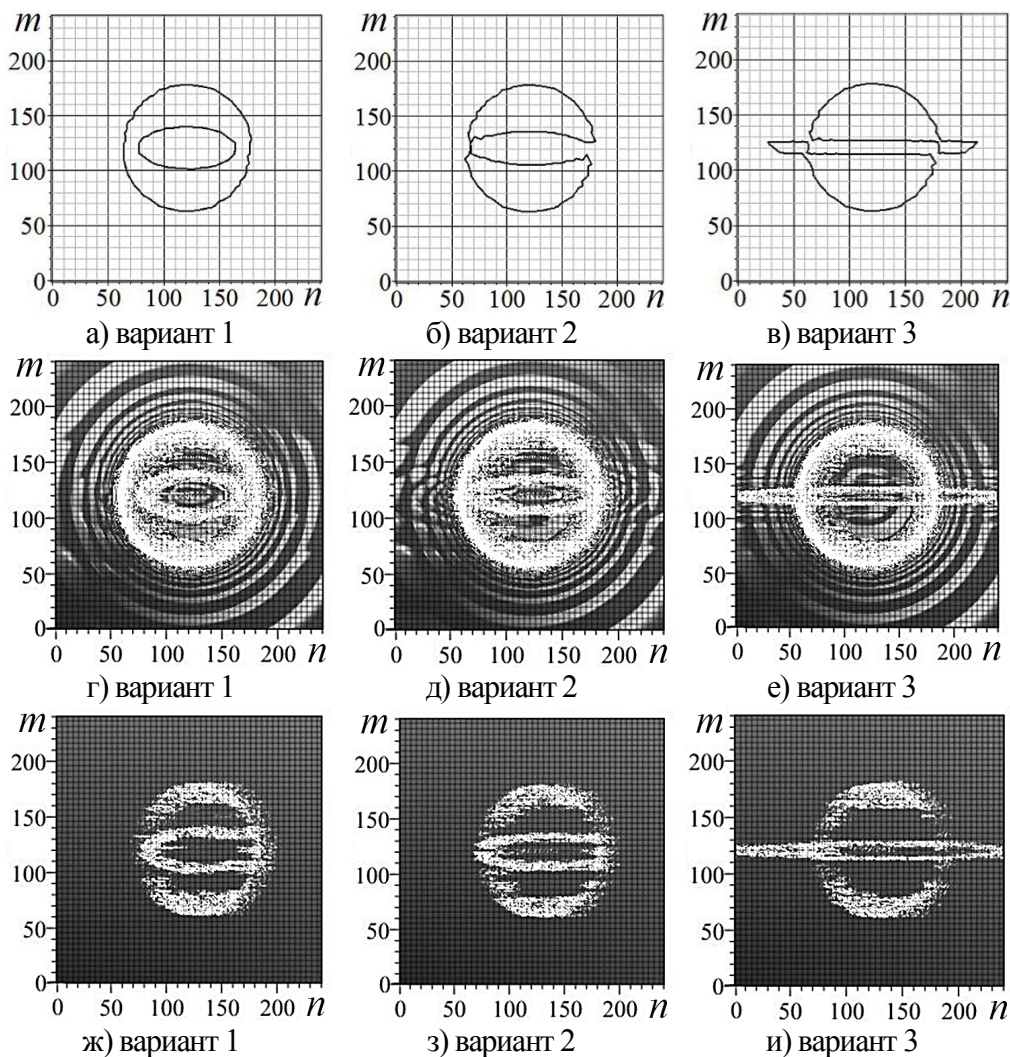


Рис. 1. Поведение аттракторов (а, б, в) и поля деформации u связанной системы (I, II): $\text{Re } u_{(I,II)} \in [-1; 1]$ (г, д, е), $\text{Im } u_{(I,II)} \in [-1; 1]$ (ж, з, и) – сечения (вид сверху)

Изменение операции обычного матричного умножения на скалярное умножение комплексных полей деформации приводит к замене связанных структур (III) и (IV) на структуры (V) и (VI). При этом итерационная процедура по индексу n моделирует связанные (зависимые) стохастические процессы исходных независимых стохастических процессов для структур (I) и (II). Поля деформации структур (V) и (VI) описываются функциями $u_5 = u_{R1} f_5(u_{R2})$ и $u_6 = u_{R2} f_6(u_{R1})$, которым соответствуют матрицы \mathbf{M}_5 и \mathbf{M}_6 . Если при моделировании использовать независимые итерационные процессы для структур (I) и (II), то $f_5(u_{R2}) = u_{R2}$, $f_6(u_{R1}) = u_{R1}$, $u_5 = u_{R1} u_{R2} = u_{R2} u_{R1} = u_6$ и $\mathbf{M}_5 = \mathbf{M}_6$. Равенство матриц подтверждает независимость итерационных процессов.

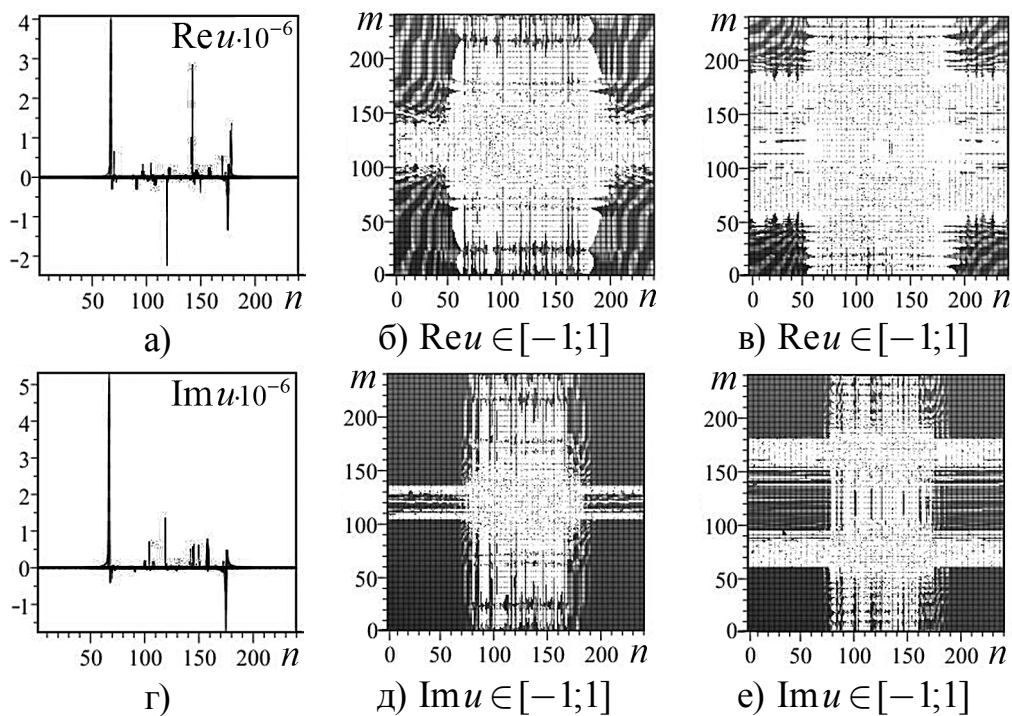


Рис. 2. Поля деформации структур (III), (IV): $u = u_3$ (а, г) – проекции на плоскость nOu , (б, д) – сечения (вид сверху); $u = u_4$ (в, е) – сечения (вид сверху)

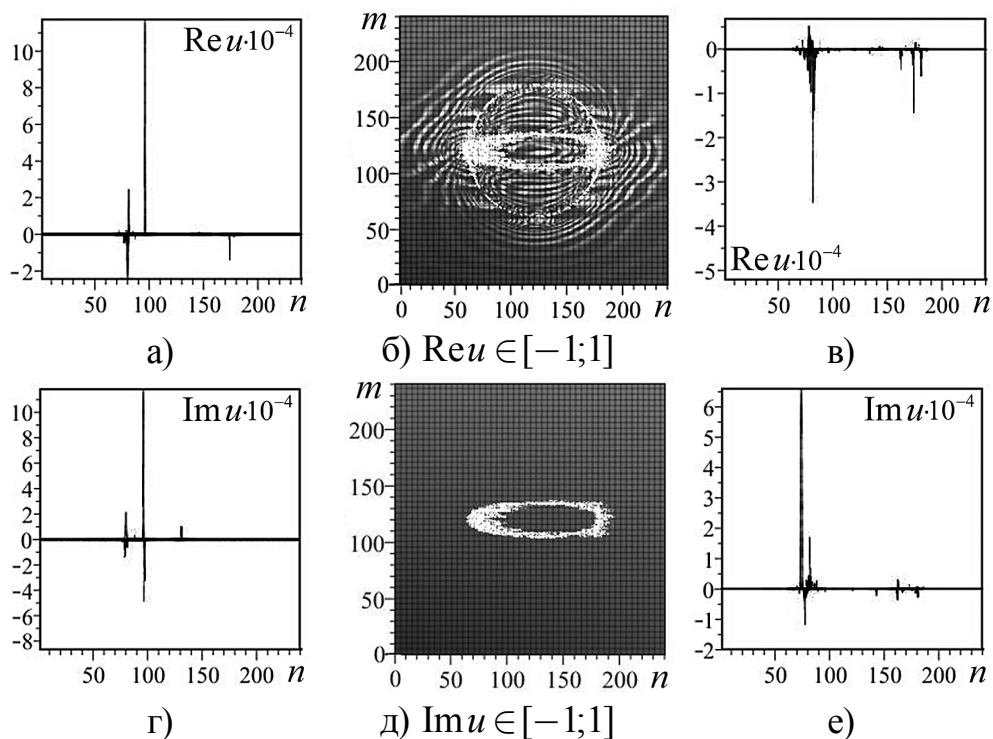


Рис. 3. Поля деформации структур (V), (VI): $u = u_5$ (а, г) – проекции на плоскость nOu , (б, д) – сечения (вид сверху); $u = u_6$ (в, е) – проекции на плоскость nOu

На рис. 3 показано поведение комплексного поля деформации для структур (V) и (VI). При этом были выбраны параметры структуры (II), соответствующие

варианту 2. Аттракторы структур (V) и (VI) совпадают с аттрактором из рис. 1, б. Сечения (рис. 3, б, д), проекции на плоскость $nOи$ (рис. 3, а, г) подтверждают другое (по сравнению с рис. 2) стохастическое и фрактальное поведение поля деформации структуры (V), которое также существенно отличается от поведения поля деформации структуры (VI) (рис. 3, в, е). Это связано с зависимостью рассматриваемых стохастических процессов, т.е. $M_5 \neq M_6$.

Выводы

Рассмотрено поведение аттракторов и комплексного поля деформации фрактальных связанных структур, состоящих из двух фрактальных цилиндров (кругового и эллиптического с переменными полуосями). Показано, что поведение поля деформации существенно зависит от выбора стохастических процессов, реализуемых в процессе итераций для рассматриваемых структур.

В качестве примеров исследованы особенности поведения полей деформаций, возникающих в результате суммы, скалярного и матричного произведений независимых и зависимых стохастических процессов.

Литература

1. 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.
2. Abramova O. P., Abramov A. V. Effect of Ordering of Displacement Fields Operators of Separate Quantum Dots, Elliptical Cylinders on the Deformation Field of Coupled Fractal Structures / in book 11th Chaotic Modeling and Simulation International Conference. Springer Proceedings in Complexity. C. H. Skiadas and I. Lubashevsky (eds.). Springer Nature Switzerland AG 2019. P. 15-27.
3. Абрамова О. П. Комплексные нулевые операторы в связанной фрактальной структуре с элементами цилиндрического типа // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2019. – № 1. – С. 25-35.
4. Abramov V. S. Quantum Dots in a Fractal Multilayer System // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics, 2017. V. 81, No. 5. P. 579-586.
5. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос: введение / под ред. В. Я. Демиховского. М.: Физматлит, 2004. – 376 с.

INFLUENCE OF STOCHASTIC PROCESSES ON THE DEFORMATION FIELD OF MODEL FRACTAL COUPLED STRUCTURE

O. P. Abramova, S. V. Abramov

Donetsk National University

By the numerical modelling method the behavior of the deformation field of the fractal coupled structure with two elements of cylindrical type was investigated. In this case, the deformation fields of the coupled structures are considered as the sum and product (scalar and matrix) of the deformation fields of the separate structures. It is shown, that for the considered structures, the behavior of the deformation field essentially depends on the choice of stochastic processes realized during iterations.

Keywords: coupled fractal structures, attractors, complex deformation field, ordering of operators, quantum chaos.

СВЯЗИ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛЬНОГО ФЕМТООБЪЕКТА И БОЗОНА ХИГГСА ВО ФРАКТАЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХ

В. С. Абрамов

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина
vsabramov2018@gmail.com

В рамках анизотропной модели выполнено описание основных характеристик модельного фемтообъекта и его связей с параметрами бозона Хиггса. Для учета стохастического поведения параметров модельного фемтообъекта (активного объекта с размерами порядка классического радиуса электрона) во фрактальных квантовых системах вводятся случайные величины. На примере атома водорода выполнены оценки радиуса протона, его среднего квадратичного отклонения и сравнение с экспериментом. Получены оценки аномальных вкладов в магнитные моменты лептонов на основе лептонного квантового числа.

Ключевые слова: модельный фемтообъект, бозон Хиггса, фрактальные квантовые системы, атом водорода, радиусы протона и электрона, магнитные моменты лептонов.

Введение

Для описания фрактальных космологических объектов (на примере бинарных черных дыр и нейтронных звезд) в работах [1, 2] была предложена модель, которая учитывает связи параметров бозона Хиггса и реликтовых фотонов, гравитонов. В рамках этой модели показана возможность излучения гравитационных волн от таких космологических объектов в режиме сверхизлучения [2]. Учет поля Хиггса позволил предложить анизотропную модель фрактальной космологии, в рамках которой возможно описание эффекта ускоренного расширения Вселенной. При этом возможен переход к описанию атомных дефектов, активных нанобъектов, нейтрино [3, 4]. Активные объекты во фрактальных квантовых системах имеют свои характерные особенности поведения [5-7]. При этом возможно появление сверхбезизлучательных состояний активных объектов [6]. При описании различных физических полей (гравитационного, электромагнитного, нейтринного, деформации, напряжения) во фрактальных квантовых системах необходимо учитывать эффект упорядочения соответствующих операторов [7]. Методы когерентной лазерной спектроскопии и современное развитие нанотехнологий дают возможность исследовать активные фемтообъекты (протоны, нейтроны, атомный и мюонный водороды, лептоны) во фрактальных квантовых системах. В работах [8-10] были получены оценки характерных размеров для радиуса протона и постоянной Ридберга в атомном и мюонном водородах. Отметим, что активные фемтообъекты типа лептонов имеют аномалии магнитных свойств [11]. Для нейтрино наблюдается эффект осцилляций (взаимные превращения электронного, мюонного нейтрино и τ -нейтрино друг в друга) [12].

Целью данной работы является описание основных характеристик модельного фемтообъекта и его связей с параметрами бозона Хиггса.

Описание модельного фемтообъекта

На основе результатов работ [1-6] вводим основные параметры ξ_{2p} , Ω_{A0} , r_p модельного фемтообъекта

$$\xi_{2p} = \chi_0 / n'_F = 1 / (N'_p - N); \quad \Omega_{A0} = n_{A0} E_e / E_{H0}; \quad r_p = 2r_e / (z'_\mu n_F), \quad (1)$$

которые связаны с известными параметрами квантовой электродинамики

$$r_e = e^2 / (m_e c_0^2); \quad \hbar c_0 = e \cdot e_{\alpha 0}; \quad e_{\alpha 0} = e \cdot \alpha_0; \quad \alpha_0 = \hbar c_0 / e^2; \quad E_e = m_e c_0^2 = e^2 / r_e; \\ r_{0p} = m_e r_e / m_p = e^2 / E_p; \quad E_p = m_p c_0^2 = e^2 / r_{0p}; \quad \mu_B = e \hbar / 2m_e; \quad \mu_N = e \hbar / 2m_p. \quad (2)$$

Здесь r_e и r_{0p} , m_e и m_p , E_e и E_p – классические радиусы, массы покоя, энергии покоя для электрона и протона, соответственно; c_0 – предельная скорость света в вакууме; \hbar – постоянная Планка; e – заряд электрона; α_0 – постоянная тонкой структуры; $e_{\alpha 0}$ – перенормированный заряд электрона; μ_B – магнетон Бора; μ_N – ядерный магнетон. Далее будем использовать численные значения $E_e = 0.51099907$ МэВ, $m_p/m_e = 1836.152701$, $E_p = 938.2723226$ МэВ, $r_e = 2.81794092$ фм, $r_{0p} = 1.534698568$ ам. Отметим, что в данной работе модельные фемтообъекты – это активные объекты с размерами порядка классического радиуса электрона r_e . Модельные аттообъекты с размерами порядка классического радиуса протона r_{0p} описывают внутреннюю структуру нуклонов (наличие ядра и скалярного, векторного облаков [11]). Во фрактальных квантовых системах (типа атомного и мюонного водорода) модельные аттообъекты могут приводить к изменению основных параметров (1), аномалиям магнитных свойств (2) и стохастическому поведению [7] модельных фемтообъектов, лептонов. В нашей модели основные параметры модельного фемтообъекта связаны с энергией покоя бозона Хиггса E_{H0} , основным параметром n_{A0} для черных дыр [1, 2], числом квантов n_F , n'_F фермионного ($n_F + n'_F = 1$) поля из анизотропной модели (учитывающей наличие поля Хиггса) [3], космологическим красным смещением z'_μ [1, 2], эффективной восприимчивостью χ_0 в отсутствии поля Хиггса [3, 5, 6], эффективным числом N в модели сверхизлучения Дикке [2]. Численные значения этих параметров равны: $E_{H0} = 125.03238$ ГэВ, $n_{A0} = 58.04663887$, $n_F = 0.945780069$, $n'_F = 0.054219931$, $z'_\mu = 7.18418108$, $\chi_0 = 0.257104198$, $N = 17.0073101$. По формулам (1) находим численные значения основных параметров модельного фемтообъекта $\xi_{2p} = 4.741876161$, $\Omega_{A0} = 237.232775 \cdot 10^{-6}$, $r_p = 0.829458098$ фм и $N'_p = 17.21819709$.

Для учета стохастического поведения параметров модельного фемтообъекта введем случайную величину $\hat{\xi}_{rp}$ с двумя возможными значениями ξ_{1p} ,

ξ_{2p} и соответствующими им вероятностями P_{1p} , P_{2p} и математическим ожиданием $M(\hat{\xi}_{rp}) = 1$. На основе параметров ξ_{2p} , Ω_{A0} из (1) находим вероятности P_{1p} , P_{2p} , возможное значение ξ_{1p} , дисперсию $D(\hat{\xi}_{rp})$, среднее квадратичное отклонение $\sigma(\hat{\xi}_{rp})$ по формулам

$$P_{1p} = \xi_{2p} / (\xi_{2p} + \Omega_{A0}); \quad P_{2p} = \Omega_{A0} / (\xi_{2p} + \Omega_{A0}); \quad P_{1p} + P_{2p} = 1;$$

$$\xi_{1p} = (1 - \xi_{2p}P_{2p}) / P_{1p}; \quad D(\hat{\xi}_{rp}) = (\xi_{2p} - \xi_{1p})^2 P_{1p}P_{2p}; \quad \sigma(\hat{\xi}_{rp}) = D^{1/2}(\hat{\xi}_{rp}). \quad (3)$$

Значения этих параметров из (3) равны: $P_{1p} = 0.999949973$, $P_{2p} = 50.027 \cdot 10^{-6}$, $\xi_{1p} = 0.999812796$, $D(\hat{\xi}_{rp}) = 700.495 \cdot 10^{-6}$, $\sigma(\hat{\xi}_{rp}) = 0.026466865$.

Далее вводим случайную величину $\hat{r}_p = r_p \cdot \hat{\xi}_{rp}$ с двумя возможными значениями r_p^* , r_e^* и соответствующими им вероятностями P_{1p} , P_{2p} . Если r_p постоянная величина, то возможные значения r_p^* , r_e^* , математическое ожидание $M(\hat{r}_p)$, дисперсию $D(\hat{r}_p)$, среднее квадратичное отклонение $\sigma(\hat{r}_p)$ находим по формулам

$$r_p^* = \xi_{1p} r_p; \quad r_e^* = \xi_{2p} r_p; \quad M(\hat{r}_p) = r_p^* P_{1p} + r_e^* P_{2p} = r_p;$$

$$D(\hat{r}_p) = (r_e^* - r_p^*)^2 P_{1p}P_{2p}; \quad \sigma(\hat{r}_p) = D^{1/2}(\hat{r}_p). \quad (4)$$

Численные значения равны: $r_p^* = 0.82930282$ фм, $r_e^* = 3.933187582$ фм, $D(\hat{r}_p) = 481.936 \cdot 10^{-6} (\text{фм})^2$, $\sigma(\hat{r}_p) = 0.021953046$ фм. Наше расчетное значение протонного радиуса r_p^* практически совпадает с новым экспериментальным значением 0.8293 фм для протонного радиуса в атоме водорода, полученного методом 2S-4P спектроскопии (на основе квантовой интерференции) [10].

На основе анизотропной модели [1-3], находим связи радиусов r_p , r_p^* с другими характерными параметрами r'_p , x_p , y_p , $r_{p\tau}$, $r_{p\tau}^*$, $r_{p\mu}$

$$r'_p - r_p = x_p; \quad x_p = r_p \operatorname{sn}(u_\mu; k_\mu); \quad y_p = r_p \operatorname{cn}(u_\mu; k_\mu); \quad x_p^2 + y_p^2 = r_p^2;$$

$$r_p - y_p = 3(r'_p - r_{p\tau}); \quad r_{p\tau}^* = r_{p\tau} n_{F\tau}; \quad 2r_{p\mu} = r'_p (1 - S_{1u} - S_{2u}) - 4(r_p - r_p^*). \quad (5)$$

Параметр $\operatorname{sn}(u_\mu; k_\mu) = \sin \varphi_\mu = 0.057234291$ связан с углом φ_μ [1, 2]; квантовые числа $n_{F\tau} = 0.950987889$, $n'_{F\tau} = 1 - n_{F\tau}$ связаны с лептонным квантовым числом $\Omega_{\tau L} = (n'_{F\tau})^2 = 0.002402187$ из [13]; параметры $|S_{1u}| = 0.046741575$, $S_{2u} = 0.033051284$ определены в [3]. Далее на основе выражений (5) находим численные значения характерных параметров: $r'_p = 0.876931544$ фм, $x_p = 0.047473446$ фм, $y_p = 0.828098429$ фм, $r_{p\tau} = 0.876478321$ фм,

$r_{p\tau}^* = 0.833520268$ фм, $r_{p\mu} = 0.841841587$ фм. Наши расчетные значения r'_p и $r_{p\mu}$ практически совпадают со значениями 0.8768 фм (the CODATA value) и 0.84184 фм (определенное на основе тонкого и сверхтонкого расщепления в рамках квантовой электродинамики) [8], соответственно. Наше расчетное значение $r_{p\tau}^*$ практически совпадает со значением 0.8335 фм для мюонного водорода [9]. Наша анизотропная модель [1-3] также дает возможность оценить погрешность измерений δr_p , $\delta r'_p$ по формулам

$$\begin{aligned} \delta r_p &= \chi_{32} r'_p = r_{p\chi} \operatorname{sn}(u_\mu; k_\mu) [1 + \operatorname{sn}(u_\mu; k_\mu)]; \quad r_{p\chi} = 2r_e \chi_{11} / (z'_\mu n_F); \\ \delta r'_p &= r_{d\tau} S_{2u}; \quad r_{d\tau} = |\chi_{ef}| r_{F\tau}; \quad r_{F\tau} = n_{F\tau} r'_p; \end{aligned} \quad (6)$$

С учетом $\chi_{11} = 0.181800122$, $\chi_{32} = 0.010405201$, $|\chi_{ef}| = 0.250425279$ из [1, 2] и выражений (6) находим оценки погрешностей измерений $\delta r_p = 0.009124649$ фм, $\delta r'_p = 0.006902512$ фм, которые не противоречат экспериментальным оценкам 0.0091 фм из [10], 0.0069 фм из [8], соответственно. При этом расчетное значение радиуса $r_{d\tau} = 0.208842481$ фм из нашей модели находится вблизи среднего квадратичного радиуса распределения электрического заряда в ядре нуклонов равного 0.21 фм [11]. Радиус $r_{F\tau} = 0.833951278$ фм связан с характерными радиусами $r'_{F\tau}$, $r_{\tau L}$ и значением $\Omega'_{\tau L} = 0.97597813$ соотношениями

$$r'_{F\tau} = n'_{F\tau} r'_p; \quad (r'_{F\tau})^2 + (r_{\tau L})^2 = (r'_p)^2; \quad r_{\tau L}^2 = \Omega'_{\tau L} (r'_p)^2; \quad \Omega'_{\tau L} = 1 - \Omega_{\tau L} = n_{F\tau} (1 + n'_{F\tau}). \quad (7)$$

Значения этих радиусов равны $r'_{F\tau} = 0.042980266$ фм, $r_{\tau L} = 0.866334751$ фм.

Аномалии магнитных моментов лептонов могут определяться влиянием реликтового излучения. При этом реликтовое излучение может приводить к эффектам перенормировки исходных параметров: постоянной тонкой структуры α_0 , заряда электрона e , предельной скорости распространения фотонов в вакууме c_0 ; масс покоя m_e , m_μ , m_τ и магнетонов μ_B , $\mu_\mu = e\hbar / 2m_\mu$, $\mu_\tau = e\hbar / 2m_\tau$ для электрона, мюона, τ -лептона, соответственно. Магнитные моменты лептонов $\langle \hat{\mu}_e \rangle$, $\langle \hat{\mu}_\mu \rangle$, $\langle \hat{\mu}_\tau \rangle$ для электрона, мюона, τ -лептона, соответственно, определяются выражениями

$$2 \langle \hat{\mu}_e \rangle = (2 + \Omega_{\mu e}) \mu_B; \quad 2 \langle \hat{\mu}_\mu \rangle = (2 + \Omega_{\mu\mu}) \mu_\mu; \quad 2 \langle \hat{\mu}_\tau \rangle = (2 + \Omega_{\mu\tau}) \mu_\tau. \quad (8)$$

Аномальные вклады в магнитные моменты и эффекты перенормировки описываются параметрами $\Omega_{\mu e}$, $\Omega_{\mu\mu}$, $\Omega_{\mu\tau}$ для электрона, мюона, τ -лептона, соответственно, на основе лептонного числа $\Omega_{\tau L}$

$$\Omega_{\mu e} = \Omega_{\tau L} - \Omega_{HL}; \quad \Omega_{HL} = E_{HL} / E_{H0}; \quad E_{HL} = n'_{H3} E_e; \quad N' = 17.21088699; \quad (9)$$

$$\Omega_{\mu\mu} = \Omega_{\tau L} - \Omega'_{NL}; \quad \Omega'_{NL} = E'_{NL} / E_{H0}; \quad E'_{NL} = N' E_e; \quad (N' - N) \cdot \chi_0 = n'_{\mu F}; \quad (10)$$

$$\Omega_{\mu\tau} = \Omega_{\tau L} - 0.5(\Omega_{HL} + \Omega_{GL}); \quad \Omega_{GL} = E_{GL} / E_{H0}; \quad E_{GL} = n_G E_e. \quad (11)$$

Дополнительные вклады Ω_{HL} , Ω'_{NL} , Ω_{GL} определяются на основе энергий E_{HL} , E'_{NL} , E_{GL} и энергии покоя бозона Хиггса E_{H0} . Из (9) – (11) следует, что указанные дополнительные энергии определяются числами квантов n'_{H3} , N' , n_G и энергией покоя электрона E_e . При этом

$$n'_{H3} = n_{H3} / (1 + \Omega_{0\nu}); \quad 1 + \Omega_{0\nu} = 1 + (n'_F)^2 = 1 + (N'_p - N)^2 \cdot \chi_0^2; \quad (12)$$

$$n_{H3} = Q_{H3} n_{h2} = 0.5 Q_{H3} n_{A0}; \quad n_{A0} = z'_\mu (z'_\mu + 1) - n_Q / n_g; \quad n_Q = 2n_G. \quad (13)$$

Здесь $n_g = 8$, $n_Q = 6$, $n_G = \langle \hat{c}_G \hat{c}_G^+ \rangle = 3$ и $n'_G = \langle \hat{c}_G^+ \hat{c}_G \rangle = 2$ допускают интерпретацию как чисел квантов глюонного, кваркового, возбужденного и основного состояний гравитационного поля, соответственно; плотность нейтрино $\Omega_{0\nu} = 0.002939801$ [3]. На основе (13) находим $n_{H3} = 20.33926863$. Далее с учетом (12), (10) получим $n'_{H3} = 20.27965049$, $n'_{\mu F} = 0.052340473$. На основе (9) – (11) находим энергии $E_{HL} = 10.36288254$ МэВ, $E'_{NL} = 8.794747246$ МэВ, $E_{GL} = 1.53299721$ МэВ; дополнительные вклады $\Omega_{HL} = 82.88159067 \cdot 10^{-6}$, $\Omega'_{NL} = 70.33975716 \cdot 10^{-6}$, $\Omega_{GL} = 12.26080164 \cdot 10^{-6}$. Найденные параметры $\Omega_{\mu e} / 2 = 1159.652705 \cdot 10^{-6}$, $\Omega_{\mu\mu} / 2 = 1165.923621 \cdot 10^{-6}$, $\Omega_{\mu\tau} / 2 = 1177.307902 \cdot 10^{-6}$ практически совпадают с данными [14] для аномалий магнитных моментов лептонов.

Выводы

Во фрактальных квантовых системах рассмотрены модельные фемто-объекты – активные объекты с размерами порядка классического радиуса электрона. Введены основные параметры модельного фемтообъекта, которые связаны с известными параметрами из квантовой электродинамики и бозоном Хиггса. Для учета стохастического поведения параметров вводятся случайные величины с двумя возможными значениями и соответствующими им вероятностями. Находятся математическое ожидание, дисперсия, среднее квадратичное отклонение. Показано, что полученные оценки радиуса протона, погрешностей измерений на примере атома водорода и оценки аномалий магнитных моментов лептонов согласуются с экспериментальными данными.

Литература

1. Abramov V. S. Gravitational Waves, Relic Photons and Higgs Boson in a Fractal Models of the Universe / in book 11th Chaotic Modeling and Simulation International Conference. Springer Proceedings in Complexity. C. H. Skiadas and I. Lubashevsky (eds.). Springer Nature Switzerland AG 2019. P. 1-14.
2. Abramov V. S. Superradiance of Gravitational Waves and Relic Photons from Binary Black Holes and Neutron Stars // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2019. V. 83, No. 3. P. 364-369.
3. Абрамов В. С. Активные нанообъекты, нейтрино и поле Хиггса в анизотропных моделях фрактальной космологии // Известия РАН. Сер. Физическая. – 2019. – Т. 83. – № 12. – С. 1676–1681.

4. Абрамов В. С. Активные наночастицы, атомные дефекты, нейтрино и поле Хиггса в моделях фрактальной космологии // Материалы XIV Международной научной школы «Наука и инновации – 2019». Йошкар-Ола: Поволжский государственный технологический университет, 2019. – С. 70-80.
5. Абрамов В. С. Активные нанообъекты, нейтрино и бозон Хиггса во фрактальных квантовых системах // Вестник ДонНУ. Сер. А: Естественные науки. – 2019. – № 1. – С. 59-71.
6. Abramov V. Super-nonnradiative states in fractal quantum systems // XIII International Workshop on Quantum Optics (IWQO-2019). EPJ Web of Conferences. Volume 220 (2019). 2 p.
7. Abramova O. P., Abramov A. V. Effect of Ordering of Displacement Fields Operators of Separate Quantum Dots, Elliptical Cylinders on the Deformation Field of Coupled Fractal Structures / in book 11th Chaotic Modeling and Simulation International Conference. Springer Proceedings in Complexity. C. H. Skiadas and I. Lubashevsky (eds.). Springer Nature Switzerland AG 2019. P. 15-27.
8. Pohl R., Antognini A., Nez F. et al. The size of the proton // Nature. 2010. V. 466, 8 July. P. 213-217.
9. Beyer A., Maisenbacher L., Matveev A. et al. The Rydberg constant and proton size from atomic hydrogen // Science. 2017. V. 358, 6 October. P. 79-85.
10. Kolachevsky N. 2S–4P spectroscopy in hydrogen atom: the new value for the Rydberg constant and the proton charge radius // XIII международные чтения по квантовой оптике (IWQO – 2019): Сборник тезисов. г. Владимир, 9-14 сентября 2019 г. [Электронное издание]. – Москва: Тривант, 2019. С. 32.
11. Вонсовский С. В. Магнетизм микрочастиц. – М.: Наука, 1973. – 280 с.
12. Agafonova N., Alexandrov A., Anokhina A. et al. Final results of the OPERA experiment on ν_τ appearance in the CNGS neutrino beam // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 120, No. 211801. P. 1-7.
13. Абрамов В. С. Поле Хиггса, нейтрино и сверхбезизлучательные состояния во фрактальных квантовых системах // XIII международные чтения по квантовой оптике (IWQO – 2019): Сборник тезисов. г. Владимир, 9-14 сентября 2019 г. [Электронное издание]. – Москва: Тривант, 2019. С. 123-126.
14. Barnett R. M., Carone C. D., Groom D. E. et al. Review of Particle Physics // Phys. Rev. D54. 1996. No. 1. P. 1-22.

RELATIONS OF PARAMETERS OF A MODEL FEMTOOBJECT AND HIGGS BOSON IN FRACTAL QUANTUM SYSTEMS

V. S. Abramov

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

Within the framework of the anisotropic model, a description of the main characteristics of the model object and its relations with the Higgs boson parameters fulfilled. To account for the stochastic behavior of the parameters of a model femtoobject (an active object with dimensions of the order of the classical electron radius), random values in fractal quantum systems are introduced. Using the example of a hydrogen atom, we estimated the radius of a proton, its mean square deviation, and compared it with an experiment. Estimates of the anomalous contributions to the magnetic moments of leptons based on the lepton quantum number are obtained.

Keywords: model femtoobject, Higgs boson, fractal quantum systems, hydrogen atom, proton and electron radii, magnetic moments of leptons.

ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОДНОГО НЕЛИНЕЙНОГО ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Г. Э. Абдурагимов

Дагестанский государственный университет, Махачкала
gusen_e@mail.ru

В работе с помощью итерационного метода построено приближенное положительное решение краевой задачи для одного нелинейного интегро-дифференциального уравнения второго порядка.

Ключевые слова: краевая задача, положительное решение, итерация.

Рассмотрим краевую задачу

$$x''(t) + 7,9 \cdot 2^t \sqrt{\int_0^1 x(s) ds} = 0, \quad 0 < t < 1, \quad (1)$$

$$x(0) = 0, \quad x(1) = 0. \quad (2)$$

Существование и единственность положительного решения задачи (1)-(2) было ранее показано автором в [1]. В настоящей статье предлагается численная реализация положительного решения данной задачи.

Граничная задача (1)-(2) эквивалентна интегральному уравнению

$$x(t) = \frac{7,9}{\ln 2} \left(t - \frac{2^t - 1}{\ln 2} \right) \sqrt{\int_0^1 x(s) ds} + \alpha t, \quad 0 < t < 1, \quad (3)$$

где α – некоторый параметр, удовлетворяющий условию $x'(0) = \alpha$.

Для поиска приближенного решения уравнения (3) воспользуемся итерационным методом. Сходимость итераций обеспечивают соответствующие априорные оценки [1] и достаточная малость $\left| \frac{7,9}{\ln 2} \left(t - \frac{2^t - 1}{\ln 2} \right) \right|$.

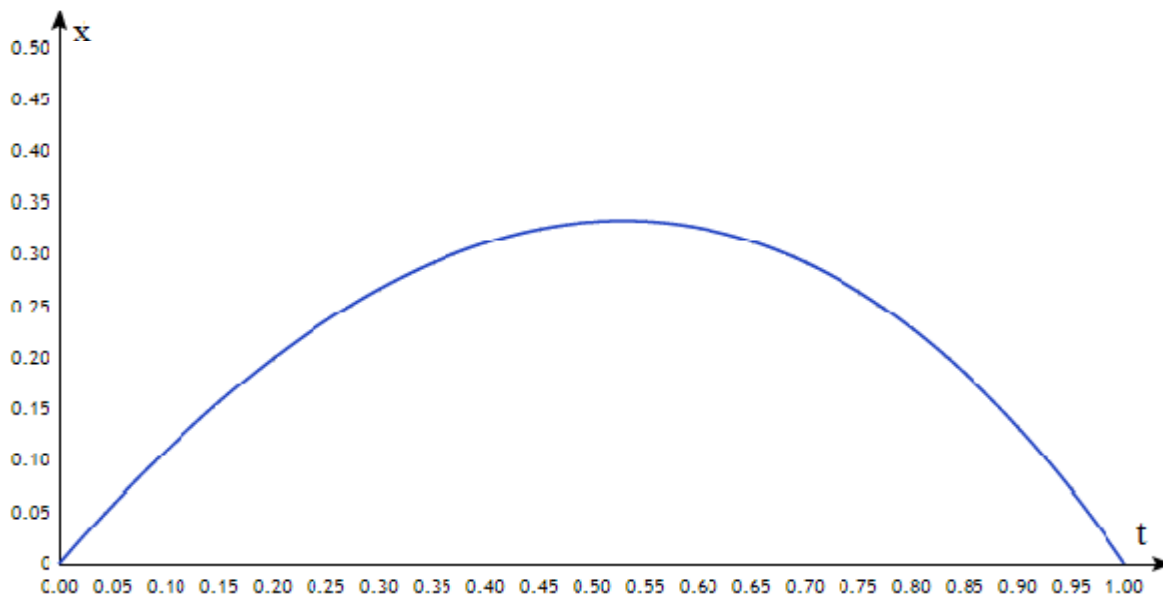
В процессе реализации итераций интеграл (3) был посчитан с помощью квадратурной формулы трапеций с использованием равномерной сетки. Расчеты необходимо вести до тех пор, пока с нужной точностью не обеспечим выполнение второго граничного условия $x(1, \alpha^*) = 0$ задачи (1)-(2).

Результаты вычислений представлены в следующей таблице

Положительное решение задачи (1)-(2) при $\alpha^* = 1,19$

t	0,00	0,10	0,20	0,30	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00
x	0,000	0,109	0,199	0,267	0,312	0,333	0,327	0,293	0,229	0,132	0,000

После интерполирования табличных данных получен следующий график приближенного решения задачи (1)-(2).



Литература

1. Абдурагимов Г. Э. О существовании и единственности положительного решения краевой задачи типа Штурма-Лиуввиля для одного нелинейного функционально-дифференциального уравнения второго порядка // Вестник ВГУ. Физика. Математика. – 2012. – № 2. – С. 77-80.

NUMERICAL IMPLEMENTATION OF THE BOUNDARY VALUE PROBLEM FOR ONE NONLINEAR SECOND-ORDER INTEGRO-DIFFERENTIAL EQUATION

G. E. Abduragimov

Dagestan State University, Makhachkala

Using an iterative method, an approximate positive solution of the boundary value problem for one nonlinear integro-differential equation of the second order is constructed.

Keywords: boundary value problem, positive solution, iterations.

ВАРИАЦИОННЫЙ ПРЕДЕЛ КАК ПОКАЗАТЕЛЬ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ТОРСИОННОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

А. Н. Белов¹, В. В. Туровцев²

¹Тверской государственный университет

Belov.AN@tversu.ru

²Тверской государственный медицинский университет

Рассмотрена задача об эффективности применения базисных функций Матъе к решению торсионного уравнения Шрёдингера. Проведен численный эксперимент по определению значения параметра функций Матъе, при котором существенно улучшается сходимость уровней энергии к вариационному пределу.

Ключевые слова: внутреннее вращение, функции Матъе, матрица гамильтониана, торсионное уравнение Шрёдингера.

В представленной работе нами продолжено рассмотрение задачи о повышении эффективности квантовомеханических расчетов. Ранее [1], на примере применения функций Матъе к изучению внутреннего вращения в молекуле этилового спирта, был сделан вывод об адекватности предложенного подхода. Однако проблема подбора оптимальных параметров базиса осталась открытой. Так, до сих пор не выяснено оптимальное значение параметра q функций $ce_n(q, \varphi)$ и $se_n(q, \varphi)$

$$\Psi = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \psi_n U_n, \quad U_0 = ce_0(q, \varphi), \quad U_n = ce_n(q, \varphi) + i \cdot se_n(q, \varphi), \quad (1)$$

где Ψ есть волновая функция в торсионном уравнении Шрёдингера

$$-\frac{d}{d\varphi} F(\varphi) \frac{d}{d\varphi} \psi + V(\varphi) \psi = E\psi. \quad (2)$$

Эффективность предложенных алгоритмов напрямую связана с подбором параметра q . Требуется, чтобы при формировании матрицы гамильтониана (2) вычисление интегралов [2] было наиболее простым при меньшем количестве шагов. Этот подход оправдан и будет рассмотрен в последующих работах. В представленной статье внимание сосредоточено на другом показателе эффективности – скорости достижения вариационного предела для энергий уровней, получаемых из матрицы гамильтониана в (2), в случае разложения (1). Сравнение с численным решением (2) в тригонометрическом базисе [3] было проведено на примере несимметричной молекулы $FC_2H_4-C_2H_5$.

По сути, вариационный предел здесь можно определить как минимально необходимое количество базисных функций в разложении (1) для получения энергий уровней с заданным количеством значащих цифр. Ход вычислительного эксперимента можно условно разделить на две части. Сначала фиксировалось значение q и менялось количество базисных функций в разложении (1)

от 10 до 210 с шагом 10. Учитывалось количество уровней, значения которых изменялись не более чем на некоторую малую величину. Этим определялась зависимость количества уровней, полученных с необходимой точностью, от количества базисных функций. Следующим шагом численного эксперимента было повторение этих же действий, но при другом q .

Вычислительный эксперимент показал, что для большинства значений q вариационный предел совпадает с вариационным пределом в случае тригонометрического базиса. Однако было обнаружено, что существует такое $q_{эфф}$, что при $q \rightarrow q_{эфф}$ порядковый номер уровня энергии на вариационном пределе приближается к числу базисных функций, что невозможно в тригонометрическом базисе. Т.е. сходимость (1) достигалась при много меньшем базисе, чем в [3]. Для исследуемой молекулы эффективное значение параметра оказалось $q_{эфф} \approx 10$.

Литература

1. Белов А. Н. Численный эксперимент как часть тестирования метода решения торсионного уравнения Шрёдингера в базисе функций Матье / А. Н. Белов, В. В. Туровцев, Ю. Д. Орлов // Сб. тр. IX Междунар. конф. «Химическая термодинамика и кинетика». Тверь: изд-во ТвГУ, 2019. С. 66.
2. Туровцев В. В. Потенциал и матричные элементы гамильтониана внутреннего вращения в молекулах в базисе функций Матье / В. В. Туровцев, Ю. Д. Орлов, А. Н. Цирулев // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 119. – № 2. – С. 199-203.
3. Lewis J. D., Laane J. Periodic potential energy functions with sine and cosine terms // J. Mol. Spect., 1977. V. 65, No. 1. P. 147-154.

VARIATIONAL LIMIT AS A CRITERION OF EFFECTIVITY OF TORSION SCHRÖDINGER EQUATION SOLUTION

A. N. Belov¹, V. V. Turovtsev²

¹Tver State University

²Tver State Medical University

The problem of efficiency of basic set Mathieu function application to the solution of the Schrodinger torsion equation is considered. A numerical experiment was conducted to determine the value of the parameter of Mathieu functions, which significantly improves the convergence of energy levels to the variational limit.

Keywords: internal rotation, Mathieu function, Hamiltonian matrix, torsion Schrödinger equation.

ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ФУНКЦИЙ МАТЬЕ С БОЛЬШИМ ПАРАМЕТРОМ ПРИ РЕШЕНИИ ТОРСИОННОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

А. Н. Белов¹, В. В. Туровцев²

¹Тверской государственный университет

Belov.AN@tversu.ru

²Тверской государственный медицинский университет

Рассмотрены функции Матье с большими параметрами. Показано, что в широком интервале аргумента значение таких функций близко к нулю. Эта особенность приводит к существенному уменьшению абсолютных значений интегралов, вычисляемых при формировании матрицы гамильтониана торсионного уравнения Шрёдингера, и эффективности его численного решения.

Ключевые слова: внутреннее вращение, функции Матье, матрица гамильтониана, торсионное уравнение Шрёдингера.

Данная работа продолжает тему оптимизации квантовомеханических расчетов внутреннего вращения молекул с использованием функций Матье. Внутренне вращение в молекулах описывается торсионным уравнением Шрёдингера [1]

$$-\frac{d}{d\varphi} F(\varphi) \frac{d}{d\varphi} \psi + V(\varphi) \psi = E\psi, \quad (1)$$

где $V(\varphi)$ – потенциал вращения, $F(\varphi)$ – структурная функция, $\varphi \in [0, 2\pi]$ – двугранный угол внутреннего вращения. В разрабатываемом подходе потенциал и структурная функция аппроксимируются в действительном базисе функций Матье ce_n и se_n [4]

$$V(\varphi) = C_v + \sum_{i=0}^{I_1} v'_i ce_i(q_v, \varphi) + \sum_{i=1}^{I_2} v''_i se_i(q_v, \varphi), \quad (2)$$

$$F(\varphi) = C_f + \sum_{j=0}^{J_1} f'_j ce_j(q_f, \varphi) + \sum_{j=1}^{J_2} f''_j se_j(q_f, \varphi), \quad (3)$$

а решение (1) ищется в виде разложения (4) по комплекснозначному базису U_n (5) [3]

$$\Psi = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \psi_n U_n, \quad (4)$$

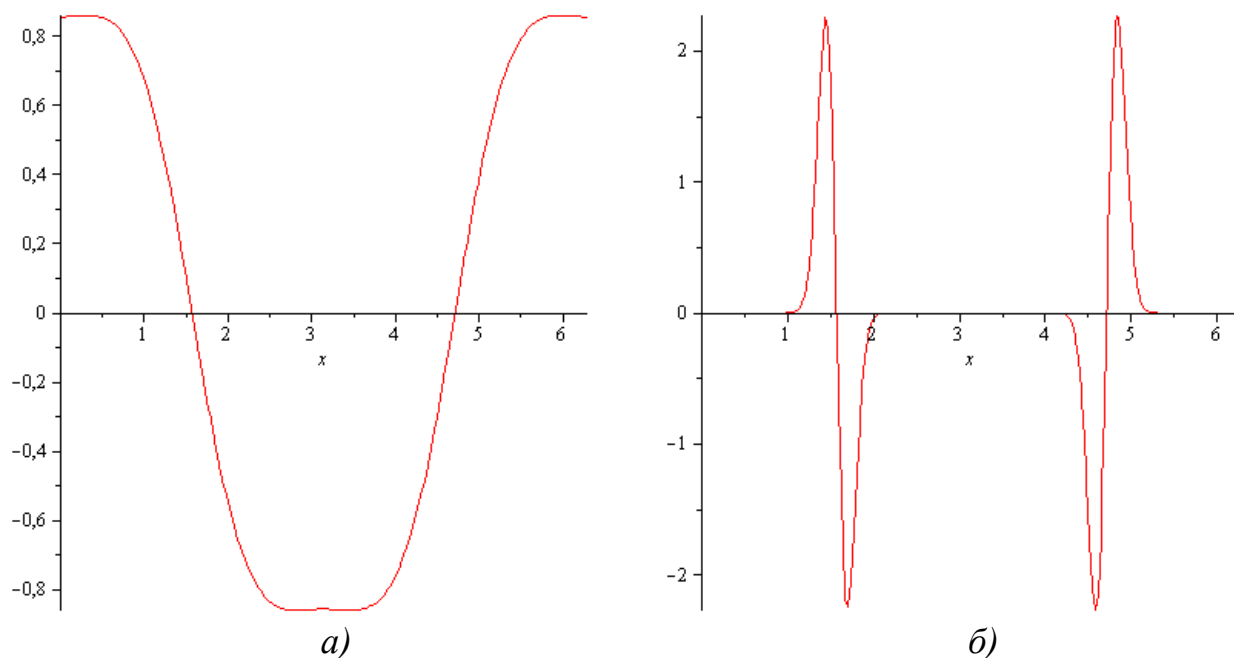
$$U_0 = ce_0(q, \varphi), \quad U_n = ce_n(q, \varphi) + i \cdot se_n(q, \varphi), \quad (5)$$

где Ψ – волновая функция, являющаяся решением торсионного уравнения (1), а ψ_n – комплекснозначные коэффициенты разложения (4) по базису (5).

Предложенная аппроксимация (2) позволяет сократить количество базисных функций по сравнению с разложением по тригонометрическому базису и, тем самым, повысить точность и производительность используемых алгоритмов. Общая процедура численного решения (1) в матричном виде описана в [2], а в [3] представлена методика вычисления интегралов для элементов матрицы гамильтониана.

Проверка применимости метода функций Матье при описании внутреннего вращения была проведена на примере этилового спирта [5]. Были получены результаты, достаточно близкие к экспериментальным. Однако, остаются открытыми ряд вопросов, связанных с эффективностью метода. В частности, пока не выработаны методики выбора оптимального параметра q в аппроксимации (5).

Исходя из большого количества тестовых расчетов, в качестве возможного варианта нами предлагается использование в (4) функций Матье с большим значением параметра q . Это позволило бы существенно уменьшить значения недиагональных элементов матрицы гамильтониана. Поясним это вычислительным примером. На рисунке представлены графики функций $se_1(q=1, \varphi)$ и $se_1(q=1000, \varphi)$.



Сравнение вида графиков функций Матье при различном параметре q : а) график функции $se_1(q=1, \varphi)$; б) график функции $se_1(q=1000, \varphi)$

Видно, что при высоком значении параметра q на значительном интервале аргумента значения функции асимптотически приближается к нулю. Тогда, абсолютные значения большинства интегралов, рассмотренных в [3], будут уменьшаться, что, в свою очередь, приведет к уменьшению значений недиагональных элементов матрицы гамильтониана. Например, значение интеграла

$\int_0^{2\pi} ce_1(q, \varphi) ce_6(q_v, \varphi) ce_5(q, \varphi) d\varphi$ при $q_v = 1$ и $q = 1$ будет ≈ 1.562311649 , а при $q_v = 1$ и $q = 1000$ будет $\approx 2.163248905 \cdot 10^{-22}$. Отмеченное выше свойство используется нами при изучении зависимости выхода на вариационный предел собственных значений матрицы гамильтониана от разных q .

Литература

1. Внутреннее вращение молекул / под ред. В. Дж. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1977. – 510 с.
2. Белов А. Н. Гамильтониан одномерного торсионного уравнения Шредингера в комплекснозначном базисе функций Матье / А. Н. Белов, В. В. Туровцев, Ю. Д. Орлов // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 6. – С. 7-12.
3. Туровцев В. В. Решение одномерного торсионного уравнения Шредингера с периодическим потенциалом общего вида / В. В. Туровцев, А. В. Белоцерковский, Ю. Д. Орлов // Оптика и спектроскопия. – 2014. – Т. 117. – № 5. – С. 731.
4. Белов А. Н. Аппроксимация структурной функции и потенциала внутреннего вращения в действительном базисе функций Матье / А. Н. Белов, П. А. Захаров, В. В. Туровцев // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIX Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2018. С. 30-32.
5. Белов А. Н. Численный эксперимент как часть тестирования метода решения торсионного уравнения Шредингера в базисе функций Матье / А. Н. Белов, В. В. Туровцев, Ю. Д. Орлов // Сб. тр. IX Междунар. конф. «Химическая термодинамика и кинетика». Тверь: изд-во ТвГУ, 2019. С. 66.

LARGE PARAMETER OF MATHIEU FUNCTIONS FOR SCHRODINGER TORSION EQUATION NUMERIC SOLUTION

A. N. Belov¹, V. V. Turovtsev²

¹Tver State University

²Tver State Medical University

Mathieu functions with large parameters are considered. It is shown that in a wide range of arguments the functions are close to zero. This leads to a significant decrease in the absolute values of integrals in the Hamiltonian matrix and provides a significant efficiency of numerical solution of the Schrodinger torsion equation.

Keywords: internal rotation, Mathieu function, Hamiltonian matrix, torsion Schrodinger equation.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСПОЗНАВАНИЕ ДЕФЕКТОВ ТЕКСТИЛЬНЫХ СТРОП

Г. К. Букалов, А. О. Бурыгин, И. Г. Панин

Костромской государственный университет
igpanin@list.ru

Рассматривается одна из задач моделирования дефектов текстильных строп – применение графовых методов обнаружения сообществ, которые строятся по фотоизображениям строп. Изображение стропы проходит начальную сегментацию, а затем производится построение взвешенного неориентированного графа, вершины которого представляют регионы, полученные после начальной сегментации. Веса ребер вычисляются исходя из признаков цвета и текстуры региона изображения. Каждому сообществу соответствует маска реального объекта на изображении.

Ключевые слова: выделение сообществ на графах, сегментация изображения, гистограмма ориентированных градиентов (HOG), критерий Ньюмена.

Распознавание дефектов стропы по ее изображению делится на два этапа:

1. Сегментация изображения для выявления контура объекта распознавания через выявления масок объектов (данный этап можно пропустить, если входные данные нормализованы);

2. Построение модели для нахождения и классификации дефектов в выбранной области изображения.

В данной работе рассматривается первый из этих этапов – задача сегментации изображений через выявления масок объектов, являющейся фундаментальной проблемой в компьютерном зрении. Целью сегментации является разбиение изображения на уникальные и однородные области, соответствующие значимым частям изображения.

Среди всего множества алгоритмов сегментации изображений выбран графовый метод выявления регионов, который представляет компоненты изображения как математически обоснованные структуры, что упрощает задачу сегментации и делает вычисления более быстрыми и эффективными. Задача сегментации изображений на основе графов заключается в разбиении первоначального графа на несколько подграфов таким образом, чтобы каждый из них представлял значимый объект интереса.

Графовые сети могут упростить сегментацию и анализ изображений, но в первоначальном виде они теряют некоторую важную информацию, которая влияет на производительность сети и результативность сегментации. Для уменьшения потерь выбирается способ начальной сегментации изображения путем построением графа областей смежности (Region Adjacency Graph – RAG) [1]. В этом случае начальные области считаются узлами графа, и если области являются смежными, вводится ребро между ними. Далее ребра графа взвешиваются

ваются в соответствии со сходством между значимыми визуальными признаками областей (текстурой и цветом). Для разделения полученного графа смежности взвешенных областей (Weighted Region Adjacency Graph – WRAG) на набор сообществ применяется алгоритм обнаружения сообществ. Эти сообщества используются для группировки похожих смежных областей на изображении. Все узлы, принадлежащие к одному сообществу, считаются принадлежащими к одной области и объединены в одну область на изображении. Процесс повторяется до тех пор, пока не появится разница между открытыми структурами сообщества двух последовательных итераций.

Таким образом, основной процесс сегментации изображения выполняется следующим образом:

1. Моделируется изображение с WRAG, который использует преимущества топологических и визуальных свойств изображений (текстуры, цвета).
2. Решаются задачи сегментации при использовании алгоритмов обнаружения сообществ.
3. Итерационно решается проблема пере/недосегментации.

Целью начальной сегментации является разбиение изображения на однородные, как можно меньшие области. На этом этапе в работе используются несколько низкоуровневых методов сегментации: Superpixels, Meanshift, Levelset и Watershed [2, 3].

Метрика сходства цвета определяется исходя из цвета в сегментации, которая является важной и, при этом, простой составляющей. Каждый пиксель в цветном изображении представлен трехмерным вектором, и предполагается, что значение интенсивности пикселей данной области распределено по нормальному закону. Поэтому распределение области задается как

$$R_i \sim N(\mu_i, var_i),$$

где μ_i – средний вектор интенсивности пикселей, вычисленный в трехмерном цветовом пространстве в областях R_i , а var_i обозначает дисперсию R_i .

Для измерения сходства между двумя распределениями выбирается среднее расстояние (Mean Distance – MD), поскольку это, как правило, хорошее приближение с более низкой сложностью, и определяется следующим образом:

$$D_{MD}(R_i, R_j) = (\mu_i - \mu_j)^T (\mu_i - \mu_j).$$

Для преобразования распределения расстояния цветовых параметров в метрику сходства используется ядро радиальной базисной функции:

$$c_{ij} = \exp\left(\frac{-D_{MD}(R_i, R_j)}{2\sigma^2}\right),$$

где σ – параметр, определенный пользователем.

Выбор подходящего цветового пространства для сегментации цветного изображения является важным шагом для достижения лучшей производительности сегментации. В работе выбрано цветовое пространство LAB, которое больше всего соответствует зрительной системе человека и представляет собой

3-осевое цветовое пространство с пространством L для светлоты и пространствами A и B для обозначения красно-зеленого и желто-зеленого оттенка соответственно.

Использование только цветового признака в изображении не может обеспечить хороший результат сегментации, так как цветовой признак в некотором однородном объекте разложит закономерности изображения на различные сегменты, поэтому необходимо привлечь рассмотрение свойства текстур. Для этого используется функция, называемая гистограммой ориентированных градиентов (Histogram of Oriented Gradients – HOG), которая хорошо известна в обработке изображений и компьютерном зрении для обнаружения объектов на изображении. Она вычисляет количество проявлений градиентной ориентации в локализованных частях изображения.

Структурирование сложных сетей на сообщества – это процесс, который можно описать как объединение узлов в сообщества таким образом, что плотность ребер внутри сообществ выше, чем между самими сообществами. Наиболее используемый критерий для извлечения структуры сообщества в сетях введен Ньюменом [4] и определяет меру, названную модульностью:

$$Q = \sum (e_{ii} - a_i^2),$$

где e_{ii} обозначает долю ребер сети, которые входят в сообщество i , а a_i^2 обозначает долю ребер, которые вставляются случайным образом. Значение модульности Q находится в диапазоне от 0 до 1. Высокое значение модульности означает сильную структуру сообщества сети.

Для обнаружения сообществ рассматривались следующие алгоритмы: FMCDRN [5], Infomap [6], FGMDO [7], Louvain [8]. Таким образом, для решения указанных задач предлагаемая структура использует все присущие изображению свойства, а также эффективную оптимизацию по модульности/стабильности в использовании.

Для исследования эффективности предложенной структуры необходимо, во-первых, изучить влияние параметров, используемых при вычислении подобия между регионами, и, чтобы обеспечить наилучшие результаты сегментации, проводились начальные эксперименты на 10 изображениях наборов данных с использованием нескольких значений параметра балансировки и выбором подходящего значения.

Во-вторых, было выполнено сравнение между метриками изображения (цветом и текстурой), для чего рассматривалась производительность предлагаемого подхода количественно, а так же качественное изменение результатов сегментации, в тех случаях, когда в процессе сегментации используются либо только текстура или цвет, либо связка цвет-текстура.

Для оценки эффективности предлагаемой системы использовался вероятностный индекс Рэнда (Probabilistic Rand Index или PRI) и вариация информации (Variation of Information – VOI), которые являются хорошо известными оценочными метриками для сегментации. PRI измеряет меру сходства между

двумя кластерами данных, а метрика VOI измеряет сумму информационного прироста и потери информации между двумя сегментами.

Также оценивалась эффективность предлагаемого подхода с двух сторон: метриками точности (Precision) и полноты (Recall). Точность измеряет долю граничных пикселей, которые соответствуют своим истинным границам изображения:

$$Precision = \frac{|S_{test} \cap S_i|}{|S_{test}|},$$

где S_i – истинная сегментация по разметке, S_{test} – тестовая сегментация, а $|S|$ – обозначает число граничных пикселей в сегментации. Полнота показывает меру обнаруженных пикселей на границе сегментов, являющихся истинными:

$$Recall = \frac{|S_{test} \cap S_i|}{|S_i|}$$

Тогда F -мера, как гармоническое среднее полноты и точности, определяется при $\alpha = 0.5$:

$$F = \frac{Precision \cdot Recall}{(1 - \alpha) \cdot Recall + \alpha \cdot Precision}.$$

Эксперименты проводились с использованием двух алгоритмов начальной сегментации. Выявлено, что алгоритм MeanShift является более подходящим, чем алгоритм Superpixels для всех четырех метрик, а также по минимальному времени их вычисления.

Для выбора алгоритма детекции сообществ, сравнивались алгоритмы FMCDRN, Infomap, FGMDO, Louvain. По всем параметрам наилучшую сегментацию изображения дает алгоритм FMCDRN.

При сравнении предложенного алгоритма с известными методами сегментации Modularity-based image segmentation [2], WiseCode [3], LC [9], EDISON [10], показано, что все выбранные и рассмотренные метрики имеют лучшие показатели.

Таким образом, в данной работе предложена структура системы сегментации изображений, которая учитывает преимущества присущих изображениям свойств и оптимизацию модульности/стабильности. При использовании как гистограммы ориентированных градиентов (HOG) текстурного признака, так и цветового признака, матрица подобия строится адаптивно между различными областями путем оптимизации модульности/стабильности и объединения смежных областей изображений итеративно. Эксперименты показали, что предложенная структура системы дает наилучший качественный результат сегментации, и обеспечивает лучшую производительность по сравнению со всеми современными методами с точки зрения оценок PRI, VOI, точности и полноты. Поскольку общая структура основана на трех эффективных алгоритмах определения сообщества, она позволяет избежать проблемы наличия большого количества небольших областей в изображении и сохраняет информацию и законо-

мерности в объекте. Кроме того, он обеспечивает хорошую временную сложность и работает последовательно быстрее, чем современные алгоритмы.

Литература

1. Wu Zhenyu, Richard Leahy. An optimal graph theoretic approach to data clustering: Theory and its application to image segmentation // IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence. 15.11 (1993): p. 1101-1113.
2. Li Shijie, Dapeng Oliver Wu. Modularity-based image segmentation // IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology. 25.4 (2015): p. 570-581.
3. Abin A. A., Farzane Mahdisoltani, Hamid Beigy. WISECODE: wise image segmentation based on community detection // The Imaging Science Journal. 62.6 (2014): p. 327-336.
4. Newman Mark EJ. Fast algorithm for detecting community structure in networks // Physical review E. 69.6 (2004).
5. Ronhovde P., Nussinov Z. Local resolution-limit-free Potts model for community detection // Physical Review E 81, 046114 (2010).
6. Rosvall M., Bergstrom C. T. Maps of random walks on complex networks reveal community structure // Proceedings of the National Academy of Sciences, 105(4), p. 1118-1123.
7. Clauset A., Newman M. E. J, Moore C. Finding community structure in very large networks // Phys. Rev. E 70, 066111 (2004).
8. Blondel V. D., Guillaume J.-L., Lambiotte R., Lefebvre E. Fast unfolding of communities in large networks // J. Stat. Mech. (2008) P10008.
9. Yang A., Wright Y., Sastry S. Unsupervised segmentation of natural images via lossy data compression // Computer Vision and Image Understanding, 2008, p. 212-225.
10. Christoudias C. M., Georgescu B., Meer P. Synergism in low level vision // in Pattern Recognition, 2002. Proceedings. 16th International Conference on, IEEE, 2002, p. 150-155.

MODELING AND RECOGNITION DEFECTS OF TEXTILE SLINGS

G. K. Bukalov, A. O. Burygin, I. G. Panin

Kostroma State University

One of the problems of modeling defects in textile slings is considered - the use of graph methods for detecting communities, which are built from photo-images of slings. The image of the line goes through the initial segmentation, and then a weighted undirected graph is constructed, the vertices of which represent the regions obtained after the initial segmentation. The weights of the edges are calculated based on the color signs and texture of the image region. Each community corresponds to a mask of a real object in the image.

Keywords: community allocation on graphs, image segmentation, Region Adjacency Graph, histogram of oriented gradients (HOG), Newman criterion.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТОЯНИЙ ЗАМКНУТЫХ СИСТЕМ ПОСРЕДСТВОМ
РАНДОМИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМ ИТЕРИРОВАННЫХ ФУНКЦИЙА. Г. Буховец¹, А. К. Горностаев²¹Воронежский государственный аграрный университет имени императора Петра I
abuhovets@mail.ru²Московский технологический университет (МИРЭА)
agornostaevv@gmail.com

Возможные состояния замкнутой системы рассматриваются как состояния, возникающие в ходе взаимодействия элементов системы с некоторыми граничными условиями. Показано, что фазовое пространство такой статистической системы представляет собой фрактальное множество. Состояния определяются значением некоторого параметра и представляют аттрактор динамической системы. Перечисляются такие особенности аттрактора системы, как самоподобие, компактность, замкнутость.

Ключевые слова: рандомизированные системы итерированных функций, фрактальные множества, замкнутые системы.

Основная идея современной парадигмы науки заключается в: «... переходе от мышления в терминах структуры к мышлению в терминах процесса. ... В новой парадигме процесс мыслится как первичная категория, и любая структура, которую мы наблюдаем, есть проявление лежащего в ее основе процесса» [9]. На прагматическом уровне этот тезис выражается примерно так – мы можем считать, что нам что-то известно о данной совокупности объектов, если мы можем ее воспроизвести, т.е. смоделировать.

Для моделирования состояний системы будем предполагать, что задано множество граничных точек системы $Z = \{Z_j: j = 1, 2, \dots, K\}$, линейная оболочка которой $conv(Z)$ является границей системы, а внешним воздействием на систему можно пренебречь. Предположим, что движение элементов этой замкнутой системы внутри линейной оболочке Z описывается уравнением Ланжевена

$$\frac{dX}{dt} = (1 - \xi)(Z_j - X), \quad (1)$$

где X – координата положения элемента системы, Z_j – координата значения случайной величины Z , имеющей заданное распределение вероятностей $\{z_i/p_i\}$; ξ – параметр, определяющий величину внутренней энергии частицы. Поскольку Z в данной модели можно рассматриваться как некоторую случайную величину, то движение точки – элемента системы будет представлять случайный процесс, а поскольку вероятности $\{p_j\}_{j=1}^K$ предполагаются постоянными, то процесс будет стационарным.

Решения уравнения (1) можно найти, переходя к разностному уравнению, которое после соответствующих преобразований примет вид

$$X_{n+1} = \xi X_n + (1 - \xi)Z_j^{(n)}, \quad (2)$$

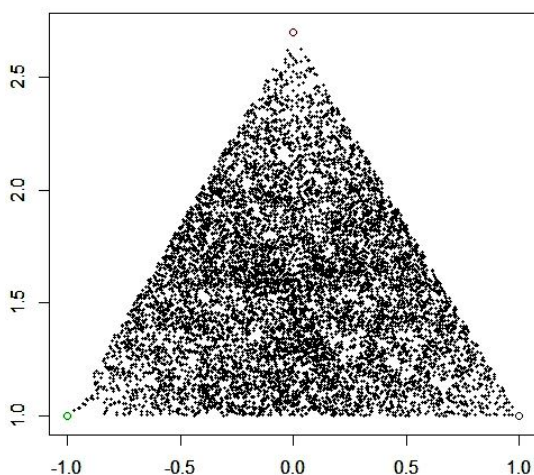
где n – номер итерации, ξ – параметр, значения которого принадлежат интервалу $(0;1)$. Полученное уравнение, его численная реализация будет представлять собой не что иное как рандомизированную систему итерированных функций (РСИФ) [1, 2], которую Барнсли [8] назвал ‘игрой хаоса’ (chaos game). Наиболее просто и наглядно результаты этого процесса выглядят в двумерном случае, когда множество представлено, например, вершинами треугольника, лучше равностороннего. В зависимости от значения параметра ξ и вероятностей выбора вершин многогранника $\{z_i/p_i\}$, будут генерироваться различные множества точек. В приведенном ниже примере выбор вершин треугольника равновероятен. Фигура, получаемая в этом случае, является аттрактором РСИФ, и носит название треугольника Серпинского.

Полученное уравнение (2) можно рассматривать как аффинное преобразование, в котором первое слагаемое ξX_n представляет линейную часть приращения (дифференциал), а второе слагаемое представляет смещение, которое в данном случае будет являться некоторым значением случайной величины. Очевидно, что линейная часть представляет оператор сжатия, поскольку $0 < \xi < 1$.

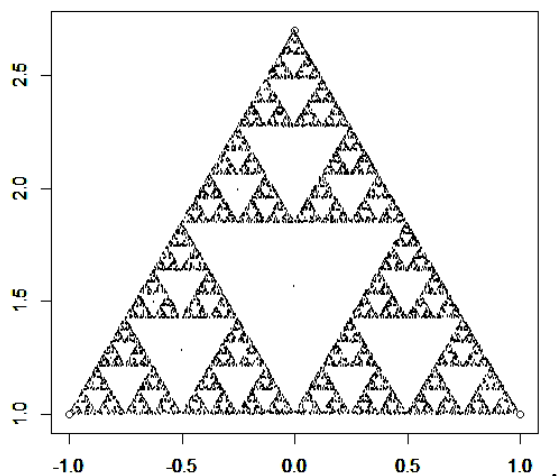
Значение параметра ξ при таком подходе может быть проинтерпретировано как внутренняя энергия системы (или температура). Ниже приводятся изображения результатов выполнения РСИФ при разных значениях параметра ξ . На рисунке представлен хаотический процесс в выпуклой оболочке $conv(Z)$. При определенных значениях параметра ξ этот процесс структурируется, т.е. аттрактор распадается на K непересекающихся фрагментов, которые подобны исходному множеству $Z = \{Z_j\}$. При дальнейшем уменьшении значений параметра ξ происходит «вымораживание» исходного множества, которое заключается в том, что множество распадается на K изолированных фрагментов, тяготеющих к определенной точке протофрактала Z . Другими словами, при изменении значений параметра системы ξ происходит процесс структурообразования. Получение фрактальных конструкций хорошо видно на рисунке.

Для того, чтобы убедиться, что аттрактор РСИФ имеет фрактальную структуру, удобно рассмотреть другую схему построения аттрактора, которую можно получить, выписывая последовательно итерационные действия на каждом шаге и приводя подобные в полученном соотношении [5, 10]. В этом случае алгоритм построения аттрактора будет представлен урновой схемой [11], которая выражается в разнесении и последующем суммировании членов ряда $\mu \sum_{i=1}^{\infty} \xi^i = 1$, где $\mu = \xi^{-1}(1 - \xi)$ – нормировочная константа. В результате выполнения этих действий будет сформирована матрица A , с помощью которой аттрактор РСИФ будет представлен в виде $X = AZ$.

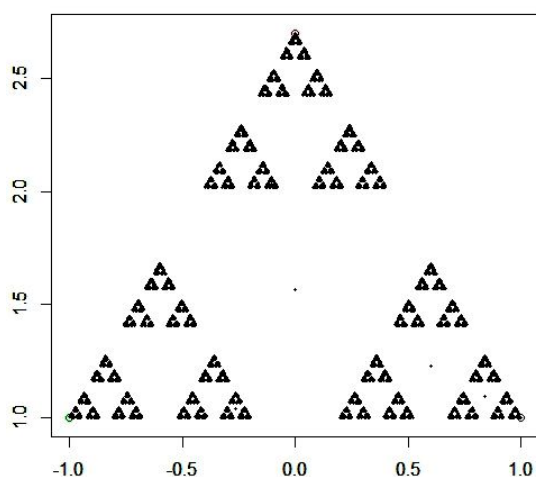
Было показано [3, 10], что получаемое множество является вполне несвязным, имеет нулевую лебегову меру, а в случае появления структуры будет самоподобным [4].



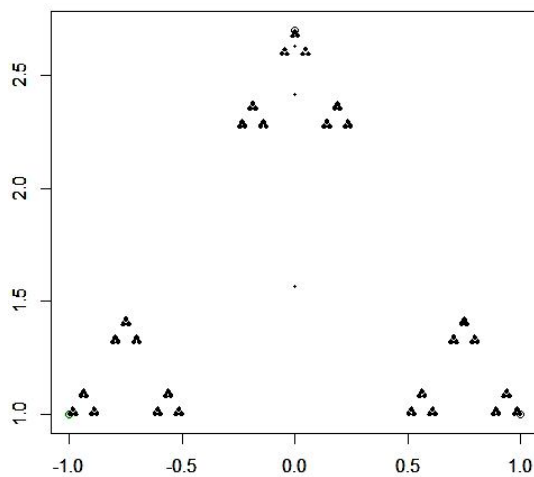
$$\xi=0,67 (\mu=0,5)$$



$$\xi=0,5 (\mu=1)$$



$$\xi=0,4 (\mu=1,5)$$



$$\xi=0,25 (\mu=3)$$

Примеры выполнения процедуры РСИФ при различных значениях параметра $\xi(\mu)$

Таким образом, использование РСИФ позволяет моделировать структурные особенности динамики замкнутых систем, такие как наличие отдельных кластеров, фазовые переходы при изменении значений внутренних параметров. Построенные модели находят приложения в биоэкологии [6], в задачах прогнозирования, в моделировании рынков финансовых инструментов [9], в решении ряда физических задач [7].

Литература

1. Barnsley M. F. Superfractals / M. F. Barnsley – Cambridge: Cambridge University Press, 2006. – 464 p.
2. Bukhovets A. G. Modeling of fractal data structures / A. G. Bukhovets, E. A. Bukhovets // Automation and Remote Control, Vol. 73, No.2 (2012), p. 381-385.
3. Bukhovets A. G. Ultrametric properties of the attractor spaces for random iterated linear function systems / A. G. Bukhovets, P. V. Moskalev // Journal of Physics Conference Series 973(1):012028, DOI 10.1088/1742-6596/973/1/012028.

4. Hutchinson J. E. Fractals and self-similarity / J. E. Hutchinson // *Indiana Univ. Math. J.* 1981. Vol. 30. P. 713-747.
5. Буховец А. Г. Структура аттрактора рандомизированных линейных систем итерированных функций / А. Г. Буховец, Т. Я. Бирючинская // *Вестник ВГУ. Системный анализ и информационные технологии.* – 2016. – № 2. – С. 5-10.
6. Гелиашвили Д. Б. и др. Фракталы и мультифракталы в биоэкологии: монография. – Н. Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2013. – 370 с.
7. Иванов С. А. Основы теории случайных кластерных процессов и их практическое применение / С. А. Иванов. – М.: ЛЕНАНД, 2017. – 224 с.
8. Кроновер Р. М. Фракталы и хаос в динамических системах / Р. М. Кроновер. – М.: ТЕХНОСФЕРА, 2006. – 488 с.
9. Мандельброт Б. Фракталы и хаос. Множество Мандельброта и другие чудеса / Б. Б. Мандельброт // М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009. – 392 с.
10. Буховец А. Г. / Моделирование фрактальных свойств системных объектов // А. Г. Буховец, Т. Я. Бирючинская // *Вестник ВГУ. Системный анализ и информационные технологии.* – 2011. – № 2. С. 22-26.
11. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. В 2-х томах. Т. 1: Пер. с англ. – М., 1984. – 528 с.

MODELING THE CONDITIONS OF CLOSED SYSTEMS BY RANDOMIZED SYSTEMS OF ITERED FUNCTIONS

A. G. Bukhovets¹, A. K. Gornostaev²

¹Voronezh State Agricultural University named after Emperor Peter the Great

²MIREA - Russian Technological University, Moscow

Possible states of a closed system are considered as states that arise during the interaction of elements of the system with some boundary conditions. It is shown that the phase space of such a statistical system is a fractal set. The states are determined by the value of a certain parameter and represent an attractor of a dynamical system. Such features of the system attractor as self-similarity, compactness, isolation are listed.

Keywords: randomized systems of iterated functions, fractal sets, closed systems.

ОБМЕН ЭНЕРГИЕЙ В ЦЕПОЧКЕ МАЯТНИКОВ
С КРАТНЫМИ ЧАСТОТАМИ

Е. Е. Гетманова

ООО «Дистанционный репетитор», Москва
elge@mail.ru

В работе показано, как осуществляется обмен энергией между различными группами маятников в цепочке, где создаются ансамбли волн из различных групп линейных несвязанных осцилляторов. Показано, что обмены энергией осуществляются между волнами-группами, которые определены как совокупности маятников с одинаковой фазой, формирующиеся в определенные моменты времени.

Ключевые слова: волны в системе несвязанных линейных осцилляторов, обмен энергией между волнами-группами.

В работе [1] показано, что несвязанные линейные осцилляторы (маятники, расположенные в ряд) с кратными частотами $\omega_{0s} = 5s$, $s = 1, 2, \dots, s_{MAX}$ под действием импульса $T = \frac{2\pi}{\omega}$ силы с частотой ω совершают свободные колебания, характерной особенностью которых является согласованное волновое движение между маятниками, входящими в определенные (волновые) группы.

Целью данного исследования является рассмотрение обмена энергией между данными маятниками. Положим, $\omega = 100 \text{ с}^{-1}$ (в этом случае $s_{MAX} = 40$). В результате действия импульса силы, маятники получают различную энергию. Осцилляторы с частотами $\omega_{012} = 60 \text{ с}^{-1}$, $\omega_{013} = 65 \text{ с}^{-1}$, ..., $\omega_{022} = 110 \text{ с}^{-1}$ получают порядка 60% всей энергии, а низкочастотные $\omega_{01} = 5 \text{ с}^{-1}$, $\omega_{02} = 10 \text{ с}^{-1}$, ..., $\omega_{05} = 25 \text{ с}^{-1}$ и высокочастотные $\omega_{031} = 155 \text{ с}^{-1}$, $\omega_{032} = 160 \text{ с}^{-1}$, ..., $\omega_{039} = 195 \text{ с}^{-1}$ – по 3%. Волны визуально наблюдаются как смещение, сжатие или растяжение пружин (пружинные маятники) или увеличение (уменьшение) объема при рассмотрении колебаний, связанных с гармоническим изменением объема. Волны, непрерывно формирующиеся в цепочке, состоят из маятников с различной энергией. Максимальное смещение маятников с большой энергией превышает максимальное смещение маятников с малой энергией. Положим, что положительное смещение связано со сжатием пружины (или уменьшением объема), отрицательное смещение показывает растяжение пружины (увеличение объема). Численные исследования показали, что при свободных колебаниях несвязанных осцилляторов, волны (реализованные волновыми группами) создаются таким образом, что энергия волн, полученных в результате растяжения пружин (увеличении объемов), равняется энергии волн, созданных при сжатии пружин (уменьшении объемов).

В данной работе показано, как происходит обмен энергией между группами маятников. Установлено, что обмен энергией между группами осциллято-

ров осуществляется в определенные моменты времени, когда в цепочке создаются волны-группы.

Как показано в [1], условием существования волн является одинаковая (в любой момент времени) разность фаз между соседними маятниками в любой волновой группе (некоторой группе маятников), которая создает волну. Условием существования волны-группы является одинаковость фаз (разность фаз кратна 2π) каждого маятника, входящего в одну или несколько волновых групп. Если фазы осцилляторов в одной или нескольких волновых группах совпадают, то потенциальная энергия этих маятников определяет энергию волны-группы, в которую входят данные маятники. Например, в момент $t = 5,5T$ в цепочке создается ансамбль из четырех волн (рис. 1а), которые построены из четырех волновых групп $1 + 4i$, $2 + 4i$, $3 + 4i$, $4 + 4i$, $i = 0, 1, \dots, 9$. Фаза каждого маятника в любой волновой группе равна $0,5\pi i$, разность фаз между соседними маятниками в волновых группах кратна 2π . Можно считать фазы одинаковыми, поскольку они обеспечивают одинаковое относительное смещение маятников, относящихся к одной волновой группе, в данный момент времени. Это позволяет рассматривать совокупность маятников с одинаковой фазой, как волну-группу с энергией, равной сумме потенциальных энергий, включенных маятников. Такое допущение дает понимание процесса обмена энергией между различными волнами-группами маятников в процессе колебаний. В момент $t = 5,5T$ волна-группа, созданная маятниками $3 + 4i$, $i = 0, 1, \dots, 9$, имеет энергию, равную по модулю, но противоположную по знаку энергии волны-группы $4 + 4i$, $i = 0, 1, \dots, 9$ (рис. 2а). Сжатие пружин маятников одной группы привело к растяжению пружин маятников другой группы.

В момент $t = 5,55T$ фаза каждого маятника в любой волновой группе равняется $0,505\pi i$, разность фаз между соседними в любой волновой группе маятниками равна $2,02\pi$ (рис. 1б), относительное смещение различно и передачи энергии от одной группы маятников к другой не происходит.

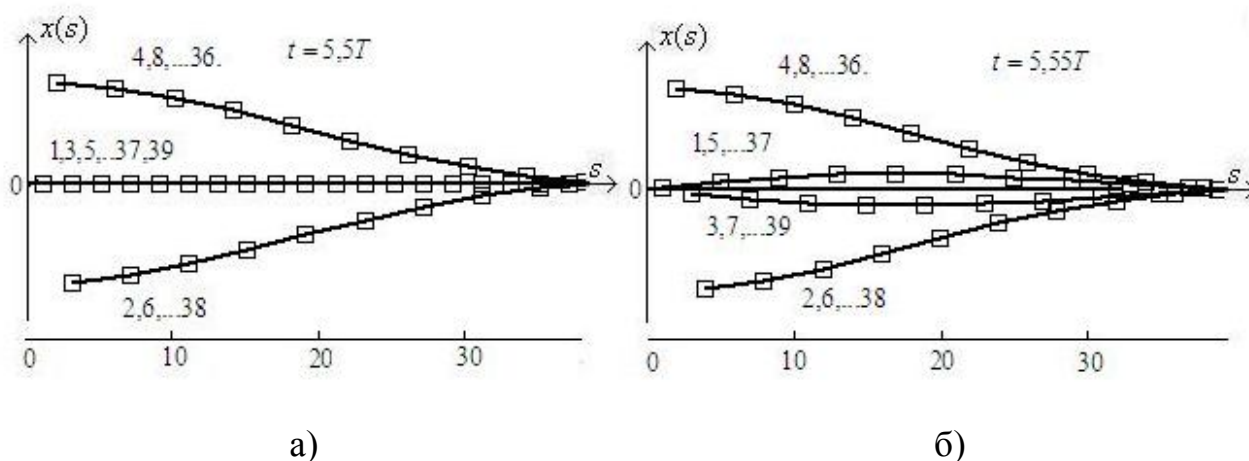


Рис. 1

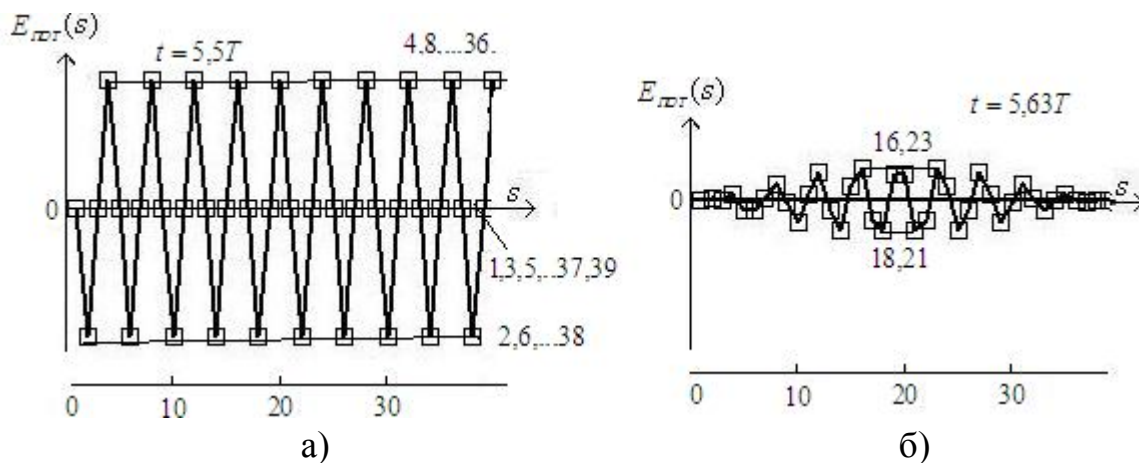


Рис. 2

Количество волн-групп, как правило, на единицу больше половины волн ансамбля, к которому относятся данные волны-группы. Совокупность осцилляторов с фазой равной фазе первоначального маятника $\omega_{01} = 5 \text{ с}^{-1}$ ($s_{\text{НАЧ}} = 1$), образуется во всех возможных ансамблях волн и особенности её изменения свойственны всем возможным совокупностям осцилляторов с одинаковой фазой и различными первоначальными маятниками.

Энергия волны-группы с первоначальным маятником $\omega_{01} = 5 \text{ с}^{-1}$ ($s_{\text{НАЧ}} = 1$) меняется, что связано с последовательным формированием в цепочке ансамблей с различным числом волн, в результате чего объединяются в одну группу (волну-группу) маятники с разной энергией, но с одинаковой фазой. В моменты $5,5T$, $15,5T$, $25,5T$ и т.д. (в цепочке создан ансамбль из четырех волн), энергия волны-группы ($\omega_{01} = 5 \text{ с}^{-1}$, $s_{\text{НАЧ}} = 1$) равна нулю, так как включает все нечетные маятники, которые имеют нулевое смещение (рис. 2а, рис. 3).

В следующий момент времени в цепочке формируется ансамбль из тридцати девяти волн, в момент $t = 5,63T$ фаза одинакова у маятников: 1) $\omega_{01} \omega_{038}$; 2) $\omega_{02} \omega_{037}$; и т.д. На рис. 2а показана энергия всех волн-групп и отмечены объединения осцилляторов по принципу одинаковости фазы ω_{016} , ω_{023} ($s_{\text{НАЧ}} = 16$) и ω_{018} , ω_{021} ($s_{\text{НАЧ}} = 18$). Очевидно, что изменение числа маятников (даже при незначительном изменении фазы) вызывает существенное уменьшение энергии группы с $\omega_{01} = 5 \text{ с}^{-1}$ ($s_{\text{НАЧ}} = 1$).

В интервалах $T \leq t < 5,5T$, $15,5T \leq t < 25,5T$ и т.д. амплитуда волны-группы с $\omega_{01} = 5 \text{ с}^{-1}$ ($s_{\text{НАЧ}} = 1$) совершает осцилляции в режиме «сжатие - равновесное положение» (рис. 3). В интервалах $5,5T \leq t < 15,5T$, $25,5T \leq t < 35,5T$ и т.д. характер осцилляций амплитуды демонстрирует «растяжение - равновесное положение». Амплитуда осцилляций увеличивается, достигает максимума в момент $10,5T$ (в цепочке существуют две волны из волновых групп, включающих четные и нечетные маятники). Затем изменения осцилляций осуществляется в обратном порядке, достигая в момент $21T$ значения аналогичного тому, что имело место в момент T .

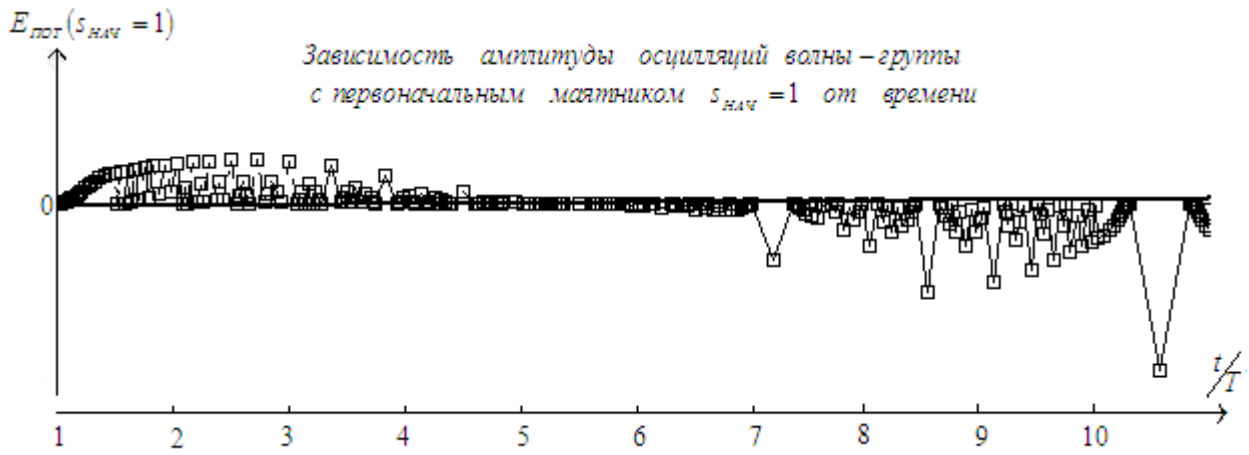


Рис. 3

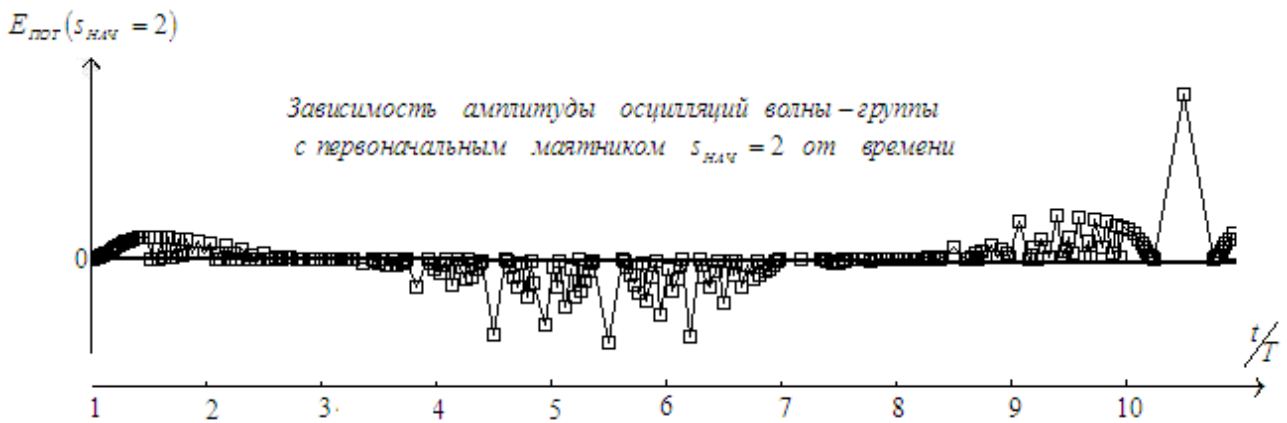


Рис. 4

Изменение амплитуды осцилляций (рис. 4) волны-группы с первоначальным маятником $\omega_{02} = 10 \text{ с}^{-1}$ ($s_{нач} = 2$) показывает, что в моменты $3T, 8T, 13T, \dots$ маятники волновой группы имеют нулевое смещение (в цепочке существует ансамбль из восьми волн, осцилляторы волновых групп $2 + 8i, 6 + 8i, i = 0, 1, \dots, 8$ неподвижны). После прохождения нулевого положения волна-группа меняет режим осцилляций с «сжатие – равновесное положение» на «растяжение – равновесное положение» (момент $3T$) (или наоборот $8T$). В интервалах, где волна-группа с $s_{нач} = 1$ имеет практически нулевые осцилляции амплитуды, амплитуда осцилляций волны-группы с $s_{нач} = 2$ имеет существенную величину. И наоборот, если совокупность маятников с $s_{нач} = 2$ демонстрирует практически нулевые осцилляции амплитуды, то амплитуда осцилляций группы с $s_{нач} = 1$ значительна.

Выводы

1. Несвязанные маятники с кратными частотами, выполняющие свободные гармонические колебания под действие импульса силы, осуществляют согласованное движение, в результате чего маятники, входящие в группы (волновые группы, включающие разные маятники в разных временных интервалах) образуют волны. Между группами маятников осуществляется обмен энергией в моменты создания в цепочке волн-групп.

2. Волны-группы представляют совокупность осцилляторов, которые создаются в момент, когда фазы маятников, входящих в определенную волновую группу имеют одинаковую величину (разность фаз между соседними маятниками в любой волновой группе кратна 2π). Волна-группа – это совокупность маятников (включающих одну или несколько волновых групп) с одинаковой фазой в этот момент. Значение фазы, под которое «подбираются» маятники из всей совокупности, определяется фазой первоначального, входящего волну-группу, маятника. Если первоначальный маятник $\omega_{01} = 5 \text{ с}^{-1}$ ($s_{\text{НАЧ}} = 1$), то в любом сформированном ансамбле волн в волну-группу включаются маятники с фазой, равной фазе первоначального маятника. Если $\omega_{02} = 10 \text{ с}^{-1}$ ($s_{\text{НАЧ}} = 2$), то, в данную волну-группу включаются маятники, такой же фазой и т.д.

Энергия волн-групп является суммой потенциальных энергий маятников, создающих данную волну-группу. Положительная потенциальная энергия показывает сжатие пружин маятников (уменьшение объема), отрицательная – растяжение пружин маятников (увеличение объема). Численные исследования позволили установить, что суммарная энергия волн-групп, созданная маятниками, с положительной и отрицательной потенциальной энергией в любой момент существования волн-групп равна нулю. Таким образом, в процессе колебания группы маятников обмениваются энергией. У одной совокупности осцилляторов пружины сжимаются (объем уменьшается), а у другой – пружины растягиваются (объем увеличивается).

3. Осцилляции энергии каждой волны-группы объясняются последовательным образованием ансамблей с различным числом волн, из-за чего происходит включение в волну-группу маятников с различной энергией. Осцилляции энергии осуществляются в режимах «сжатие – равновесное положение» или «растяжение – равновесное положение». Это два режима существуют в определенном, для каждой волны-группы с заданным первоначальным маятником, интервале и разделяются интервалом времени, в котором осцилляции амплитуды практически равны нулю.

Литература

1. Гетманова Е. Е. Образование волн в системе несвязанных линейных осцилляторов / Е. Е. Гетманова // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII Международ. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный технический университет», 2014. Ч. 1. – С. 54-60.

ENERGY EXCHANGE ON A CHAIN OF LINEAR PENDULUMS WITH MULTIPLE FREQUENCIES

E. E. Getmanova

Company “DistTutor”, Moscow

Energy exchange between different group of linear pendulums with multiple frequencies is studied. It's established that on a chain of pendulums with multiple frequencies group-waves are created at a certain time. Wave-groups consist of the pendulums with the same phase. Wave groups exchange energies.

Keywords: waves in system of unlinked linear oscillators, wave-groups exchange energies.

ЭВОЛЮЦИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ИМПУЛЬСОВ В ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ

С. Ю. Глазов, Г. А. Сыродоев

Волгоградский государственный социально-педагогический университет
ser-glazov@yandex.ru, sga-823@yandex.ru

Аналитически и численно исследуется распространение электромагнитных волн в двумерной графеновой сверхрешетке в бесстолкновительном приближении. Выявлено влияние неаддитивности энергетического спектра и высокочастотного электрического поля на распространение уединенного электромагнитного импульса вдоль произвольных направлений образца. Рассчитан солитонно-электрический ток и заряд, увлекаемый солитоном.

Ключевые слова: графен, сверхрешетка, приближение сильной связи, уединенная электромагнитная волна, солитон, бризер, пульсон.

В настоящее время актуальным является исследование нелинейных оптических явлений, к числу которых относится эволюция уединенных электромагнитных импульсов (УЭИ) в структурах на основе графена [1-7]. Графеновые структуры могут использоваться в качестве рабочей среды для генерации УЭИ [1], имеющих ряд приложений [8, 9]. В работе [3] изучена возможность генерации уединенных электромагнитных волн нового типа в одномерных сверхрешетках (СР) на основе графена (ГСР). В последнее время внимание исследователей сосредотачивается на изучении 2D ГСР [10-13]. В этой связи представляется актуальным исследование особенностей распространения УЭИ в 2D ГСР.

В большинстве предшествующих работ, посвященных эволюции УЭИ, изучается распространение волн вдоль характерных кристаллографических осей (например, поперек оси СР) [2, 3, 8, 14-17]. В данной работе предложена и исследована система уравнений, описывающая распространение УЭИ вдоль произвольных направлений в плоскости 2D ГСР в бесстолкновительном приближении. Кроме того, рассмотрено влияние высокочастотного электромагнитного поля на распространение УЭИ и рассчитан солитонно-электрический ток и заряд, увлекаемый солитоном в 2D ГСР.

Энергетический спектр носителей заряда в 2D ГСР на подложке из периодически чередующихся областей бесщелевого и щелевого графена в одноминизонном приближении имеет вид [10]

$$\varepsilon(\vec{p}) = \pm \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2(1 - \cos(p_x d_1 / \hbar)) + \Delta_2^2(1 - \cos(p_y d_2 / \hbar))}, \quad (1)$$

где p_x, p_y – компоненты квазиимпульса электрона, $d_i = a_i + b_i$ – период ГСР, a_i и b_i – ширины ячеек бесщелевого и щелевого графена. Разные знаки относятся к минизоне проводимости и валентной минизоне. Энергетический спектр ГСР неаддитивен, поэтому существует зависимость движения носителей заряда вдоль ортогональных направлений, и непараболичен, что определяет нелиней-

ную зависимость скорости электрона от квазиимпульса и нелинейные свойства таких структур, проявляющиеся уже в сравнительно слабых полях. Эта нелинейность и приводит к возможности распространения в такого рода структурах УЭИ [14].

Плотность электрического тока имеет вид

$$\vec{j} = -e \sum n(\vec{p}) \vec{v} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right), \quad (2)$$

где $n(\vec{p})$ – невозмущенная функция распределения электронов, $\vec{v}(\vec{p}) = (\partial \varepsilon / \partial p_x, \partial \varepsilon / \partial p_y)$ – скорость электронов, $\vec{A}(\vec{r}, t)$ – векторный потенциал поля. Будем считать, что характерная длина, на которой происходит изменение электромагнитного поля, велика по сравнению с де-бройлевской длиной волны электрона и периодом ГСР, а характерное время изменения поля малым по сравнению со временем свободного пробега электрона τ и будем пренебрегать столкновениями электронов с решеткой.

Разложив скорость в двойной ряд Фурье, подставив в (2) и предполагая электронный газ невырожденным, найдем выражение для плотности тока

$$\vec{j} = -\frac{en_0}{a} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_{nm} \sin(n\varphi_x) \cos(m\varphi_y), \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_{nm} \sin(n\varphi_y) \cos(m\varphi_x) \right), \quad (3)$$

где n_0 – поверхностная концентрация электронов проводимости, a – толщина

слоя графена, $\vec{\varphi} = \frac{e}{c\hbar} (A_x d_1, A_y d_2)$ – безразмерный векторный потенциал,

$$B_{nm} = a_{nm} I_{nm} / I_{00}, \quad I_{nm} = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx) \cos(my) \exp[-\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2(1 - \cos(x)) + \Delta_2^2(1 - \cos(y))} / kT] dx dy,$$

$$T \text{ – температура, } a_{nm} = \frac{\Delta_1^2 d_1}{2\hbar\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin(x) \sin(nx) \cos(my) dx dy}{\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2(1 - \cos(x)) + \Delta_2^2(1 - \cos(y))}}, \quad C_{nm} \text{ опреде-}$$

ляется аналогично B_{nm} через коэффициенты разложения в ряд Фурье проекции скорости электронов на ось y .

Подставим (3) в уравнение для векторного потенциала

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial y^2} - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}(A_x, A_y) = 0, \quad (4)$$

где $V = c\chi^{-1/2}$ – скорость электромагнитной волны в отсутствии электронов, χ – эффективная диэлектрическая проницаемость. Из-за существенной непараболичности спектра электронов в ГСР ток проводимости есть в общем случае нелинейная функция поля и уравнение (4) является нелинейным. Отметим, что из-за неаддитивности энергетического спектра ортогональные составляющие векторного потенциала оказываются взаимосвязанными, что существенно сказывается на эволюции УЭИ в ГСР.

Нелинейное волновое уравнение (4) в общем случае решается численно с применением метода разностных схем.

Рассмотрим далее некоторые частные случаи уравнения (4), которые имеют аналитические решения. В качестве примера выберем такие 2D ГСР, для которых влияние неаддитивности энергетического спектра слабое. В работе [13] показано, что с увеличением периода ГСР уменьшается неаддитивность энергетического спектра и при $d > 5 \cdot 10^{-6}$ см, можно с хорошей степенью точности аппроксимировать “истинный” спектр структуры аддитивной зависимостью энергии от квазиимпульса. В нашем случае, увеличение периода ГСР будет приводить к более быстрому уменьшению значений коэффициентов B_{nm} и C_{nm} с ростом индексов. Подбирая периоды d_1 и d_2 можно добиваться разной силы связи между ортогональными направлениями.

Приведем один из частных случаев, соответствующих симметричной сверхрешетке ($d_1 = d_2 = d \approx 2 \cdot 10^{-6}$ см, $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta \approx 0.332 \cdot \Delta_{\text{SiC}}$, $\Delta_{\text{SiC}} = 0.13$ эВ, ширина запрещенной зоны между валентной зоной и зоной проводимости $\varepsilon_g = 0.8573 \Delta_{\text{SiC}}$; ширина запрещенной зоны между первой и второй зонами проводимости $\varepsilon_{g12} = 0.6270 \Delta_{\text{SiC}}$; ширина первой минизоны проводимости $\varepsilon_e = 0.2111 \Delta_{\text{SiC}}$). При разложении спектра в ряд Фурье в этом случае можно ограничиться первыми слагаемыми

$$\varepsilon(\vec{p}) = \Delta_{\text{SiC}} \left\{ g_1 - \frac{g_2}{2} \left[\cos\left(\frac{p_x d}{\hbar}\right) + \cos\left(\frac{p_y d}{\hbar}\right) \right] - g_3 \cos\left(\frac{p_x d}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p_y d}{\hbar}\right) \right\}, \quad (5)$$

где $g_1 = 0.624475$, $g_2 = 0.1787$, $g_3 = 0.01306$. Для рассматриваемого примера максимальное расхождение спектров составляет 2%.

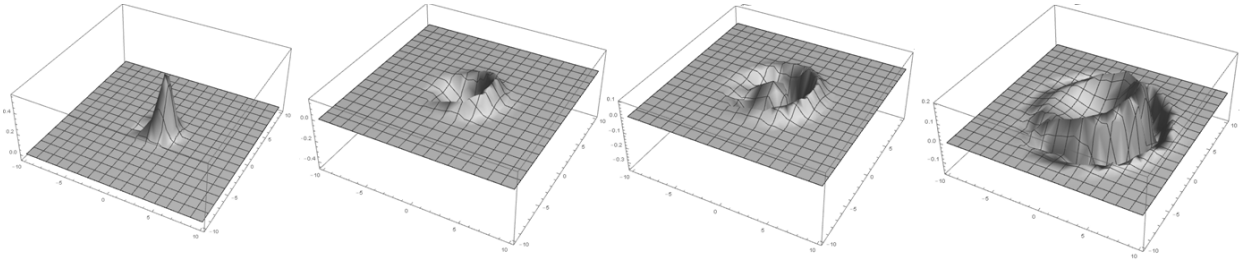
С другой стороны в выражении для плотности тока (3) коэффициенты B_{nm} и C_{nm} для рассматриваемого случая быстро убывают и можно ограничиться первыми слагаемыми. Приведенная ниже система уравнений для компонент безразмерного векторного потенциала соответствует слабой неаддитивности энергетического спектра

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{y}^2} + \sin \varphi_x (1 + \beta \cos \varphi_y) &= 0, \\ \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{y}^2} + \sin \varphi_y (1 + \beta \cos \varphi_x) &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\tilde{t} = t\omega / \sqrt{\chi}$, $\tilde{x} = x\omega / c$, $\tilde{y} = y\omega / c$, $\omega^2 = 2\pi n_0 e^2 B_{10} d / \hbar^2 a$, $\beta = 2B_{11} / B_{10}$.

Система уравнений решалась численно при помощи прямой разностной схемы типа «крест». Шаги по времени и координате определялись из стандартных условий устойчивости. Шаги разностной схемы уменьшались последовательно в два раза, до тех пор, пока решение не изменялось в 4-м значащем знаке. На рисунке представлены результаты моделирования эволюции УЭИ с гауссовым профилем в 2D ГСР. Подобное решение в одномерном случае называется бризером, а в двумерном – пульсоном.

Если $\beta = 0$, то связь между ортогональными компонентами пропадает и уравнения (6) представляют собой хорошо известное двумерное синус-уравнение Гордона.



Эволюция предельно короткого импульса с гауссовым профилем

Учитывая симметрию уравнений (6) и задавая симметричные начальные условия можно получить уравнение, описывающее распространение УЭИ под углом 45° к осям ГСР

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{l}^2} + \sin \varphi + \frac{\beta}{2} \sin(2\varphi) = 0, \quad (7)$$

где $\tilde{l} = \tilde{x} / \sqrt{2}$. Уравнение (7) является двойным синус-уравнением Гордона, кинковое решение которого хорошо известно [15, 16]

$$\varphi_x(\tilde{t}, \tilde{l}) = -2 \operatorname{arctg} \left[\frac{\sqrt{\beta+1}}{\operatorname{sh}(\xi / \xi_0)} \right], \quad (8)$$

где $\xi = \tilde{l} - \tilde{t}u/V$, $\xi_0 = \sqrt{1-(u/V)^2} / \sqrt{\beta+1}$, u – скорость кинка.

Одним из проявлений существования уединенных волн может выступить эффект увлечения электронов такой волной – возникновение электрического тока в направлении распространения волны. Природа этого эффекта сходна с природой радиоэлектрического эффекта и объясняется как результат передачи импульса электромагнитной волной электронной подсистеме. В [15] для полупроводниковых СР со спектром, описываемым в модели, выходящей за рамки учета влияния только «ближайших соседей» найдена плотность солитонно-электрического тока и заряд, увлекаемый солитоном. Для нашего случая плотность тока имеет вид

$$j_l = \frac{en_0 \Delta_{\text{sic}} g_2}{mu} \frac{\beta+1}{\operatorname{ch}(\xi / \xi_0)^2 + \beta} \left[1 + \frac{4g_3}{g_2} \frac{\operatorname{sh}(\xi / \xi_0)^2}{\operatorname{ch}(\xi / \xi_0)^2 + \beta} \right], \quad (9)$$

где n_0 – концентрация зарядов в минизоне проводимости. Ток увлечения носит импульсный характер с длительностью одного импульса порядка $\xi_0 c \varpi^{-1} u^{-1}$. В данной ситуации наблюдаемой величиной является заряд q , переносимый через единицу площади поперечного сечения образца. Количество заряда, переносимое через единицу площади поперечного сечения образца при прохождении одного кинка после интегрирования плотности тока по времени $q = \int_{-\infty}^{+\infty} j dt$ представим в виде

$$q = \frac{2en_0 \Delta_{\text{sic}} g_2 (\beta+1) \xi_0}{mu^2} \left[f(\beta) + \frac{4g_3}{g_2} (1-f(\beta)) \right], \quad (10)$$

где $f(\beta) = (\text{Arcth}(1 + 1/\beta) / [\beta(1 - f(\beta))])^{1/2}$, при $\beta \ll 1$ выражение упрощается $f(\beta) = 1 - 8\beta/3$.

При распространении УЭИ вдоль оси x ГСР, для которой напряженность электрического поля совпадает с осью y , а магнитное поле перпендикулярно плоскости образца, система уравнений (6) трансформируется к уравнению

$$\frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{t}_1^2} - \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{x}_1^2} + \sin \varphi_y = 0, \quad (11)$$

которое имеет кинковое решение в виде уединенного 2π -импульса

$$\varphi_y(\tilde{t}_1, \tilde{x}_1) = 4 \arctg \left[\exp \left(\frac{\tilde{x}_1 - \tilde{t}_1 u / V}{\sqrt{1 - (u/V)^2}} \right) \right]. \quad (12)$$

Уравнение (11) представляет синус-уравнение Гордона с перенормированными безразмерными координатами $\tilde{x}_1 = \tilde{x} \sqrt{1 + \beta}$, $\tilde{t}_1 = \tilde{t} \sqrt{1 + \beta}$.

Далее рассмотрим влияние ВЧ электромагнитного поля на распространение УЭИ в 2D ГСР вдоль оси y . Внешнее однородное ВЧ-поле будем считать эллиптически поляризованным. Учет такого поля можно произвести, сделав в уравнении для векторного потенциала

$$\frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{y}^2} + \sin \varphi_x (1 + \beta \cos \varphi_y) = 0 \quad (13)$$

замену $\varphi_x \rightarrow \varphi_x + \alpha_x \sin(\omega t)$, $\varphi_y \rightarrow \alpha_y \cos(\omega t)$, где $\vec{\alpha} = e\vec{E}d/\omega$, \vec{E} , ω – амплитуда и частота ВЧ-поля соответственно. После усреднения по «быстрому» времени, с периодом $T = 2\pi/\omega$, много меньшим длительности импульса, получим уравнение, описывающее распространение УЭИ с учетом влияния поля накачки

$$\frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{y}^2} + \sin \varphi_x (J_0(\alpha_x) + \beta J_0(\sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2})) = 0, \quad (14)$$

где $J_0(x)$ – функция Бесселя. Если параметры внешнего поля такие, что $J_0(\alpha_x) + \beta J_0(\sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2}) > 0$, то решение полученного уравнения сводится к солитонному решению (10) перенормировкой безразмерных координат. Параметры солитона при этом будут осциллировать с изменением параметров внешнего поля. Если поле накачки удовлетворяет условию $J_0(\alpha_x) + \beta J_0(\sqrt{\alpha_x^2 + \alpha_y^2}) < 0$, то для уравнения (14) существует автомодельное решение [18], отвечающее усилению УЭИ, распространяющегося через ГСР. В работе [17] данный подход применен для исследования влияния ВЧ-поля на форму солитона в 2D полупроводниковой СР с неаддитивным спектром.

В заключение сформулируем кратко основные выводы из проделанной работы:

1. Получено уравнение описывающее распространение электромагнитных волн в 2D ГСР в бесстолкновительном приближении.

2. Из-за неаддитивности энергетического спектра ортогональные составляющие векторного потенциала оказываются взаимосвязанными, что существенно сказывается на эволюции УЭИ в 2D ГСР.

3. Рассчитан солитонно-электрический ток и заряд, увлекаемый солитоном при его распространении.

4. Показано, что при воздействии на систему высокочастотного электрического поля возможно усиление уединенной волны.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-42-340005 и 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. Popa D., Sun Z., Torrisi F. et al // *Appl. Phys. Lett.* 2010. V. 97. P. 203106.
2. Martin-Vergara F., Rus F., Villatoro F. R. // *Nonlinear Systems*. 2018. V. 2. P. 85.
3. Kryuchkov S. V., Kukhar' E. I. // *Physica B*. 2013. V. 408. P. 188.
4. Smirnova D. A., Shadrivov I. V., Smirnov A. I. et al. // *Laser & Photonics Reviews*. 2014. V. 8. P. 291.
5. Bludov Yu. V., Smirnova D. A., Kivshar Yu. S. et al. // *Phys. Rev. B*. 2015. V. 91. P. 045424.
6. Конобеева Н. Н., Белоненко М. Б. // *Оптика и спектроскопия*. 2016. Т. 120. № 6. С. 1005.
7. Кухарь Е. И., Крючков С. В., Ионкина Е. С. // *ФТП*. 2018. Т. 52. В. 6. С. 620.
8. Крючков С. В., Капля Е. В. // *ЖТФ*. 2003. V. 48. P. 53.
9. Sun Z., Hasan T., Ferrari A. C. // *Physica E*. 2012. V. 44. P. 1082.
10. Kryuchkov S. V., Popov C. A. // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2017. V. 9. № 2. P. 02013.
11. Forsythe C., Zhou X., Watanabe K. et al. // *Nature Nanotechnology*. 2018. V. 13. P. 566.
12. Zhang Y., Kim Y., Gilbert M. J. et al. // *arXiv:1703.05689 [cond-mat.mes-hall]* 2018.
13. Бадикова П. В., Глазов С. Ю., Сыродоев Г. А. // *ФТП*. 2019. Т. 53. В. 7. С. 927.
14. Эпштейн Э. М. // *ФТТ*. 1977. Т. 19. В. 11. С. 3456.
15. Крючков С. В., Сыродоев Г. А. // *Изв. вузов. Радиофизика*. 1990. V. 33. № 12. P. 1427.
16. Крючков С. В., Федоров Э. Г. // *ФТП*. 2002. Т. 36. В. 3. С. 326.
17. Крючков С. В., Шаповалов А. И. // *ФТТ*. 1997. Т. 39. В. 8. С. 1470.
18. Беленов Э. М., Назаркин А. В. // *Письма в ЖЭТФ*. 1990. Т. 51. № 5. С. 252.

EVOLUTION OF ULTRA SHORT ELECTROMAGNETIC PULSES IN A TWO-DIMENSIONAL GRAPHENE SUPERLATTICE

S. Yu. Glazov, G. A. Syrodov

Volgograd State Pedagogical University

The propagation of electromagnetic waves in a two-dimensional graphene superlattice in the collisionless approximation is analytically and numerically investigated. The influence of non-additivity of the energy spectrum and high-frequency electric field on the propagation of a solitary electromagnetic pulse along arbitrary directions of the sample is revealed. The soliton-electric current and charge carried away by the soliton are calculated.

Keywords: graphene, superlattice, tight binding approximation, solitary electromagnetic wave, soliton, breather, pulson.

МОДЕЛИРОВАНИЕ В СРЕДЕ ANSYS ЭЛЕКТРОТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ СПАРК-ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ

А. С. Плотников¹, В. Ю. Гольцев¹, Е. Г. Григорьев², А. В. Осинцев¹

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

²Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения
Российской академии наук (ИСМАН), Черноголовка
asp.model.gk@gmail.com, eugengrig@mail.ru

Сформулирована компьютерная модель электротепловых процессов, протекающих в экспериментальной установке при спарк-плазменном спекании порошковых материалов. Проведен численный анализ электротепловых процессов при спарк-плазменном спекании порошка оксида алюминия. Приводится сравнение результатов численного моделирования эволюции температуры в процессе СПС с экспериментальными данными.

Ключевые слова: спарк-плазменное спекание, моделирование в ANSYS, электротепловые процессы.

В настоящее время консолидация керамических, металлических и композитных порошковых материалов под воздействием низковольтных мощных импульсов тока (спарк-плазменное спекание) является одним из перспективных методов получения новых материалов с уникальными свойствами. Об этом свидетельствует рост публикаций по спарк-плазменному спеканию (СПС) за последнее десятилетие [1] (рис. 1).

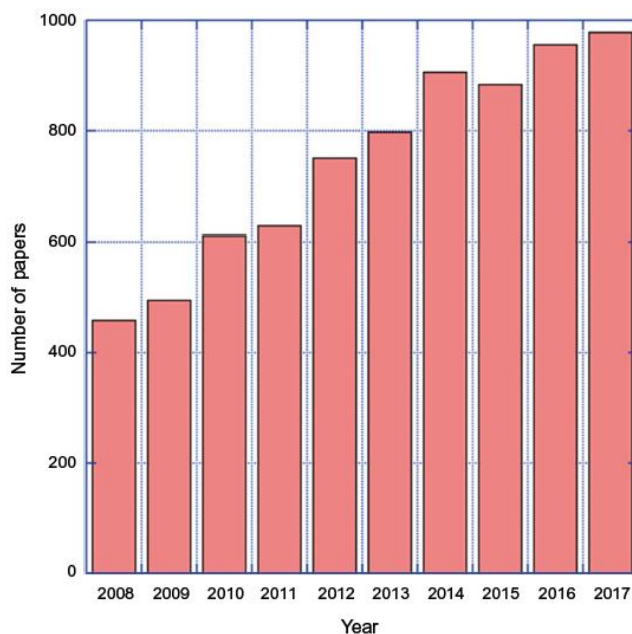


Рис. 1. Рост числа публикаций по спарк-плазменному спеканию в 2008-2017 гг

Метод СПС заключается в совместном воздействии на порошковую заготовку серией низковольтных мощных импульсов тока и механического давления. Особенностью данной технологии является возможность создания высо-

кой скорости нагрева (до 1000 К/мин) спекаемой заготовки, что позволяет сократить время процесса и сохранить исходную микроструктуру в спеченном материале. Реализация достоинств спарк-плазменного спекания возможна при оптимальных режимах процесса спекания, которые определяются, в частности: свойствами исходной шихты, параметрами электроимпульсного воздействия, геометрией порошковой заготовки, конструкцией используемой пресс оснастки. Определение технологических параметров оптимальных режимов СПС является достаточно сложной многопараметрической задачей, решение которой экспериментальными методами далеко не всегда удается реализовать. Важным фактором, определяющим однородность структурно-фазовых и механических свойств материала по объему консолидируемой заготовки, является распределение температуры в объеме заготовки в течение процесса консолидации/спекания. Экспериментально измерить температуру поверхности спекаемого образца, не говоря о его объеме, достаточно сложно. Как правило, в течение процесса СПС экспериментальные установки регистрируют с помощью термодпары или пирометра температуру локальной области внутри матрицы вблизи боковой поверхности образца. Данная зависимость температуры от времени в процессе СПС обычно приводится в публикациях, описывающих экспериментальные результаты по спарк-плазменному спеканию различных материалов. В связи с этим актуальной проблемой является определение эволюции температурного поля в объеме спекаемого образца и пресс-оснастки в течение всего процесса.

Цель данной работы – формулировка компьютерной модели электро-тепловых процессов, протекающих при спарк-плазменном спекании порошковых материалов в экспериментальной установке LABOX-625 (фирмы SinterLand, Japan), проведение численного моделирования процесса СПС порошка оксида алюминия, сравнение полученных результатов численных расчетов по сформулированной модели с экспериментальными данными по спеканию порошка оксида алюминия.

Моделирование производилось при помощи МКЭ в ПК ANSYS 19.2. Модель учитывает тепловые и электрические эффекты (нагрев джоулевым теплом). Электрическое поведение материала описывается в соответствии с законом Ома:

$$\nabla \times \vec{j} = \nabla \times (\sigma \vec{E}) = \nabla \times (-\sigma \nabla U) = 0.$$

Тепловое поведение материала описывается уравнением теплопроводности с внутренним источником теплоты, мощность которого определяется в соответствии с законом Джоуля-Ленца:

$$\nabla \times (-\lambda \nabla T) + \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = JE,$$

где E – напряжённость электрического поля, U – электрический потенциал, σ – электропроводность, λ – теплопроводность, ρ – плотность, C_p – удельная теплоёмкость, T – абсолютная температура. Отвод тепла осуществляется за счёт конвективного теплообмена электродов с охлаждающей жидкостью в соответствии с законом Ньютона:

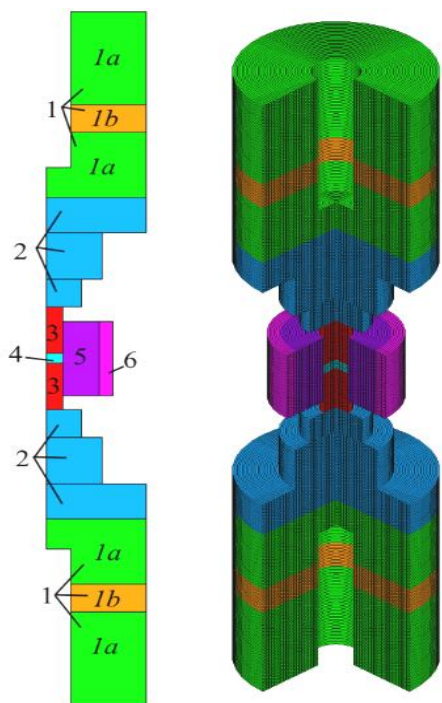


Рис. 2. Модель оснастки для спекания: различные модели материалов и развёртка КЭ-модели в $\frac{3}{4}$ полного тела. 1 – электроды (1a – стальные части, 1b – медные проставки), 2 – проставки из графита, 3 – пуансоны, 4 – образец, 5 – матрица, 6 – утеплитель из графитированного войлока

контакта полагаются постоянными на всём протяжении процесса (не зависят от контактного давления и температуры). На рис. 2 приведён общий вид модели в препроцессоре программного комплекса.

Граничные условия электрической составляющей задачи (рис. 3) представляют собой заданные потенциалы на торцах верхнего и нижнего электродов. Граничные условия тепловой части задачи (рис. 3) представляют собой условия конвективного теплообмена по внутренней поверхности электродов и взаимного лучистого теплообмена между внешними поверхностями оснастки. В качестве начальных условий принималась постоянная начальная температура модели 300 К.

Измерения температурных зависимостей свойств материалов, из которых изготовлена моделируемая оснастка не производились. Анализ литературы даёт различные оценки рассматриваемых свойств [2-5]. По результатам предварительных корреляционных расчётов выбраны следующие свойства для различных материалов.

$$Q_c = k_c (T - T_c)$$

и за счёт излучения по закону Стефана-Больцмана:

$$Q_e = \sigma_c k_e (T^4 - T_c^4).$$

На контактных поверхностях учитывается контактное электрическое и термическое сопротивление:

$$q = c_T (T_t - T_c),$$

$$j = c_E (U_t - U_c),$$

где q – тепловой поток через контактную поверхность, c_T – контактная теплопроводность, T_c и T_t – температуры контактирующих точек контактной пары, j – электрический поток через контактную поверхность, c_E – контактная электрическая проводимость, U_c и U_t – потенциалы контактирующих точек контактной пары.

Модель включает в себя образец, пуансоны, матрицу, утеплитель, три проставки и сборные охлаждаемые электроды. Используется осесимметричная постановка. Модель разбита на четырёхугольные элементы второго порядка с характерным размером 1 мм. В модели не учитывается механическая составляющая задачи. В связи с этим отсутствует изменение геометрии расчётной сетки в процессе спекания, а свойства теплового и электрического

- Стальные части электродов. Тепловые свойства (коэффициент теплопроводности, теплоёмкость – в соответствии с [2], удельное электросопротивление – в соответствии с [5].
- Медные части электродов. Теплоёмкость и удельное электросопротивление – в соответствии с [5], коэффициент теплопроводности – в соответствии с [2].
- Образец из Al_2O_3 . Все свойства приняты в соответствии с [5]. (С точки зрения электрических свойств материал принят изолятором.)
- Графит проставок, пуансонов и матрицы. Все свойства в соответствии с [6].
- Тепловые свойства графитированного войлока получены оценкой на основании данных из [7]. Электрические свойства приняты изоляционными.

Значения контактных термической и электрической проводимости приняты на основании [8]. Величины излучательной способности приняты для графита 0,9, для стали 0,67, для меди 0,2, для войлока 0,7.

Модель имеет ряд упрощений. Форма канала для охлаждения упрощена для применения осесимметричной модели. Свойства матрицы, выполненной из углерод-углеродного композита, полагаются эквивалентными свойствам графита проставок и пуансонов. Утеплитель из углеродного войлока полагается сплошным, без отверстия для замера температуры на поверхности матрицы. Кроме того, к упрощениям можно отнести применение тепловых и электрических свойств материалов на основании литературных данных, что обусловлено отсутствием результатов прямых измерений этих свойств на имеющейся оснастке.

Для расчёта рассматривается два сценария: нагрев постоянной разностью потенциалов 3,5 В и реальный процесс спекания. Динамика температуры отслеживается в четырёх характерных точках образца и на внешней поверхности матрицы, под утеплителем. Расположение точек показано на рис. 4. В первом сценарии оснастка прогревается в течение 1000 секунд воздействием постоянной разности потенциалов 3,5 В. На рис. 5 показана динамика роста температуры в указанных выше точках, на рис. 6 – динамика неравномерности разогрева образца (разница температур в различных его точках) во времени.

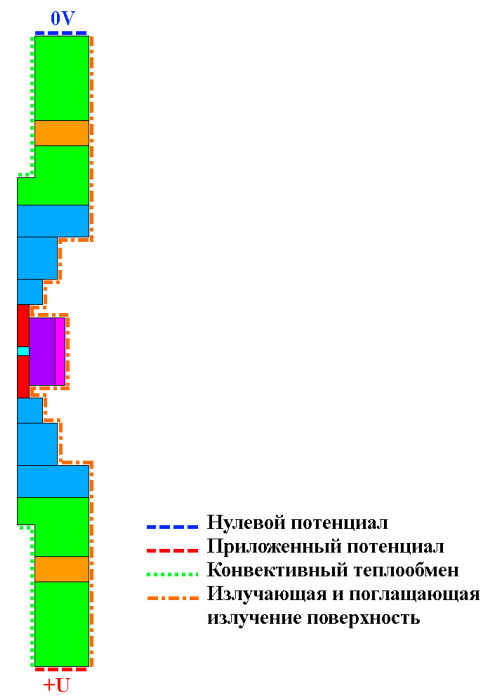


Рис. 3. Граничные условия модели

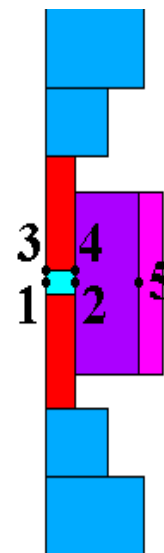


Рис. 4. Расположение точек мониторинга динамики

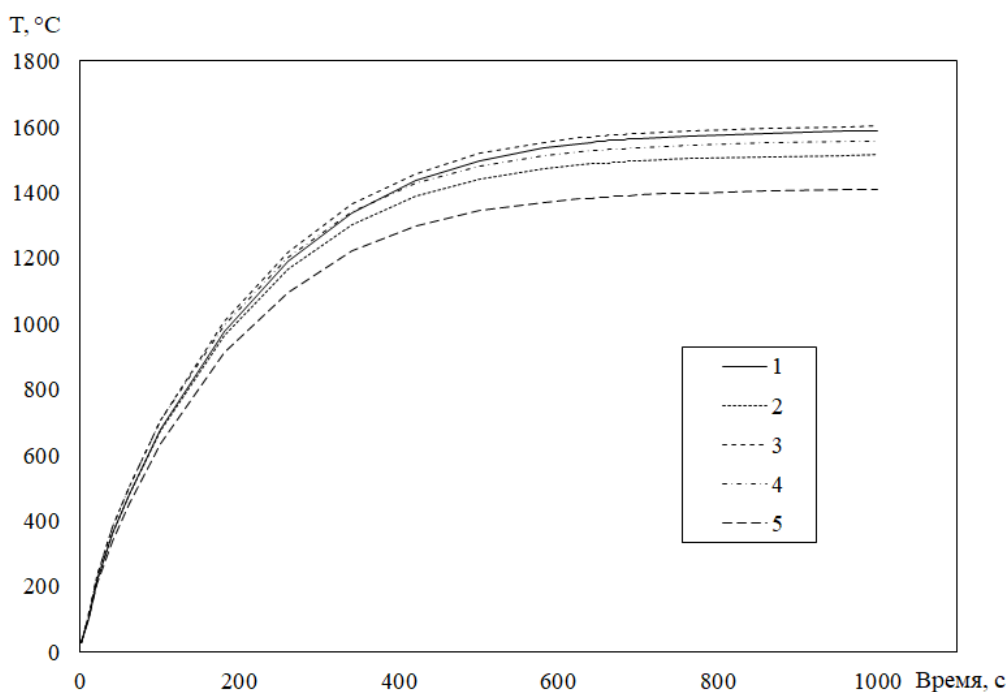


Рис. 5. Динамика прогрева образца и контрольной точки матрицы при разогреве постоянным током

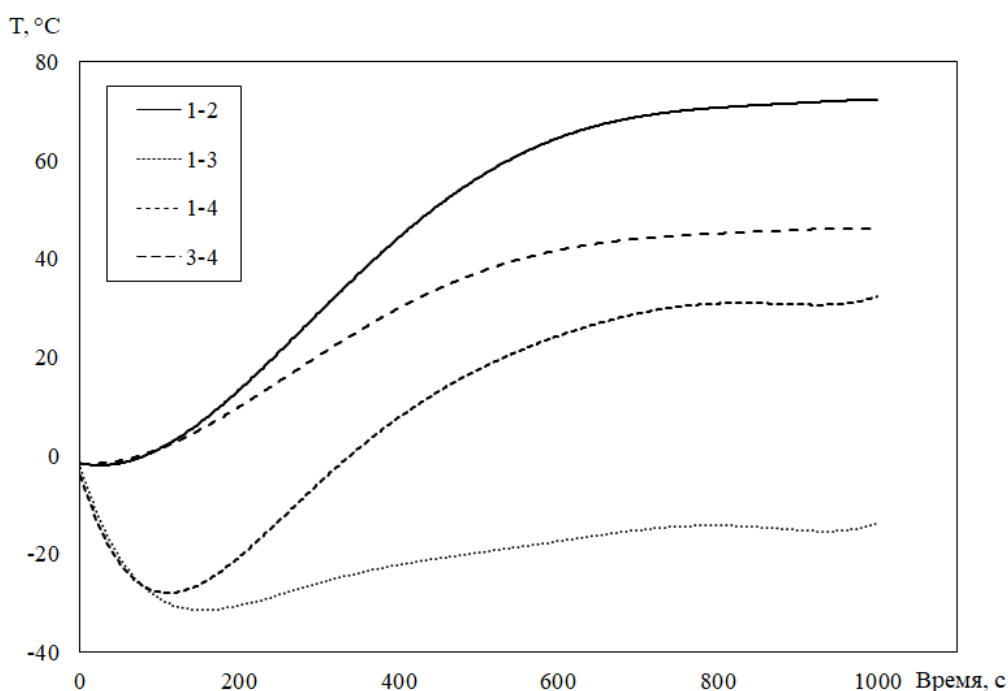


Рис. 6. Динамика неравномерности прогрева образца по времени: 1-2 – разница температур в точках 1 и 2, 1-3 – в точках 1 и 3, 1-4 – в точках 1 и 4, 3-4 – в точках 3 и 4

Расчёт реального процесса выполнен для спекания порошка оксида алюминия со скоростью нагрева $85\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{мин}$, выдержкой при температуре 1080°C в течение 10 минут и охлаждением со скоростью $30^{\circ}\text{C}/\text{мин}$. В качестве входного воздействия использовалась экспериментально зафиксированная кривая тока протекающего через оснастку для спекания.

На рис. 7 приведены временные зависимости температуры спекания в контрольной точке (точка №5 на рис. 4), зарегистрированные в эксперименте и полученные в результате расчёта. Как видно из рисунка, модель достаточно точно воспроизводит экспериментальные результаты на этапе нагрева и выдержки. На этапе охлаждения наблюдается значительное расхождение, природу которого установить на текущий момент не удалось.

На рис. 8 приведена динамика неравномерности прогрева образца в течении всего процесса спекания. Неравномерность прогрева образца выражается в основном в неравномерности «центр-периферия» и составляет примерно 20-40 °С.

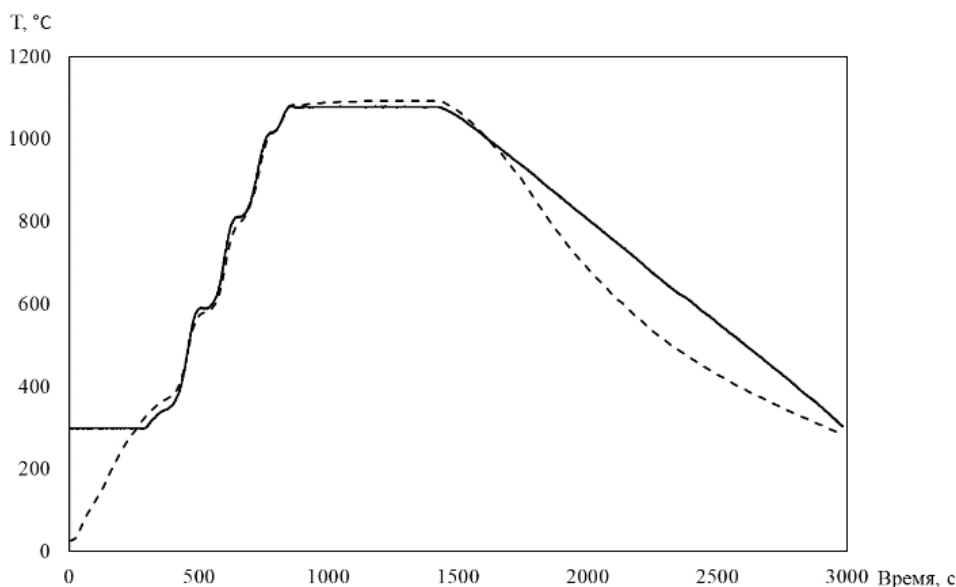


Рис. 7. Динамика температуры в контрольной точке в эксперименте (сплошная линия) и расчёте (пунктир)

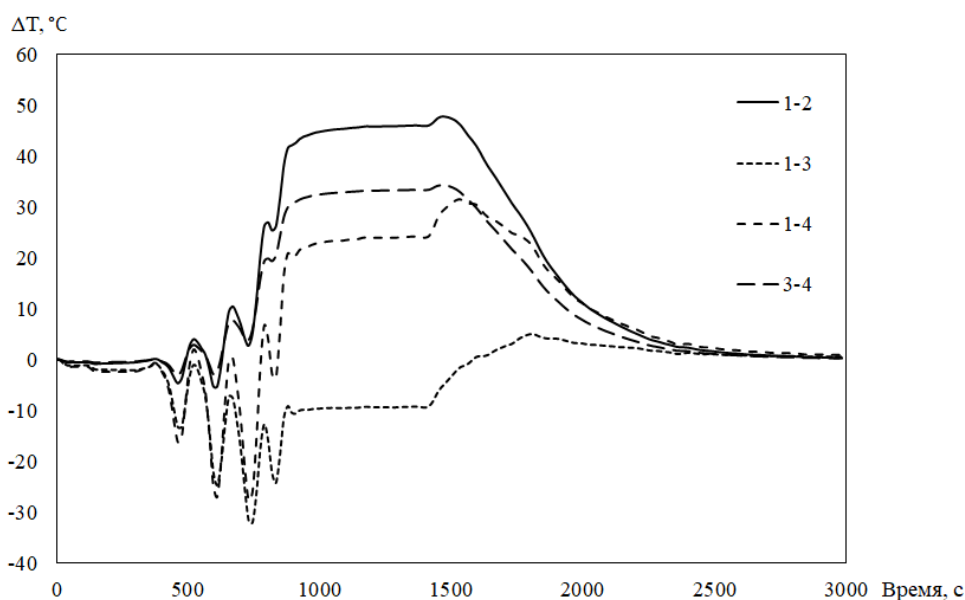


Рис. 8. Динамика неравномерности прогрева образца при моделировании реального процесса спекания. 1-2 – разница температур в точках 1 и 2, 1-3 – в точках 1 и 3, 1-4 – в точках 1 и 4, 3-4 – в точках 3 и 4

На рис. 9 приведены картины распределения температуры по оснастке и образцу в моменты времени 500 с, 800 с, 1100 с, 1400 с, 1700 с и 2000 с.

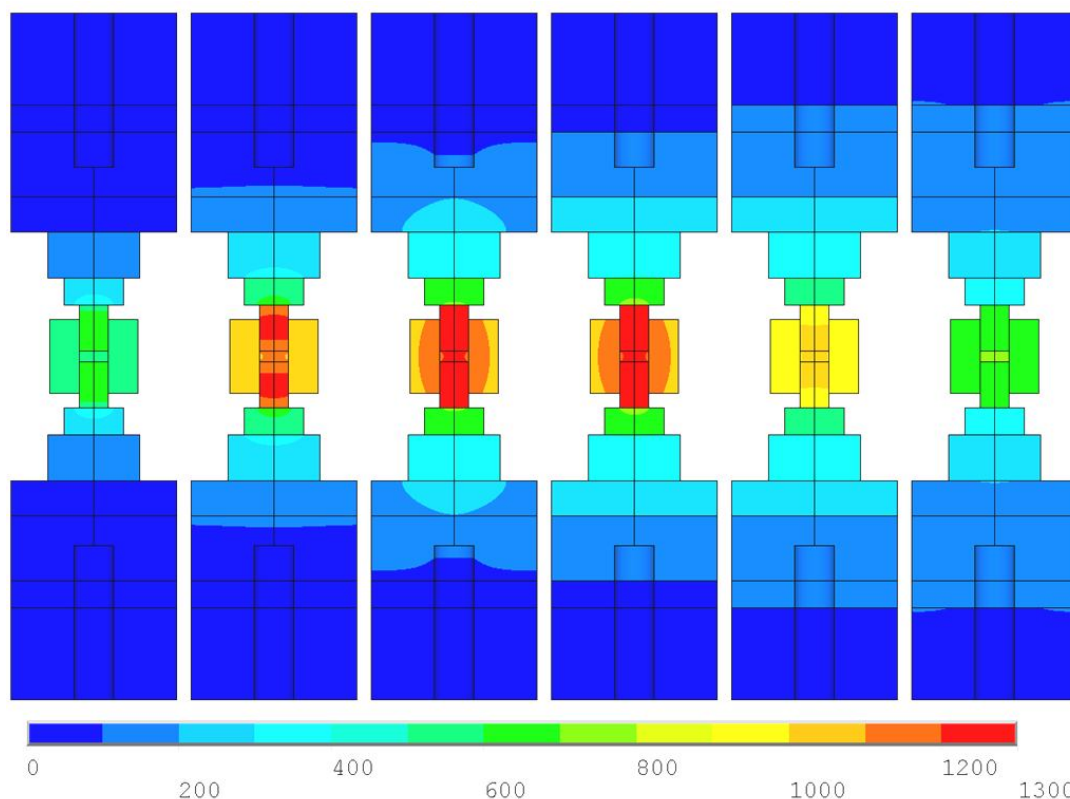


Рис. 7. Распределение температур в процессе спекания. Слева направо $t=500$ с, 800 с, 1100 с, 1400 с, 1700 с, 2000 с. Шкала в $^{\circ}\text{C}$

В результате проведённой работы была сформулирована математическая модель электротепловых процессов, происходящих в процессе спарк-плазменного спекания. Модель использована для симуляции реального процесса спекания порошка оксида алюминия в экспериментальной установке LABOX-625. Полученные в результате моделирования результаты достаточно близки к экспериментальным. На основании результатов расчёта произведена оценка неравномерности прогрева образца в процессе спекания.

Компьютерное моделирование процесса СПС позволило выявить влияние электрических и теплофизических характеристик материалов пресс-оснастки (пуансонов, матрицы, утеплителя и др.) на результаты расчета распределения температуры в спекаемом образце и деталях пресс-оснастки в процессе спарк-плазменного спекания. Было исследовано влияние: 1) контактной теплопроводности между пуансонами и матрицей, 2) контактной электропроводности между пуансонами и матрицей, 3) контактной теплопроводности между пуансонами и проставками, 4) контактной электропроводности между пуансонами и проставками, 5) контактной теплопроводности между проставками, 6) контактной электропроводности между проставками, 7) излучательной способности графита, и некоторых других характеристик. Результаты компьютерного моделирования показали, что основное влияние на расчетные значения температур-

ного поля при СПС оказывает величина излучательной способности материала пресс-оснастки (графита) и величина контактной электропроводности между пуансонами и матрицей. Другие контактные характеристики пресс-оснастки существенно меньше влияют на распределение температуры при СПС.

Представленные в работе исследования проводились при поддержке РФФ (проект № 16-19-10213).

Литература

1. Munir Z. A. Observations on the role of electric fields in the synthesis and processing of materials. Chapter 1 in book “Spark Plasma Sintering. Current status, new developments and challenges”, 2019, p. 1-48.
2. U. Anselmi-Tamburini et al.: Fundamental investigations on the spark plasma sintering/synthesis process II. Modeling of current and temperature distributions. *Mater. Sci. Eng., A* 394, 139 (2005).
3. G. Antou et al.: Spark plasma sintering of zirconium carbide and oxycarbide: Finite element modeling of current density, temperature, and stress distributions. *J. Mater. Res.*, Vol. 24, No. 2, Feb 2009.
4. G. Molenat, L. Durand, J. Galy, A. Couret: Temperature Control in Spark Plasma Sintering: An FEM Approach. *Journal of Metallurgy*, Vol. 2010.
5. S. Munoz, U. Anselmi-Tamburini: Temperature and stress fields evolution during spark plasma sintering processes. *Journal of Materials Science*, Vol. 45, Issue 23.
6. Manière C, Pavia A, Durand L, Chevallier G, Afanga K, Estournès C 2016 Finite-element modeling of the electro-thermal contacts in the spark plasma sintering process *J. Eur. Ceram. Soc.*, 36 741-748.
7. Теплопроводящие свойства высокотемпературных материалов на основе пенографита / С. В. Филимонов, А. О. Камаев, О. Н. Шорникова и др. // Новые огнеупоры. – 2016. – № 3. – С. 144-148.
8. J. Zhang: Numerical simulation of thermoelectric phenomena in field activated sintering. PhD thesis, Drexel University, 2004.

ANSYS SIMULATION OF ELECTRIC AND HEAT PROCESSES OF SPARK-PLASMA SINTERING

A. S. Plotnikov¹, V. Yu. Goltsev¹, E. G. Grigoryev², A. V. Osintsev¹

¹National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute)

²Institute of Structural Macrokinetics and Materials Science RAS

A computer model of the electro-thermal processes that occur in the experimental setup during spark-plasma sintering of powder materials is formulated. A numerical analysis of the electro-thermal processes during spark-plasma sintering of alumina powder is carried out. A comparison is made of the results of a numerical simulation of the temperature evolution during the SPS process with experimental data.

Keywords: spark-plasma sintering, modeling in ANSYS, electro-thermal processes.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТЩЕПЛЕНИЯ ВОДОРОДА ОТ АММИАКАТОВ БОРОГИДРИДА МАГНИЯ

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

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

В рамках кластерного подхода с использованием функционала плотности B3LYP и базиса 6-31G* выполнено квантово-химическое моделирование отрыва молекулы H₂ от аммиачных комплексов борогидрида магния. Найдено, что соответствующие барьеры оказываются высокими и не снижаются при увеличении количества молекул аммиака и олигомеризации. На примере кластера Mg(BH₄)₂*3NH₃ показано, что добавление молекулы H₃BNH₃ существенно снижает барьер на пути отщепления H₂, причем при завершении реакции H₃BNH₃ восстанавливается, т.е. эта молекула может играть в данном случае роль катализатора.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, аммиакаты борогидрида магния, отщепление водорода.

Введение

Использование водорода в качестве энергоносителя представляет собой сложную проблему в связи с трудностями его транспортировки и хранения в сжатом или сжиженном состояниях. Пока наиболее перспективным представляется хранение водорода в связанном состоянии в виде гидридов легких элементов второй и третьей групп, которые обладают высоким содержанием водорода и достаточно высокой удельной плотностью. Борогидрид магния, содержащий почти 15 весовых процентов водорода, рассматривается как один из наиболее перспективных кандидатов для его хранения, однако для извлечения водорода требуется нагрев до температур выше 200° С [1, 2]. Извлечь водород из комплексных металлогидридов при невысоких температурах можно при взаимодействии с водой, и такие возможности были рассмотрены в наших предыдущих работах [3 - 5]. Однако массовое содержание водорода в воде невелико, поэтому продолжают поиски других вариантов извлечения водорода, в частности с использованием аммиачных комплексов [6, 7]. К сожалению, для разложения комплексов Mg(BH₄)₂*nNH₃ с выделением H₂ тоже требуются достаточно высокие температуры (от 200° до 400° С), поэтому в [7] предлагается использовать для извлечения водорода гидролиз, который для аммиакатов оказывается более контролируемым, но при этом в ИК-спектрах продуктов проявляются фрагменты В-Н, В-О и В-О-Н, т.е. превращение не является полным и ведет к формированию оксида и гидроксида, а аммиак улетучивается. Поэтому продолжают исследования механизмов извлечения водорода из аммиачных комплексов борогидрида магния без использования дополнительных реагентов с целью поиска возможностей снижения барьеров на пути отщепления водорода.

да. Целью данной работы является изучение таких механизмов с помощью квантово-химического моделирования.

Методика расчетов

Квантово-химическое моделирование было выполнено в кластерном приближении с использованием хорошо зарекомендовавшего себя в молекулярных расчетах гибридного функционала плотности B3LYP [8, 9] с валентно-двухэкспонентным базисом 6-31G*, включающим поляризационные функции, с помощью программного комплекса GAUSSIAN [10]. Энергии отдельных наиболее существенных структур уточнялись с более полным базисом 6-311++G(3df,2p). Для оценки адекватности кластерного приближения для изучаемых систем было выполнено моделирование кристаллических структур $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 2\text{NH}_3$ и $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 3\text{NH}_3$ в рамках периодических граничных условий с помощью программы VASP [11, 12].

Обсуждение результатов

Одна, две и три молекулы аммиака образуют с $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2$ стабильные комплексы, в которых атомы азота координированы к катиону магния (рис. 1). При увеличении n возможно сосуществование двух типов структур – с координацией до шести атомов азота к магнию, и конфигураций, в которых часть молекул аммиака начинают формировать вторую координационную сферу (рис. 1, конфигурации (A) и (B)). Эти структуры имеют близкие энергии (разница не более 0.1 эВ), а переход между ними требует преодоления умеренного потенциального барьера, ~ 0.3 эВ.

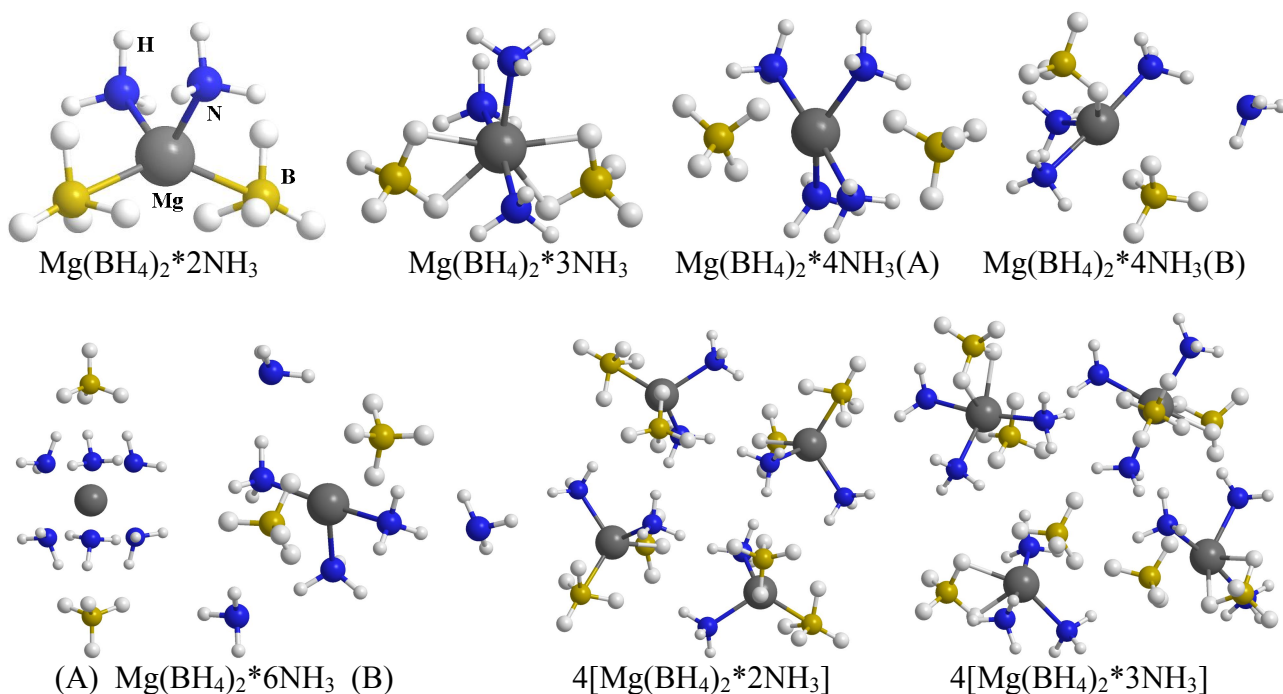


Рис. 1. Комплексы борогидрида магния с аммиаком

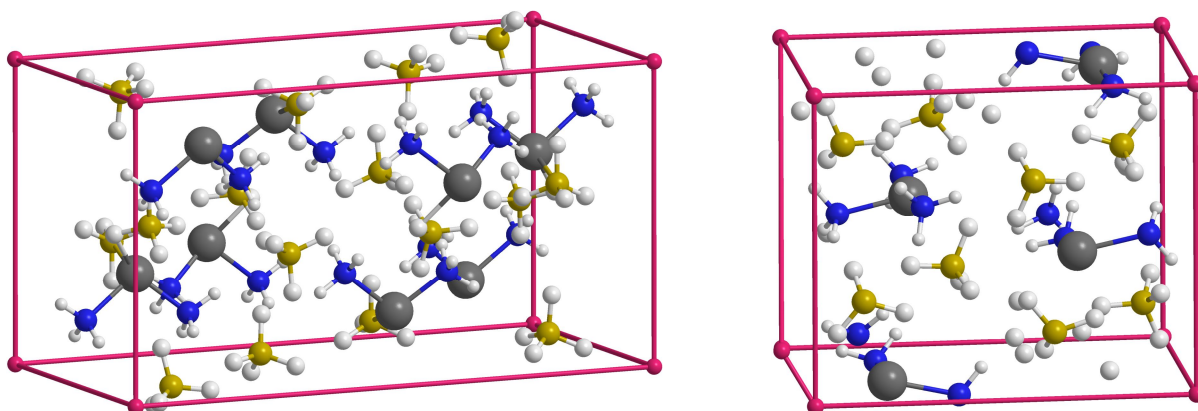


Рис. 2. Фрагменты кристаллов $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 2\text{NH}_3$ и $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 3\text{NH}_3$

Таблица 1

Равновесные расстояния (Å) в комплексах $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot n\text{NH}_3$

	$\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 2\text{NH}_3$			$\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 3\text{NH}_3$		
	R(MgB)	R(MgN)	R(MgMg)	R(MgB)	R(MgN)	R(MgMg)
Мономер	2.24	2.19	-	2.46	2.20, 2.23	-
Тетрамер	2.21, 2.46	2.16	5.52	2.46, 2.56	2.18, 2.21	5.59, 6.12
Крист., расчет	2.26, 2.40	2.11	5.83, 6.01	2.48, 2.50	2.13, 2.15	5.91, 6.08
Крист., эксп.	2.33, 2.45	2.03, 2.15	6.04, 2.23	2.51, 2.53	2.13, 2.16	6.06, 6.20

Таблица 2

Энергии присоединения молекул NH_3 к $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2$ (в эВ): ΔE – изменение энергии ССП, ΔE_0 – изменение энергии ССП с добавлением энергии нулевых колебаний, ΔH – изменение теплоты образования, ΔG – изменение энергии Гиббса (при нормальных условиях). + BSSE – учет эффекта суперпозиции базисов. В скобках приведены значения, оцененные по результатам моделирования тетрамеров

	$\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 2\text{NH}_3$			$\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 3\text{NH}_3$		
	Мономер	Тетрамер	Крист.	Мономер	Тетрамер	Крист.
$\Delta E/n$, + BSSE	1.08, 0.90	1.08, 0.86	0.78	0.99, 0.79	0.96, 0.73	0.75
$\Delta E_0/n$, + BSSE	1.02, 0.84	0.97, 0.75	(0.72)	0.88, 0.68	0.85, 0.62	(0.65)
$\Delta H/n$, + BSSE	1.04, 0.82	1.00, 0.78	(0.70)	0.90, 0.70	0.88, 0.65	(0.67)
$\Delta G/n$, + BSSE	0.61, 0.43	0.55, 0.33	(0.25)	0.48, 0.28	0.42, 0.19	(0.21)

При олигомеризации отдельных комплексов $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot n\text{NH}_3$ ($n = 2, 3$) и объединении их в кристаллы строение первой координационной сферы сохраняется, и расположение отдельных комплексов в олигомерах и кристаллах оказывается сходным (рис. 1, 2). Достаточно близкими в рассмотренных системах оказываются межатомные расстояния (табл. 1) и энергии взаимодействия молекул аммиака с борогидридом магния (табл. 2). Отсюда следует, что для данных систем кластерное приближение адекватно воспроизводит основные характеристики конденсированной фазы.

Рассмотрим теперь отрыв молекулы H_2 от комплекса $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 4\text{NH}_3$. Для этой системы были найдены два различных канала, ведущих к отделению молекулярного водорода. В первом из них сближение атомов Н из фрагментов NH_3 и BH_4 структуры А ведет к переходной конфигурации TS1, от которой отщепляется молекула H_2 , а оставшиеся фрагменты BH_3 и NH_2 объединяются в

$\text{H}_2\text{N}-\text{BH}_3$, формируя финальную структуру (D) (рис. 3). Барьер на этом пути оказывается значительным, ~ 1.7 эВ (табл. 3).

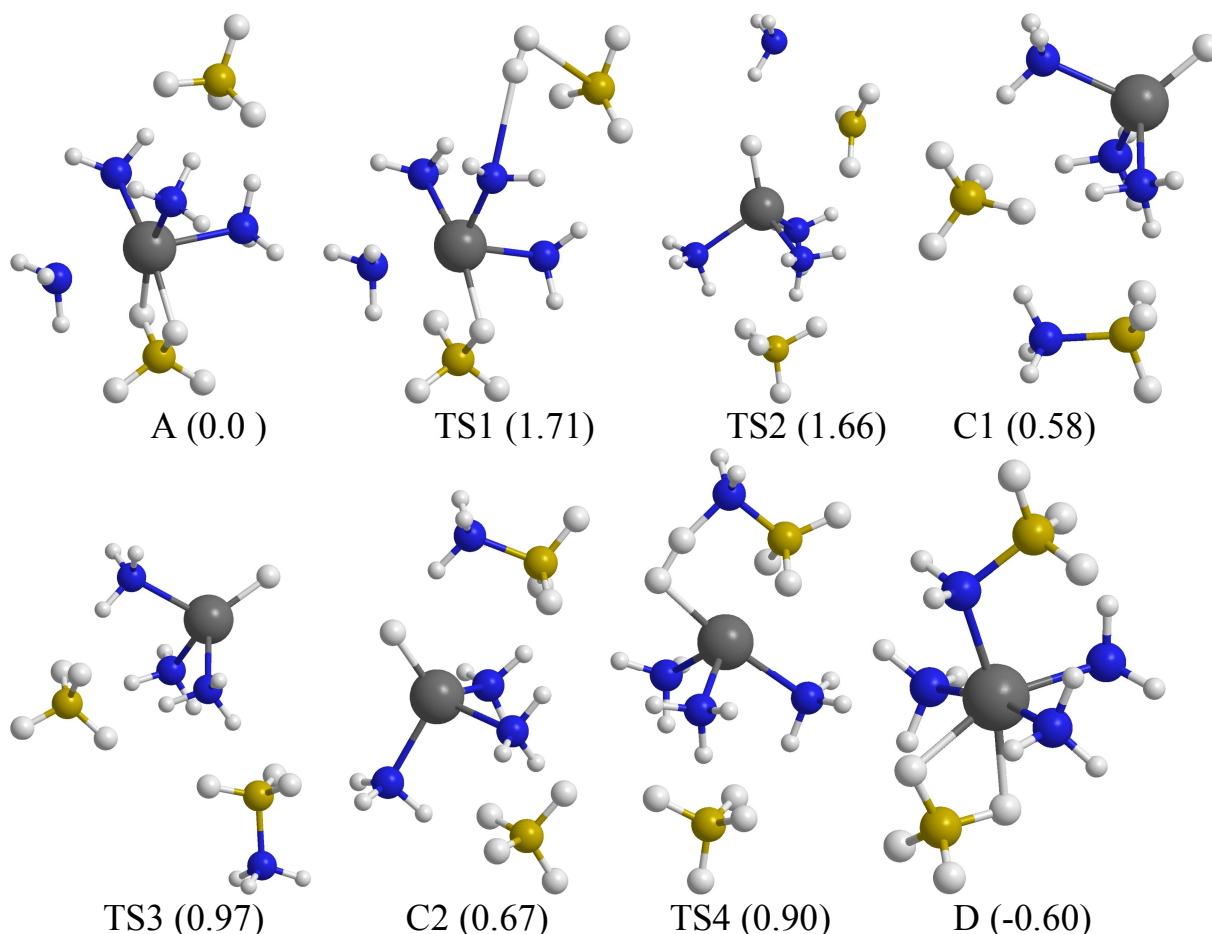


Рис. 3. Конфигурации, возникающие при отрыве молекулы H_2 от комплекса $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot 4\text{NH}_3$ и их относительные энергии ΔG (в эВ, базис 6-31G*)

Таблица 3

Энергии переходных конфигураций (TS) и финальных структур (D) относительно исходного комплекса $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot n\text{NH}_3$ (в эВ). Обозначения энергий – как в табл. 2, 4* – результаты, полученные с базисом 6-311++G(3df,2p)

		ΔE_0			ΔH			ΔG		
n	TS1	TS2	D	TS1	TS2	D	TS1	TS2	D	
2	2.13	1.83	-0.03	2.19	1.83	0.00	2.06	1.81	-0.26	
3	1.99	1.84	-0.14	2.04	1.83	-0.13	1.92	1.85	-0.34	
4	1.82	1.73	-0.34	1.88	1.74	-0.29	1.71	1.66	-0.60	
4*	1.71	1.70	-0.20	1.78	1.71	-0.15	1.60	1.63	-0.45	
6	1.93	1.78	-0.22	1.98	1.78	-0.21	1.90	1.82	-0.34	
T	1.88	1.68	-0.08	1.86	1.69	-0.06	1.93	1.68	-0.30	

Второй канал является многоступенчатым. На первом шаге ион H^- отщепляется от аниона BH_4^- и присоединяется к катиону магния (конфигурация TS2), после чего BH_3 и ближайшая NH_3 объединяются, формируя структуру C1 (рис. 3). Если переориентировать молекулу H_3BNH_3 так, чтобы сблизить фрагменты Mg-H и H-N (структура C2 через переходное состояние TS3), то объединение соответствующих атомов H и отщепление H_2 (через конфигурацию TS4)

с формированием финальной структуры D идет без больших затрат энергии. Наиболее существенным барьером на этом пути является TS2, и его величина лишь немного ниже, чем у TS1 (табл. 3).

Для систем с другим количеством молекул аммиака ($n = 2 - 6$) качественная картина оказывается такой же, как и в рассмотренном выше комплексе $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2\text{4NH}_3$, изменения носят лишь количественный характер. Барьер TS1 везде немного выше, чем TS2, величины этих барьеров снижаются в ряду $n=2-4$, но снова увеличиваются для $n = 6$ (табл. 3). Подобная немонотонная зависимость получалась для аналогичных комплексов с водой [5], но величины барьеров были существенно ниже, а энергетические эффекты при отщеплении водорода – выше. Согласно полученным в этой работе данным, в системах с участием воды при переходе к олигомерам, в частности к тетрамеру, барьеры на пути отщепления водорода существенно снижаются. Поэтому в качестве следующего шага в данной работе был рассмотрен комплекс $[\text{Mg}(\text{BH}_4)_2\text{2NH}_3]_4$.

Как и в мономерах, для этой системы были найдены два канала отрыва молекулы водорода. Первый канал реализуется через формирование малостабильного промежуточного комплекса BH_3^*H_2 , что связано с преодолением барьера TS1. Затем эта структура легко переходит в финальную конфигурацию (D), преодолевая небольшой барьер. Второй канал ведет к образованию комплекса $\text{H}_3\text{B-NH}_3$ и мостика Mg-H-Mg через переходную конфигурацию TS2, затем фрагмент NH_3 этого комплекса при взаимодействии с мостиком Mg-H-Mg отщепляет молекулу H_2 и образует анион $\text{H}_3\text{B-NH}_2^-$. К сожалению, в данном случае олигомеризация не привела к существенному снижению наиболее значительных барьеров TS1 и TS2, и они остаются примерно такими же, как и для мономеров (табл. 3, строка T).

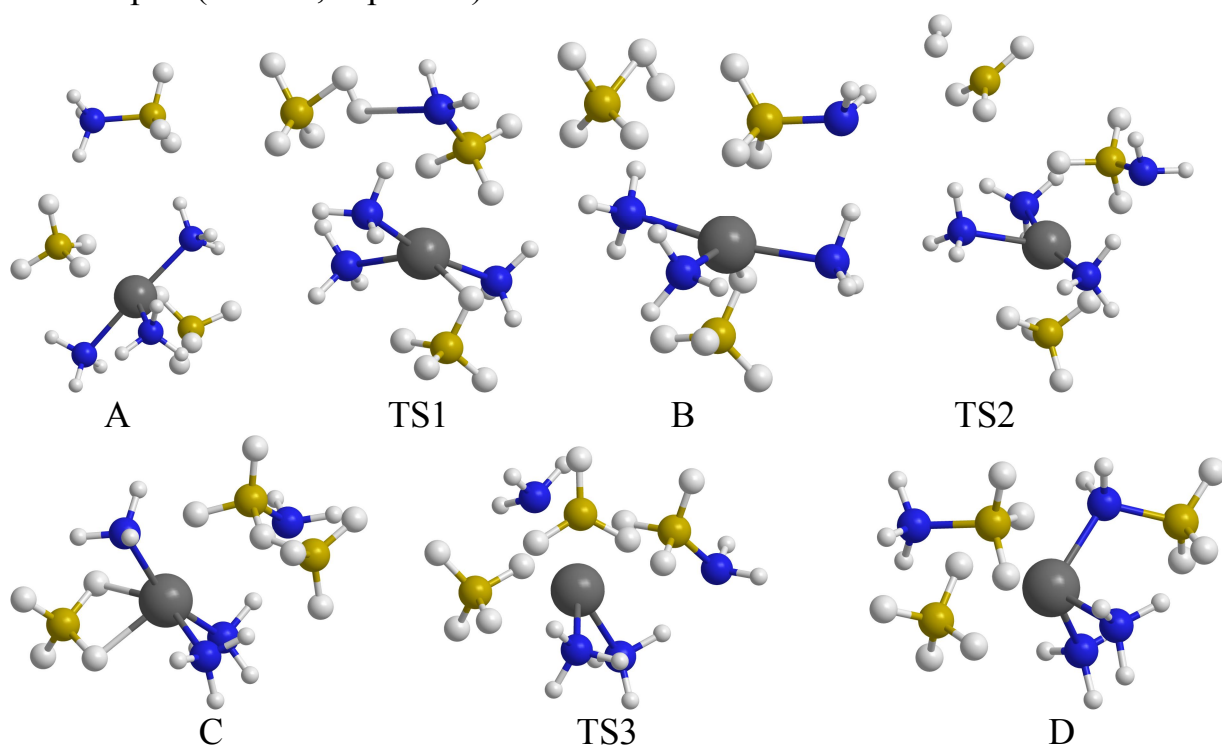


Рис. 4. Конфигурации, возникающие при отрыве молекулы H_2 от комплекса $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2\text{*3NH}_3\text{*H}_3\text{B-NH}_3$

Поскольку для рассмотренных выше систем один из каналов отрыва H_2 связан с формированием комплекса H_3B-NH_3 , мы попытались рассмотреть влияние введения такого комплекса в борогидрид магния на примере системы $Mg(BH_4)_2 \cdot 3NH_3$ (рис. 4). Согласно полученным результатам, эта система при сближении атомов H из H_3B-NH_3 и аниона BH_4^- проходит через конфигурацию TS1 в малостабильный локальный минимум В, который отщепляет H_2 и переходит в структуру С, содержащую фрагмент $H_3B-H-BH_2NH_2$, через переходное состояние TS2. Эта конфигурация тоже лежит на энергетической шкале выше, чем исходная структура А, но через TS3 может трансформироваться в конфигурацию D, которая при нормальных условиях оказывается более выгодной, чем А (табл. 4). В финальной структуре D один из анионов BH_4^- заменен на $H_3B-NH_2^-$, а молекула H_3B-NH_3 восстановлена, т. е. она в данном случае выполняет роль катализатора. Рассчитанные с наиболее полным базисом величины ΔG для переходных конфигураций не превышают 1.3 эВ, для финальной структуры ΔG отрицательна, а тепловой эффект (ΔH) мал.

Таблица 4

Энергии различных конфигураций относительно исходного комплекса $Mg(BH_4)_2 \cdot 3NH_3 \cdot H_3B-NH_3$ (в эВ). Обозначения энергий – как в табл. 2. Жирный шрифт – результаты, полученные с базисом 6-311++G(3df,2p)

	TS1	В	TS2	С	TS3	D
ΔE_0	1.33 1.16	1.27 1.12	1.39 1.27	0.61 0.60	1.49 1.47	0.37 0.40
ΔH	1.31 1.15	1.27 1.12	1.39 1.27	0.65 0.64	1.52 1.50	-0.11 -0.08
ΔG	1.39 1.23	1.31 1.16	1.41 1.29	0.39 0.38	1.28 1.26	-0.33 -0.30

Резюмируя полученные в данной работе результаты, можно сказать, что в аммиактах борогидрида магния барьеры на пути отрыва молекул водорода значительны, но их можно существенно снизить с помощью добавления комплекса H_3B-NH_3 .

Данная работа выполнена по теме Государственного задания № АААА-А19-119061890019-5 на ВЦ ИПХФ РАН.

Литература

1. Saldan I, Frommen C, Llamas-Jansa I, et al. // Int. J. Hydrog. Energy. 2015. V. 40. P. 12286.
2. Hanada N., Chłopek K., Frommen C., Lohstroh W., et al.// J. Mater. Chem. 2008. V. 18. P. 2611.
3. Solovev M.V., Chashchikhin O.V., Dorovatovskii P.V., et al.//J Power Sources 2018. V. 377. P. 93.
4. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В., М.В. Соловьев, Ю.А. Добровольский // Ж. Неорг. Химии. 2016. Т. 61. С. 767.
5. Зюбин А. С., Зюбина Т. С., Кравченко О. В., Соловьев М. В., Цветков М. В., Зайцев А. А., Добровольский Ю. А. // Ж. Неорг. Химии. 2018. Т. 63. С. 190.
6. Сакович Г.Г., Никитин Р.Г. // ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК. 2006. № 2. С. 155.
7. Wang M., Ouyang L., Zeng M., Liu J., et al.// Int. J. of Hydrogen Energy. 2019. V. 44. P. 7392.

8. Becke A.D. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. P. 5648.
9. Johnson B.J., Gill P.M.W., Pople J.A. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. P.5612.
10. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et al., Gaussian 09, Revision B.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.
11. Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.
12. Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.

QUANTUM-CHEMICAL SIMULATION OF HYDROGEN CLEAVAGE FROM MAGNESIUM BOROHYDRIDE AMMONIATES

A. S. Zyubin, T. S. Zyubina, O. V. Kravchenko, M. V. Solov'ev, M. V. Tsvetkov,
A. A. Zaitsev, Yu. A. Dobrovolsky

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

Within the framework of the cluster approach using the functionality of B3LYP density and 6-31G* basis set quantum-chemical simulation of separation of H₂ molecule from ammonia complexes of magnesium borohydride was performed. It has been found that the corresponding barriers are high and do not decrease with an increase in ammonia molecules and oligomerization. With the Mg(BH₄)₂*3NH₃ cluster as an example was demonstrated that the addition of the H₃BNH₃ molecule significantly reduces the barrier to cleavage of the H₂, and at the end of the reaction the H₃BNH₃ is restored, i.e. the H₃BNH₃ molecule can play a catalytic role here.

Keywords: quantum-chemical modeling, density-functional theory, ammoniates of magnesium borohydride, hydrogen cleavage.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАФИОНОПОДОБНЫХ ЛИТИЙЗАМЕЩЕННЫХ ИОНОМЕРОВ, ПЛАСТИФИЦИРОВАННЫХ ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДОМ

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

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

Моделирование структуры нафионоподобных литийзамещенных иономеров, пластифицированных диметилсульфоксидом (ДМСО) было выполнено методом PBE/PAW с учетом градиентных поправок, периодических граничных условий и MD-VASP. В результате наблюдалось быстрое перераспределение Li-ионов между молекулами ДМСО и SO_3^- группами Нафиона.

Ключевые слова: Li-ионная проводимость, Nafion, ДМСО.

Ионопроводящие полимерные мембраны являются ключевыми компонентами различных твердотельных устройств электрохимического преобразования энергии (низкотемпературные топливные элементы, электрохимические датчики, металло-ионные аккумуляторы). Наиболее распространенными и коммерчески доступными ионопроводящими мембранами являются ионообменные мембраны с перфторированной сульфоновой кислотой типа Nafion. Полимерные электролиты на основе Нафиона обладают рядом преимуществ, таких как высокая ионная проводимость (до 10^{-1} См/см) и высокая химическая и термическая стойкость. В последнее время нафионоподобные мембраны в различных катионных формах, пластифицированных органическими растворителями, привлекают значительный интерес. Этот интерес обусловлен поиском новых материалов с высокими транспортными свойствами, высокими емкостными характеристиками и широким окном электрохимической стабильности для создания более энергоемких и эффективных источников электрохимического тока. Поэтому данная работа направлена на проведение квантово-химического исследования образования проводящих каналов при тепловом движении молекул ДМСО в нафине.

Для моделирования исследуемых систем с бесконечной полимерной цепью Нафиона использовался подход, основанный на периодических граничных условиях и функционале PBE с базисным набором спроецированных плоских волн PAW и соответствующим псевдопотенциалом. Отсечка энергии (E_c) была равна 400 эВ. Подход MD-VASP (15000 фс) использовался для моделирования в рамках неэмпирической молекулярной динамики. В этом случае использовались те же алгоритмы, которые использовались для обычной оптимизации структуры, но с отсечкой энергии $E_c = 200$ эВ. Во время расчетов шаг по времени сохранялся равным 1-1,5 фс. Термализация проводилась в каноническом (Nose) ансамбле. Внешнее давление было 1 атм в течение всего моделирования. Температура изменялась в процессе термализации. Начальная температура системы

составляла $T_0 = 0^\circ\text{K}$, и система нагревалась до $T_1 = 350^\circ\text{K}$ в течение 1500 фс, после чего система была уравновешена в течение 10000-15000 фс. Расчеты проводились с использованием программы VASP (Vienna ab initio simulation package).

В качестве модельных систем были взяты содержащие сульфогруппу фрагменты цепочки Нафiona ($\text{C}_{15}\text{O}_2\text{F}_{29}\text{SO}_3$) с 8 молекулами ДМСО. Бесконечные цепочки XNafion*8DMSO были построены на основе транслированных в пространстве 262-х атомных фрагментов $\{\text{—CF}_2(\text{CF}_2)_8(\text{—CF})\text{OCF}_2\text{CF}(\text{CF}_3)\text{O}(\text{CF}_2)_2\text{SO}_3\text{—Li}^+*8((\text{CH}_3)_2\text{SO})\}_2$. Количество молекул DMSO, близкое к экспериментальным данным, было выбрано в сочетании с фрагментом фторуглеродной цепи, соответствующим транслируемой в пространстве средней единице коммерческого иономера Нафion. Оптимизированные структуры показаны на рис. 1. В результате оптимизации бесконечные цепочки с направленными друг к другу фрагментами SO_3^- образовали упаковку (рис. 1) с удельной плотностью $\rho = 1.72 \text{ г/см}^3$. Рассчитанное значение удельной плотности на 10% больше экспериментального значения, которое составляет 1.54 г/см^3 . Эту разницу можно отнести к наличию менее плотных областей в экспериментальном образце и усреднению по объему.

На рис. 1 показан вид оптимизированной структуры, сделанный перпендикулярно (а) и вдоль (b) цепей Нафiona при температуре $T = 0^\circ\text{K}$. При температуре 350°K атомы совершают тепловые колебания. Позиции атомов, которые они занимают за промежуток времени 1.5 пс показаны на рисунке в двух ракурсах (с и d перпендикулярно и вдоль цепей Нафiona, соответственно). Для упрощения рисунка атомы водорода на рисунке не показаны.

Равновесные расстояния при $T = 0^\circ\text{K}$ соответствуют $R(\text{Li1-S1})=3.2 \text{ \AA}$ (7.0 \AA до соседнего эквивалентного атома серы), $R(\text{Li1-S2})=9.7 \text{ \AA}$, $R(\text{S2-S1})=10.0 \text{ \AA}$, $R(\text{Li2-S2})=5.2 \text{ \AA}$ (8.4 \AA до соседнего эквивалентного атома серы). При нагревании расстояния слегка меняются. Например, относительные вероятности найти (за время 1.5 пс при $T = 350^\circ\text{K}$) атомы лития (Li1 и Li2) вблизи соответствующих атомов серы ближайших групп SO_3^- (S1 и S2) показаны на рис. 2. Видно, что при нагреве до 350°K расстояние $R(\text{Li1-S1})$ меняется незначительно, а расстояние $R(\text{Li2-S2})$ при нагреве увеличивается на 1.5 \AA .

Произвольное вбрасывание в объем ячейки еще двух атомов лития приводит к тому, что они занимают аналогичные по отношению к группам SO_3^- позиции на расстояниях $R(\text{S2-Li})=3.8 \text{ \AA}$ (Li4), 5.5 \AA (Li1), 5.9 \AA (Li3), 9,6 \AA (Li2); $R(\text{S1-Li})=3.1(7.0) \text{ \AA}$ (Li2), 7.5 \AA (Li3); $R(\text{Li2-Li})=7.2 \text{ \AA}$ (L4), 7.5 \AA (L1), 7.6 \AA (L3); $R(\text{S1-S2})=10.5 \text{ \AA}$. В скобках после значения даны расстояния до ближайшего эквивалентного атома серы. Это значит, что при миграции литий-иона в такой мембране катион может проходить по найденным нами позициям, выталкивая граничные атомы лития на электрод.

Квантово-химическое моделирование иономеров выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 17-79-30054). Моделирование комплексов ДМСО с катионом методом MD-VASP выполнено по теме Государственного задания № АААА-А19-119061890019-5. Расчеты проводились в Вычислительном центре при Институте проблем химической физики РАН.

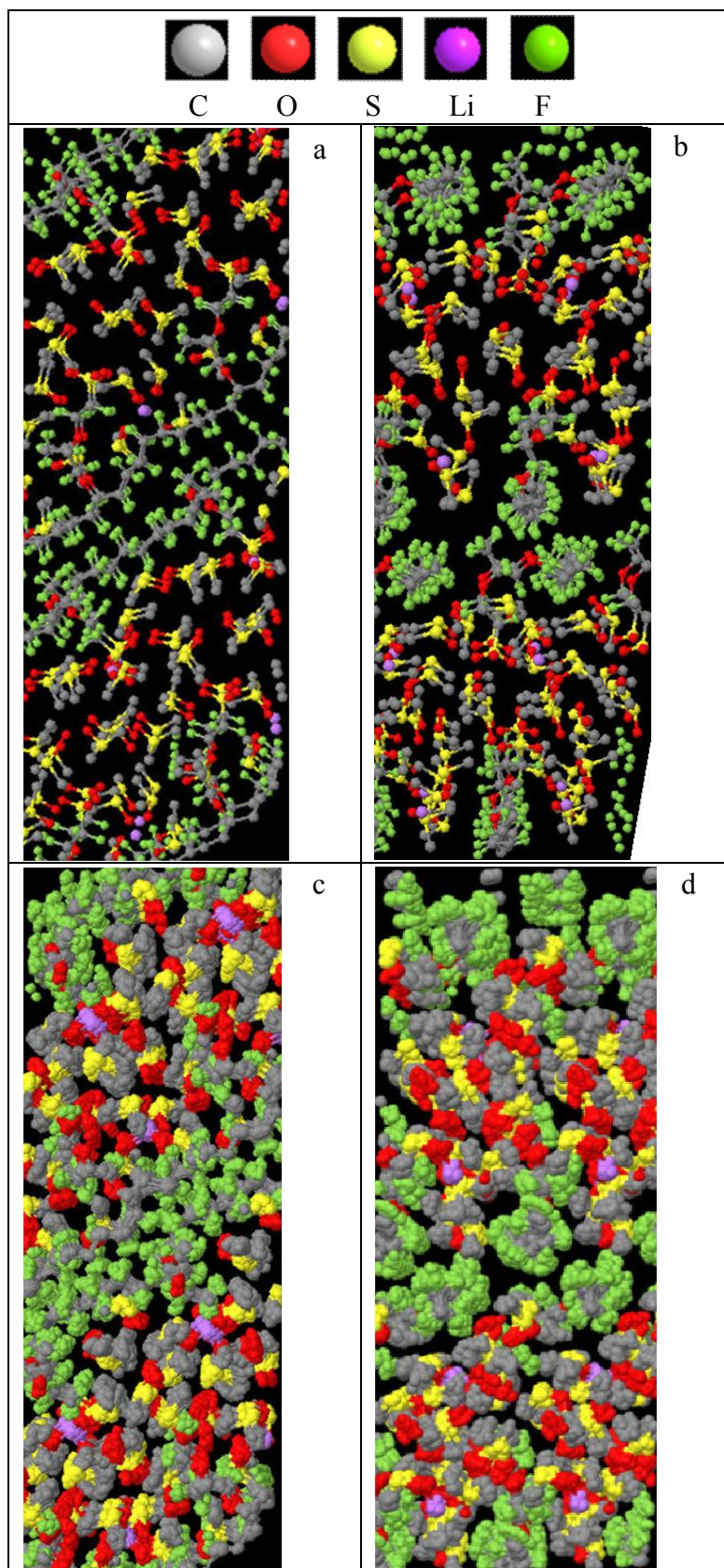
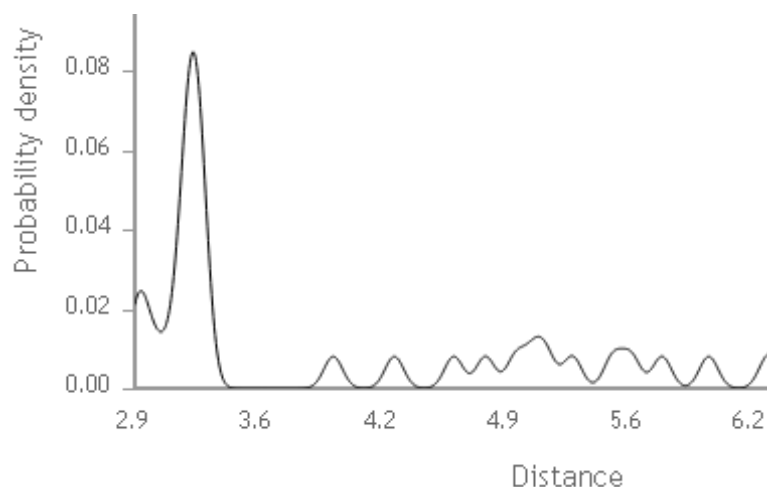
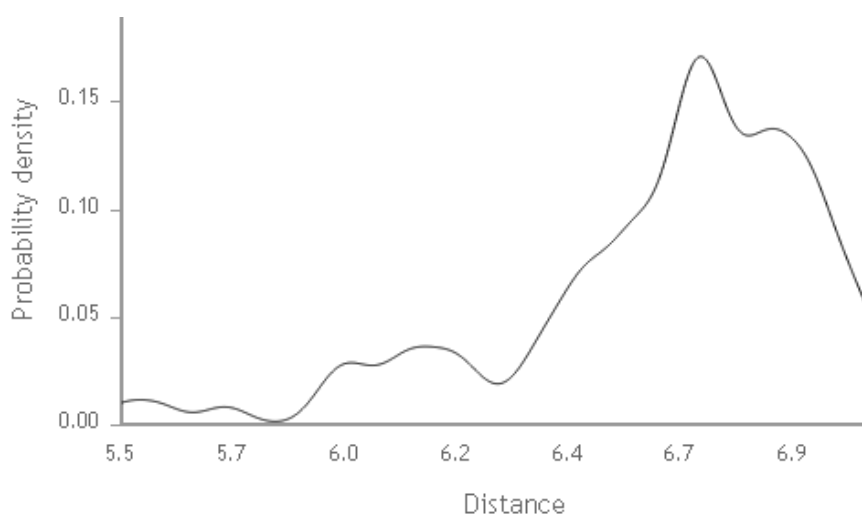


Рис. 1. Оптимизированные позиции атомов: вид перпендикулярно (a) и вдоль (b) фторуглеродных цепей при $T = 0^\circ\text{K}$, и позиции, занимаемые атомами каждые 15 фс в течение 1.5 пс при $T = 350^\circ\text{K}$ (c и d, соответственно). Атомы водорода на рисунке не показаны



S1-Li1



S2-Li2

Рис. 2. Относительные вероятности найти (за время 1.5 пс) атомы лития (Li1 и Li2) вблизи соответствующих атомов серы ближайших групп SO_3^- (S1 и S2) при $T = 350^\circ\text{K}$

QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF NATHION-LIKE LITHIUM-SUBSTITUTED IONOMERS PLASTIFIED WITH DIMETHYL SULFOXIDE

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

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

The structure of nafion-like lithium substituted ionomers plasticized by dimethyl sulfoxide (DMSO) was modeled using the PBE/PAW method taking into account gradient corrections, periodic boundary conditions, and MD-VASP. As a result, a rapid redistribution of Li-ions between DMSO and SO_3^- groups of Nafion was observed.

Keywords: ionic conductivity; Nafion; DMSO.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ
ВО ФТОРАЛЛИЛЬНЫХ РАДИКАЛАХА. В. Котомкин^{1,2}, Н. П. Русакова¹, В. В. Туровцев², Ю. Д. Орлов¹¹Тверской государственный университет»prospectpobedy@mail.ru²Тверской государственный медицинский университет

Распределение спиновой плотности $\sigma(R)$ в 11 фтораллильных радикалах получено с помощью «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM). Рассмотрена делокализация $\sigma(R)$ и показано отсутствие в изученных структурах классического радикального центра и свободной валентности.

Ключевые слова: электронное строение, квантовая теория атомов в молекулах, спиновая плотность, фтораллильные радикалы, радикальный центр, свободная валентность.

Промышленное получение многих органических веществ осуществляется через радикальные реакции. Экспериментальное определение свойств радикалов осложнено коротким временем их существования вследствие высокой реакционной способности.

Изучение распределения электронной плотности $\rho(r)$ соединения позволяет описать его химическую активность. Процедуры «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) [1] способны разделить $\rho(r)$ соединения на «топологические» атомы (Ω), границы которых определяются условием нулевого потока градиента $\rho(r)$. В QTAIM каждому Ω соответствуют физические свойства, суммирование которых дает свойства более крупных фрагментов (R). Если распределение электронной плотности $\rho_R(r)$ фрагмента R в двух разных структурах одинаково, то вклады R в экстенсивные свойства соединений совпадают – наблюдается явление переносимости. С помощью переносимых вкладов Ω или R в рамках аддитивных подходов рассчитывают полные свойства соединений.

Сопоставление $\rho_R(r)$ разных фрагментов удобнее всего проводить по таким параметрам R , как заряд, энергия и объем. Описание электронного строения радикалов требует учета спиновой плотности $\sigma(R)$, равной разности $\rho(r)$ электронов с α и β спиновыми функциями, проинтегрированных по объему фрагмента. Анализ $\sigma(R)$ позволяет локализовать радикальный центр как область с наибольшей концентрацией плотности неспаренного электрона ($\sigma(R) \geq 0,5$) и отнести атому радикального центра свободную валентность.

Одними из наиболее интересных объектов квантовохимического исследования являются сопряженные свободные радикалы, в которых атом с классической свободной валентностью находится рядом с кратной связью [2]. Величины $\sigma(R)$ во фторзамещенных аллильных радикалах позволяют описать влияние электроотрицательного фрагмента на распределение $\rho(r)$. Цель работы – исследование распределения спиновой плотности фторзамещенных аллильных радикалов.

Равновесные геометрии и распределение электронной плотности $\rho(r)$ изученных соединений (табл. 1) найдены с помощью программы Gaussian 03 [3]

методом B3LYP в базе 6-311++G (3df,3pd) 6d 10f. Спиновая плотность атомов $\sigma(\Omega)$ найдена численным интегрированием по атомным бассейнам Ω в границах изоповерхностей $\rho(r) = 0,001$ а.е. с помощью AimAll [4] и суммирована в параметры групп $\sigma(R)$, где $R = \text{CH}_2, \text{CH}, \text{CHF}, \text{CF}, \text{CF}_2$. Погрешность расчета $\sigma(R)$ составила $\Delta\sigma(R) \leq 0,01$.

Таблица 1

Аллильный радикал (1) и его фторзамещенные соединения (2-12)

$\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ (1)	$\text{CHF} \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ (2)	$\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$ (3)
$\text{CF}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ (4)	$\text{CFH} \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$ (5)	$\text{CFH} \approx \text{CH} \approx \text{CHF}$ (6)
$\text{CFH} \approx \text{CF} \approx \text{CFH}$ (7)	$\text{CHF} \approx \text{CH} \approx \text{CF}_2$ (8)	$\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CF}_2$ (9)
$\text{CF}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CF}_2$ (10)	$\text{CFH} \approx \text{CF} \approx \text{CF}_2$ (11)	$\text{CF}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CF}_2$ (12)

Анализ $\sigma(R)$ (табл. 2) показывает, что в аллильном радикале избыточная электронная плотность α электронов в равных долях разделена между двумя концевыми группами CH_2 , в то время, как центральная группа CH содержит избыточную плотность β электронов. Аналогичное распределение $\sigma(R)$ наблюдается в $\text{CHF} \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ и симметричных фторзамещенных соединениях $\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$, $\text{CFH} \approx \text{CH} \approx \text{CHF}$, $\text{CFH} \approx \text{CF} \approx \text{CFH}$, $\text{CF}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CF}_2$, $\text{CF}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CF}_2$ (табл. 2).

Спиновые плотности концевых групп в $\text{CF}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ и $\text{CHF} \approx \text{CH} \approx \text{CF}_2$ несколько различаются: $\sigma(\text{CF}_2) < \sigma(\text{CH}_2)$ и $\sigma(\text{CF}_2) < \sigma(\text{CHF})$. Замена CH на CF увеличивает $\sigma(R)$ концевых фторсодержащих групп в $\text{CFH} \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$ и

$\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CF}_2$ (относительно $\text{CFH} \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ и $\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CF}_2$ соответственно). В $\text{CFH} \approx \text{CH} \approx \text{CF}_2$ замена центрального водорода на фтор приводит к выравниванию значений $\sigma(\text{CFH})$ и $\sigma(\text{CF}_2)$. Разброс $\sigma(R)$ центральной группы для всех фторзамещенных аллилов не превышает погрешности $\Delta\sigma(R)$ (табл. 2).

Таблица 2

Спиновая плотность групп $\sigma(R)$ в аллильном радикале и его фторзамещенных соединениях

Соединение	CH_2	CHF	CF_2	CH	CF	CF_2	CHF	CH_2
$\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$	0,56			-0,12				0,56
$\text{CHF} \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$		0,57		-0,12				0,55
$\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$	0,56				-0,11			0,56
$\text{CF}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$			0,53	-0,11				0,58
$\text{CFH} \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$		0,61			-0,11			0,51
$\text{CFH} \approx \text{CH} \approx \text{CHF}$		0,57		-0,12			0,55	
$\text{CFH} \approx \text{CF} \approx \text{CFH}$		0,56			-0,13		0,56	
$\text{CHF} \approx \text{CH} \approx \text{CF}_2$		0,60		-0,12		0,52		
$\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CF}_2$	0,53				-0,11	0,58		
$\text{CF}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CF}_2$			0,56	-0,12		0,56		
$\text{CFH} \approx \text{CF} \approx \text{CF}_2$		0,57			-0,13	0,56		
$\text{CF}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CF}_2$			0,56		-0,13	0,56		

Разность спиновой плотности концевых групп фтораллильных радикалов и $\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ не превышает 0,05 (табл. 2). Таким образом, замена водорода на атом фтора не оказывает существенного влияния на делокализацию неспаренного электрона. Делокализация неспаренного электрона по всем фрагментам фтораллильных радикалов не позволяет отнести такие классические понятия как свободная валентность фрагментам (обозначается символом \bullet) и радикальный центр к конкретным и требует изображать связи в изученных структурах посредством символа \approx .

Работа выполнена в рамках проекта № 4.6469.2017/Б4 гос. задания Минобрнауки РФ.

Литература

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М.: Мир, 2001. – 532 с.
2. Чернова Е. М., Ситников В. Н., Туровцев В. В., Орлов Ю. Д. // ЖСХ. 2018. Т. 59. № 6. С. 1315-1320.
3. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 03 (Revision E 0,1 SMP), Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007.
4. AIMAll (Version 11.09.18. Professional), Todd A. Keith, 2010 (<http://aim.tkgristmill.com>)

SPIN DENSITY OF THE GROUP OF THE FLUOROALLYL RADICALS

A. Kotomkin^{1,2}, N. Rusakova¹, V. Turovtsev², Yu. Orlov¹

¹Tver State University, ²Tver State Medical University

The spin density distribution $\sigma(R)$ in 11 fluorallyl radicals is obtained using the "quantum theory of atoms in molecules" (QTAIM). The delocalization of $\sigma(R)$ is considered and the absence of a classical radical center and free valence in the studied structures is shown.

Keywords: electron density, quantum theory of atoms in molecules, spin density, fluorineallyl radicals, radical center, free valence.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧЕРЕНКОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ, ДВИЖУЩИХСЯ В ТКАНИ ЧЕЛОВЕКА

А. Н. Алмалиев, И. С. Баткин, П. В. Лукин

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»
lukin_pv@phys.vsu.ru

Предложена методика исследования оптических свойств тканей человека, основанная на измерении характеристик излучения Вавилова–Черенкова, сгенерированного пучком релятивистских электронов, движущихся в ткани. Для моделирования испускания и распространения оптических фотонов применен метод Монте–Карло. При этом учтены процессы многократного рассеяния электронов и фотонов. Показана чувствительность черенковского излучения к оптическим характеристикам человеческой ткани.

Ключевые слова: моделирование когерентного излучения; медицинская оптика; многократное рассеяние.

Одной из актуальных проблем медицинской физики является моделирование процессов взаимодействия частиц (электронов, протонов и т. д.) и света со структурами человеческого организма.

Ткани человека полупрозрачны для красной области спектра видимого света и инфракрасного излучения. Данное оптическое свойство широко используется в новых методах диагностики и лечения ряда заболеваний. Актуальные экспериментальные исследования оптических свойств человеческой ткани были проведены в нескольких работах. К примеру, было выполнено измерение углового распределения излученного и отраженного света оптического источника, находящегося за пределами человеческого тела [1].

Основная сложность таких исследований связана со значительной способностью человеческой ткани к упругому рассеянию. Обычно длина свободного пробега фотонов диагностического диапазона (длина волны 600–1200 нм) в ткани человека варьируется от 0.01 до 0.1 мм [2]. Чтобы определить показатель преломления, коэффициенты поглощения, альбедо и другие оптические свойства необходимо исследовать крайне тонкие слои ткани и размещать фотодетектор при различных углах относительно направления исходного светового пучка. Таким образом, подготовка образцов ткани снижает точность экспериментальных данных, а сложные оптические системы не позволяют измерять оптические характеристики *in vivo*.

Предлагается использование черенковского излучения, сгенерированного релятивистскими электронами, для исследования оптических характеристик человеческих тканей. Поскольку свойства черенковского излучения хорошо известны, его использование как источника фотонов видимого спектра для изучения ткани человека имеет некоторые преимущества:

- интенсивность и спектр испускаемых фотонов имеют простые зависимости от показателя преломления.
- черенковское излучение является внутренним источником фотонов, поэтому отсутствуют сложности, связанные с отражением фотонов на поверхности ткани.
- можно варьировать «позицию» созданного черенковского источника света путем изменения энергии электронов.
- можно генерировать короткие световые импульсы, чтобы выделять полезный сигнал из фона.
- можно изучать пространственное распределение оптических характеристик человеческой ткани.
- и наоборот, если оптические свойства ткани известны, можно исследовать прохождение электрона в среде.

Проведено теоретическое исследование эмиссии черенковского света проходящими через ткань человека электронами. Для изучения движения электронов и фотонов в человеческой ткани использован метод численного статистического моделирования, учитывавший процессы многократного рассеяния электронов и фотонов.

Применение черенковского света для дозиметрии при радиационной терапии обсуждалось и анализировалось в нескольких недавних публикациях. Был сделан вывод, что черенковское излучение подходит для задач дозиметрии на поверхности [3].

Предположим, что показатель преломления человеческой ткани для частоты ω равен $n(\omega)$. Типичные значения $n(\omega)$ для фотонов длины волны 600–1200 нм — 1.3–1.5 [2]. Энергия излучения Черенкова, которое испустил электрон энергии E , прошедший расстояние dx , задается формулой [4]:

$$\frac{dW}{dx} = \left(\frac{e}{c}\right)^2 \int \left[1 - \frac{1}{(\beta n(\omega))^2}\right] \omega d\omega, \quad (1)$$

где e — заряд электрона, c — постоянная скорости света, β — скорость частицы в единицах скорости света, а направление движения фотонов определяется углом θ_γ относительно направления импульса электрона:

$$\cos(\theta_\gamma) = \frac{1}{\beta n(\omega)}. \quad (2)$$

Чтобы выполнить моделирование движущегося в среде электрона, использовалась теория многократного рассеяния Мольера [5]. Для простоты мишень — пластина толщины D , разделенная (для удовлетворения условиям, накладываемым теорией Мольера) на 20–50 слоев в зависимости от начальной энергии электрона.

Алгоритм статистического моделирования представляет собой последовательность шагов для каждого слоя пластины. Рассматривая определенный слой, вычислялись энергия и импульс электрона, движущегося в данном слое. Затем

находилось количество черенковских фотонов в зависимости от их энергии, испущенных электроном в указанном слое. Черенковские фотоны направлялись под углом θ_γ к импульсу электрона (2), но с различными азимутами:

$$\phi_\gamma = 2\pi\eta, \quad (3)$$

где η — равномерно распределенное случайное число в интервале $[0, 1]$.

В итоге отслеживалось поведение черенковского фотона, рожденного в рассматриваемом слое.

Изучение всех оптических свойств человеческих тканей — весьма сложная задача. Однако, для описания распространения неполяризованного света в ткани может быть использована простая модель [2], в которой оптические свойства могут быть выражены через показатель преломления $n(\omega)$, интегральный коэффициент поглощения $\Sigma(\omega)$, альбедо $a(\omega)$ и средний косинус угла рассеяния фотона $g(\omega)$.

В диффузных средах угловое распределение рассеянных фотонов определяется по формуле Хени–Гринштейна [6]:

$$S(\theta_s) = \frac{0,5(1 - g^2)}{\sqrt{(1 + g^2 - 2g \cos(\theta_s))^3}}, \quad (4)$$

где θ_s — угол рассеяния фотона.

Значения параметров n , Σ , a и g зависят от энергии фотона и вида ткани. В данной модели неупругое рассеяние фотонов не учитывалось. Фактически в диагностическом диапазоне длин волн вероятность неупругого рассеяния сравнительно невелика.

Моделирование движения черенковских фотонов в диффузных средах проводилось с использованием метода Монте–Карло. Сначала, с помощью вышеописанной процедуры, определялись начальные условия: количество, координаты и направление движения черенковских фотонов, испущенных электроном. Затем, используя генератор случайных чисел, определялись координаты рассеивающего (или поглощающего) центра. И наконец, с помощью углового распределения Хени–Гринштейна (4) вычислялся угол рассеяния θ_s . Данная процедура повторяется, пока фотон не будет поглощен или не выйдет за пределы пластины.

Рис. 1-6 отражают результаты численного моделирования при расчете количества фотонов энергий 1–2 эВ, испущенных одним электроном, в зависимости от начальной энергии электрона E_e^0 , коэффициента поглощения Σ , среднего косинуса g и толщины пластины D . Полагалось, что источник электронов расположен снаружи пластины, а оптические параметры выбраны в диапазоне типичных значений для человеческой ткани в красной и инфракрасной части спектра [1]. Для простоты не принималась во внимание зависимость оптических характеристик от ω . Пучок электронов при моделировании был направлен по нормали к поверхности пластины.

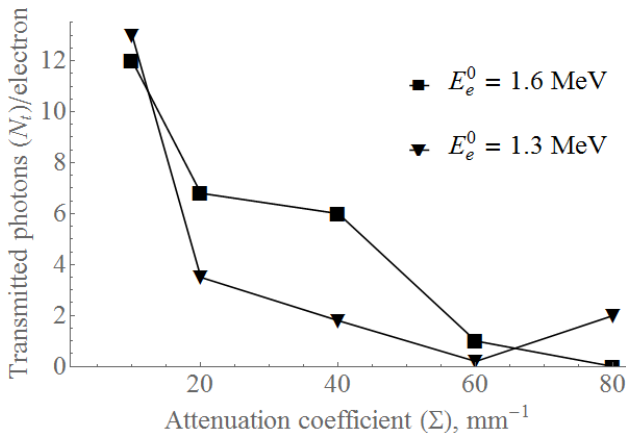


Рис. 1. Зависимость количества прошедших фотонов от коэффициента поглощения ($a = 0,99$, $g = 0,98$, $D = 5,0$ мм)

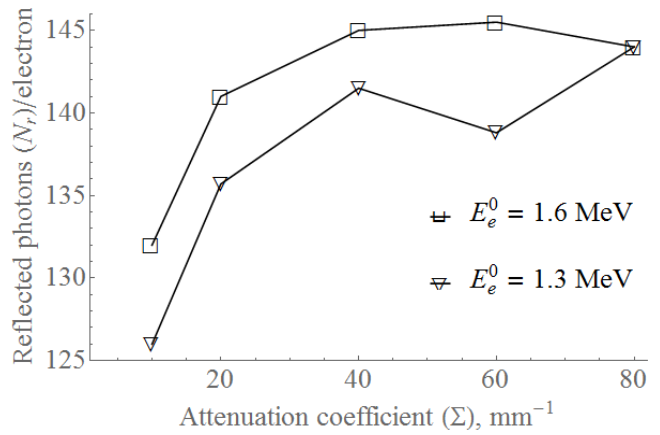


Рис. 2. Зависимость количества отраженных фотонов от коэффициента поглощения ($a = 0,99$, $g = 0,98$, $D = 5,0$ мм)

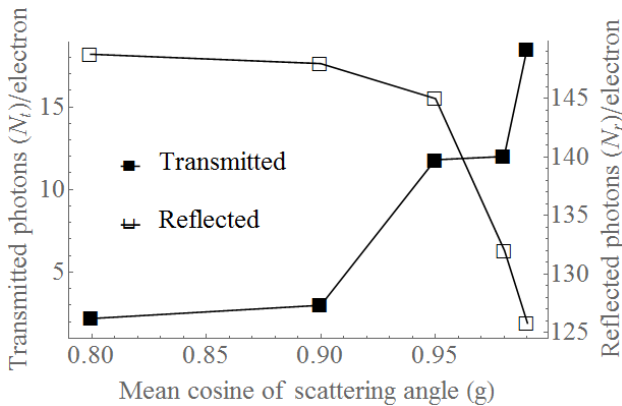


Рис. 3. Количество прошедших и отраженных фотонов в зависимости от среднего косинуса угла рассеяния ($E_e^0 = 1,6$ МэВ, $\Sigma = 10,0$ мм $^{-1}$, $a = 0,99$, $D = 5,0$ мм)

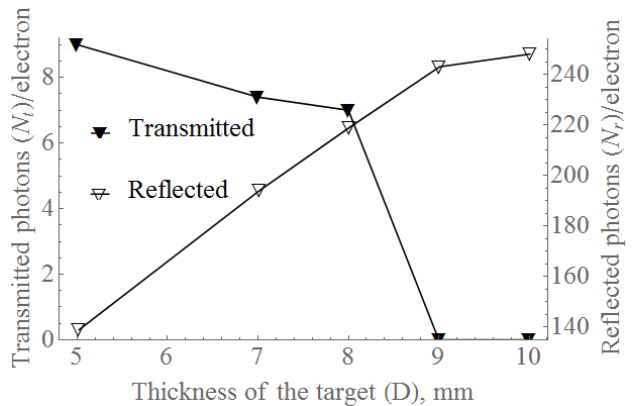


Рис. 4. Количество прошедших и отраженных фотонов в зависимости от толщины мишени ($E_e^0 = 1,9$ МэВ, $\Sigma = 10,0$ мм $^{-1}$, $a = 0,99$, $g = 0,98$)

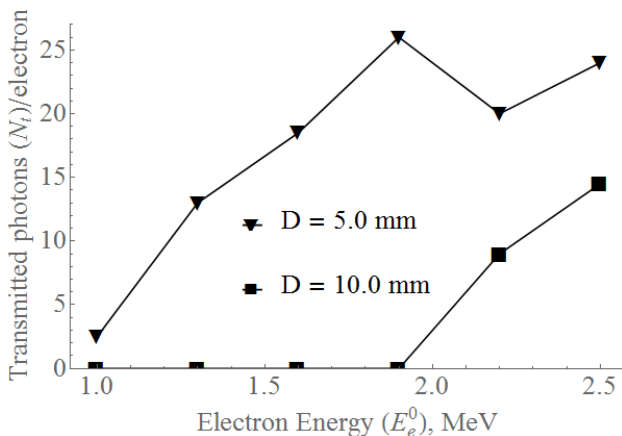


Рис. 5. Число прошедших через пластину толщины D фотонов от энергии влетающего электрона ($\Sigma = 10,0$ мм $^{-1}$, $a = 0,99$, $g = 0,98$)

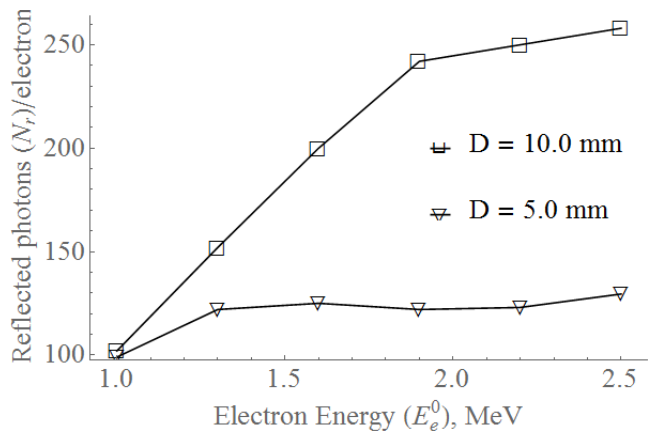


Рис. 6. Число отраженных из пластины толщины D фотонов от энергии влетающего электрона ($\Sigma = 10,0$ мм $^{-1}$, $a = 0,99$, $g = 0,98$)

Результаты моделирования показывают, что количество прошедших и отраженных фотонов в расчете на один электрон энергии 1–2 МэВ находится в диапазоне от 1 до 200. Предположим, что около 10^5 электронов проникает в ткань. Соответственно, будут испущены порядка 10^6 фотонов. Этого количества достаточно для детектирования с высокой статистической точностью. А полученная эквивалентная доза излучения будет меньше 20 мкГр. Это много меньше годовой дозы, получаемой от природных источников радиоактивности. По этой причине предложенный метод может применяться для измерений особенностей ткани человека *in vivo*.

Литература

1. Optical properties of normal and diseased human breast tissues in the visible and near infrared / V. G. Peters, D. R. Wymant, M. S. Patterson, G. L. Frank // *Physics in Medicine and Biology*. — 1990. — V. 35, No 9. — P. 1317–1334.
2. Cheong W., Prahl S., Welch A. A review of the optical properties of biological tissues // *IEEE Journal of Quantum Electronics*. — 1990. — V. 26, No 12. — P. 2166–2185.
3. Optical dosimetry of radiotherapy beams using Cherenkov radiation: the relationship between light emission and dose / A. K Glaser, R. Zhang, D. J. Gladstone, B. W. Pogue // *Physics in Medicine and Biology*. — 2014. — V. 59, No 14. — P. 3789–3811.
4. Зрелов В. П. Излучение Вавилова–Черенкова и его применение в физике высоких энергий. Т. 1. — Москва : Атомиздат, 1968.
5. Кноп G., Paul W. Interaction of electrons and α -particles with matter // α -, β - and γ -Ray Spectroscopy. Vol. 1 / K. Siegbahn Ed. — Amsterdam : North-Holland Publishing Company, 1968. — Ch. 1. P. 1–36.
6. Henyey L. C., Greenstein J. L. Diffuse radiation in the Galaxy // *The Astrophysical Journal*. — 1941. — V. 93. — P. 70–83.
7. Cherenkov Radiation from Electrons Passing Through Human Tissue / П. В. Лукин, А. Н. Алмалиев, М. А. Долгополов, И. В. Копытин, Т. А. Чуракова, И. С. Баткин // *NUCLEUS 2015 : 65 International Conference : New Horizons in Nuclear Physics, Nuclear Engineering, Femto- and Nanotechnologies : Book of Abstracts, Saint-Petersburg, June 29 – July 3, 2015*. — Saint-Petersburg, 2015. — P. 294.

SIMULATION OF CHERENKOV RADIATION FROM ELECTRONS PASSING THROUGH HUMAN TISSUE

A. N. Almaliev, I. Batkin, P. V. Lukin

Voronezh State University

A method for investigating the optical properties of human tissues is suggested. The method is based on the measurement of Vavilov–Cherenkov radiation produced by relativistic electrons passing through the tissue. Monte–Carlo simulation of visible photon emission and propagation is carried out taking into account multiple electron and photon scattering processes. Sensitivity of the Cherenkov radiation to the optical characteristics of human tissues is demonstrated.

Keywords: simulation of coherent radiation; medical optics; multiple scattering.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ИЗЛУЧЕНИЙ, СОПРОВОЖДАЮЩИХ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЯЖЕЛЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ДИЭЛЕКТРИКЕ

А. Н. Алмалиев, И. В. Копытин, П. В. Лукин, Т. А. Чуракова

Воронежский государственный университет
lukin_pv@phys.vsu.ru

Описан процесс деполяризации тяжелой заряженной частицей диэлектрика во внешнем электрическом поле и генерации в таких условиях дополнительного электромагнитного излучения. Произведено сравнение данного излучения с переходным и тормозным излучениями. Показано, что при определенных условиях исследуемое излучение может быть одного порядка с ними по интенсивности.

Ключевые слова: моделирование когерентного излучения; деполяризация диэлектрика; тормозное излучение; переходное излучение.

На данный момент изучено достаточно много механизмов генерации электромагнитного излучения, сопровождающего распространение заряженных частиц в различных средах (переходное, тормозное, Вавилова-Черенкова и т.д.) [1-3].

Дополнительный механизм когерентной эмиссии электромагнитного излучения может быть реализован в том случае, когда заряженная частица, двигаясь в диэлектрической среде, разрушает поляризацию молекул мишени, наведенную внешним электрическим полем. При изменении дипольного момента одной молекулы интенсивность излучения незначительна. Однако в спектре электромагнитного излучения макроскопического образца можно выделить длинноволновую область, в которой происходит когерентное сложение амплитуд излучения всех деполяризованных молекул.

Рассмотрим процесс изменения поляризационного состояния диэлектрика, находящегося во внешнем электрическом поле, тяжелой заряженной частицей.

Спектральная плотность энергии излучения, обусловленного изменением дипольного момента P , в общем случае выглядит так:

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{4\pi}{c^3} \left| \left(\frac{d^2 P}{dt^2} \right)_{\omega} \right|^2, \quad (1)$$

где $()_{\omega}$ – Фурье-компонента, c – скорость света.

Для наших условий длина волны превосходит характерные размеры излучающей среды, и поэтому для P мы принимаем дипольный момент целого образца:

$$P = N \langle p_{0E} \rangle, \quad (2)$$

где N – число поляризованных вдоль линий внешнего поля молекул, а $\langle p_{0E} \rangle$ – среднее значение коллинеарной полю компоненты дипольного момента p_0 молекулы:

$$\langle p_{0E} \rangle = \left(c \operatorname{th} \frac{p_0 F}{kT} - \frac{kT}{p_0 F} \right) \cdot p_0 = L \left(\frac{p_0 F}{kT} \right) \cdot p_0. \quad (3)$$

Здесь $L(x)$ – функция Ланжевена, F – напряженность внешнего электрического поля.

В процессе движения частицы в среде с течением времени изменяется только число молекул, поляризованных по полю, так как молекулы, с которыми провзаимодействовала налетающая частица, не вносят вклад в общую поляризацию мишени P , следовательно

$$\frac{dP}{dt} = \langle p_{0E} \rangle \frac{dN}{dt}, \quad (4)$$

$$\left(\frac{d^2 P}{dt^2} \right)_{\omega} = \langle p_{0E} \rangle \left(\frac{d^2 N}{dt^2} \right)_{\omega}. \quad (5)$$

Очевидно, что число деполаризованных частиц молекул будет пропорционально величине ее энергетических потерь на пройденном участке движения:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{\alpha} \frac{dE}{dt}, \quad (6)$$

где E – кинетическая энергия налетающей частицы, α – средняя энергия, необходимая для изменения направления дипольного момента одной молекулы.

Тогда для плотности интенсивности излучения получим:

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{4\pi}{c^3} \left| \langle p_{0E} \rangle \frac{1}{\alpha} \left(\frac{d^2 E}{dt^2} \right)_{\omega} \right|^2 = \frac{4\pi}{c^3 \alpha^2} L^2 \left(\frac{p_0 F}{kT} \right) \cdot p_0^2 \left| \left(\frac{d^2 E}{dt^2} \right)_{\omega} \right|^2. \quad (7)$$

Для получения Фурье-компоненты второй производной энергии частицы по времени воспользуемся формулой Бете-Блоха [4]:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi n_e e^4 Z^2}{mv^2} \left(\ln \frac{2mv^2 \gamma^2}{I} - \frac{v^2}{c^2} \right). \quad (8)$$

Здесь n_e – концентрация электронов в среде, m – масса электрона, Z – заряд налетающей частицы в единицах $|e|$, v – скорость частицы, I – потенциал ионизации молекул, $\gamma^2 = (1 - (v/c)^2)^{-1}$, x – длина пути, пройденного частицей в среде. Мы рассматриваем случай нерелятивистских энергий налетающей частицы, т.е. $\gamma = 1$.

Численно решая уравнение Бете-Блоха, находим зависимость энергии частицы от времени, вычисляем Фурье-компоненту ее второй производной и подставляем в выражение для плотности энергии излучения (7).

Моделирование исследуемого электромагнитного излучения, генерируемого протоном, движущимся в воде, обнаруживает локальный максимум в районе сантиметрового диапазона спектра энергии излучения (рис. 1). Он расположен на частоте $\omega \approx 4,1 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$ и имеет плотность энергии $dW/d\omega \approx 7,5 \cdot 10^{-47} \text{ Дж} \cdot \text{с}$. Численный расчет производился при следующих значениях параметров: начальная

энергия протона $E_0 = 100$ МэВ, толщина образца $L = 2,6$ см, температура среды $T = 300$ К, напряженность внешнего поля $F = 10^5$ В·м⁻¹.

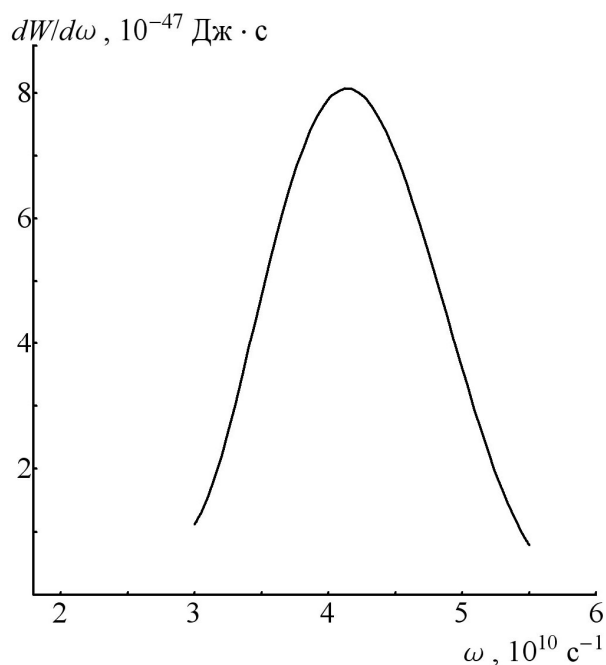


Рис. 1. Максимум в энергетическом спектре исследуемого излучения

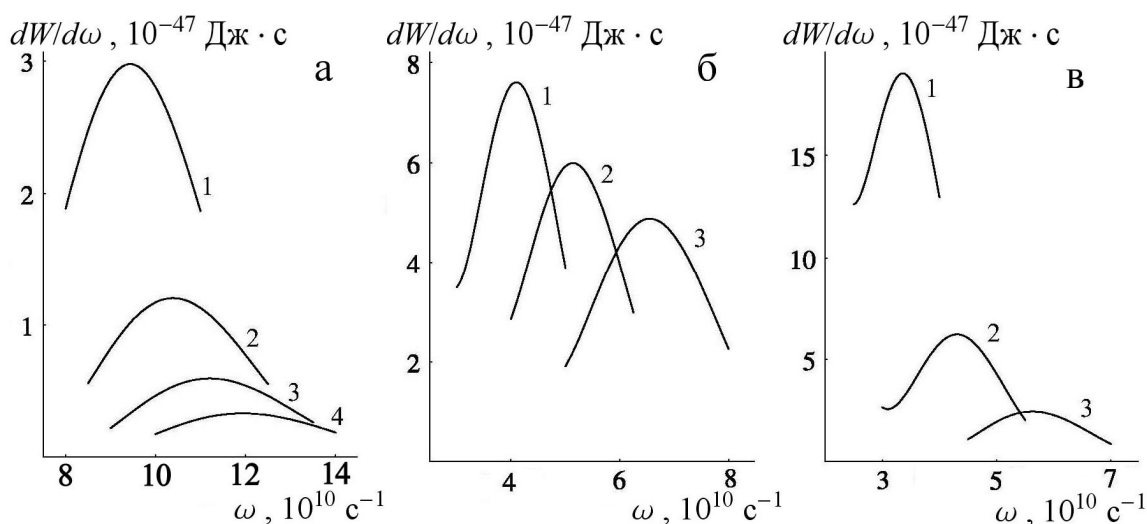


Рис. 2. Энергетический спектр излучения при деполяризации в зависимости от начальной энергии налетающей частицы: $E_0 = 70$ МэВ (1); $E_0 = 80$ МэВ (2); $E_0 = 90$ МэВ (3); $E_0 = 100$ МэВ (4) (а); от начальной энергии налетающей частицы и характерной для данной энергии ширины мишени: $E_0 = 100$ МэВ, $L = 2,6$ см (1); $E_0 = 90$ МэВ, $L = 2$ см (2); $E_0 = 80$ МэВ, $L = 1,5$ см (3) (б); от ширины мишени: $L = 3$ см (1); $L = 2,5$ см (2); $L = 2$ см (3) (в)

Спектральная плотность энергии исследуемого излучения в зависимости от начальной энергии налетающей частицы при фиксированной толщине образца $L = 1$ см приведена на рис. 2, а. При уменьшении начальной энергии сильно падает длина полного пробега частицы в среде. Плотность энергии в

максимуме уменьшается с увеличением энергии влетающей частицы, и его положение сдвигается в область более коротких волн.

Рис. 2, б иллюстрирует спектр плотности энергии излучения при различных E_0 и почти максимальных ширин образца для данных энергий протона. При данных начальных условиях наблюдается тенденция, противоположная предыдущей. Решающее значение здесь имеют размеры среды, от которых зависит число деполяризованных налетающей частицей молекул, увеличение которых в свою очередь приводит к когерентному усилению излучения.

Зависимость спектральной плотности энергии исследуемого излучения от толщины мишени при фиксированной энергии налетающего протона приведена на рис. 2, в.

Сравним описанный механизм генерации электромагнитного излучения с другими возникающими в данных условиях видами излучения.

Спектральная плотность энергии переходного излучения назад тяжелой нерелятивистской частицы, подлетающей нормально к границе раздела вакуум ($\varepsilon = \mu = 1$) – среда ($\varepsilon > 1, \mu = 1$), имеет вид [1]:

$$\frac{dW^{tr}}{d\omega} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{q^2 v^2 |\varepsilon - 1|^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta}{\pi^2 c^3 |\varepsilon \cos \theta + \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \theta}|^2} 2\pi \sin \theta d\theta, \quad (9)$$

где угол θ отсчитывается от направленной в вакуум нормали к границе среды.

Очевидно, что частотная зависимость энергии переходного излучения определяется дисперсией диэлектрической проницаемости. Используя известное асимптотическое выражение

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2}, \quad (10)$$

$$\omega_{pe}^2 = \frac{4\pi N_e e^2}{m_e}, \quad (11)$$

рассчитаем спектр переходного излучения. Здесь N_e – концентрация электронов вещества, m_e – масса электрона, e – его заряд, $\omega_{pe} \approx 4,38 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$.

Как показывает численное моделирование переходного излучения, в области исследуемых частот ($\omega \sim 10^{10} \text{ с}^{-1}$) спектральная плотность энергии практически не зависит от частоты излучения, $dW^{tr}/d\omega \approx 7 \cdot 10^{-38} \text{ Дж} \cdot \text{с}$. Видно, что она намного выше спектра исследуемого излучения в максимуме при нормальных условиях. Однако, усиливая напряженность внешнего электрического поля и снижая температуру среды диэлектрика, мы увеличиваем энергию исследуемого излучения, при этом положение максимума в спектре не изменяется. И при некоторых условиях сравниваемые механизмы излучения становятся одного порядка по интенсивности (рис. 3). Например, при $T = 0,1 \text{ К}$, $F = 10^7 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$ получаем плотность энергии описанного излучения $dW/d\omega \approx 2,9 \cdot 10^{-38} \text{ Дж} \cdot \text{с}$.

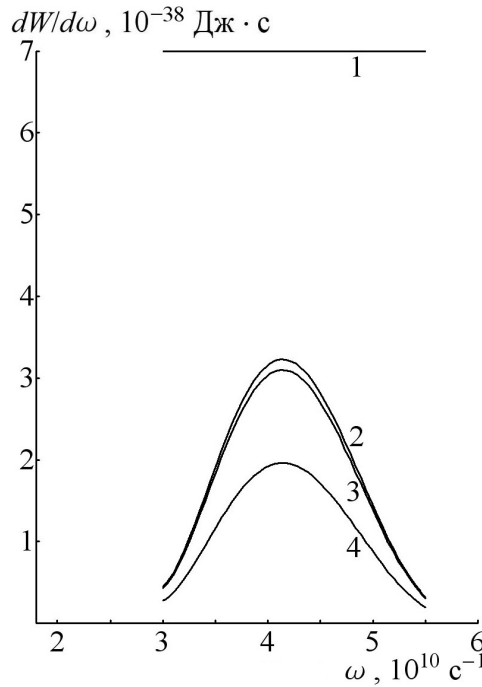


Рис. 3. Спектры переходного (1) и исследуемого излучений при напряженности внешнего поля $F = 10^7 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$ и температуре диэлектрика: $T = 0,01 \text{ К}$ (2); $T = 0,1 \text{ К}$ (3); $T = 1 \text{ К}$ (4)

Дифференциальное по частоте сечение полного тормозного излучения при рассеянии тяжелой заряженной частицы на атоме в низшем борновском приближении имеет вид [5]

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{16Z_0Z^4e^6}{3\hbar M^2c^3v^2\omega} \ln \frac{2\hbar MvR_z}{me^2} + \frac{16Z^2e^6}{3\hbar m^2c^3v^2\omega} \left| \frac{\omega^2\hbar^6}{m^2e^8} \alpha_d(\omega) \right|^2 \ln \frac{e^2mv}{\hbar^2\omega R_\omega}, \quad (12)$$

где Z_0 – заряд ядра атома, R_z – область атома, вне которой находится примерно Z электронов, $\alpha_d(\omega)$ – дипольная поляризуемость атома, R_ω – радиус оболочки, вносящей наибольший вклад в $\alpha_d(\omega)$ при данном ω .

А спектральная плотность излучения в свою очередь равна

$$\frac{dW^t}{d\omega} = \int \hbar\omega n_i v \frac{d\sigma}{d\omega} dt. \quad (13)$$

где n_i – концентрация атомов в среде. Первый член в (12) – традиционное тормозное излучение, второй – поляризационное. Сохранение обеих компонент имеет смысл лишь для тех частот, на которых они одного порядка:

$$\omega \sim \omega_R = \left(\frac{Z_0Z^2m}{M\alpha_d(0)} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (14)$$

$$\alpha_d(0) \approx \frac{N_{ext}}{I^2} \frac{m^2e^8}{\hbar^4}. \quad (15)$$

Здесь N_{ext} – число наружных электронов. При $\omega \ll \omega_R$ доминирует обычное тормозное излучение, т.е. излучение налетающей частицы. Для $\omega \gg \omega_R$ преобладает поляризационное тормозное излучение.

В нашем случае $\omega_R \approx 6,7 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Таким образом, в рассматриваемой области частот поляризационное излучение намного меньше традиционного тормозного, т.е. можно учесть только последнее. В результате для плотности энергии излучения при $\hbar\omega \ll E$ получается более простое выражение:

$$\frac{dW^t}{d\omega} = \int \frac{16(Ze)^4 (Z_0 e)^2 n_i}{3M^2 c^3 v} \left(\ln \frac{2E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) dt. \quad (16)$$

В итоге для $\omega \sim 10^{10} \text{ с}^{-1}$ спектральная плотность тормозного излучения на 2 порядка меньше спектральной плотности переходного излучения, а, следовательно, и исследуемого излучения при указанных условиях.

Анализируя полученные результаты, можно сделать вывод о том, что при расчете движения заряженных частиц в диэлектрической среде и генерируемого при этом электромагнитного излучения, необходимо учитывать в некоторых условиях деполяризацию налетающей частицей диэлектрика-мишени в дополнение к традиционным переходному и тормозному излучениям.

Необходимость учета всех возможных механизмов генерации электромагнитного излучения возникает при расчете и конструировании электронных приборов, функционирующих на летательных аппаратах, подвергающихся воздействию космического излучения [6].

Литература

1. Гинзбург В. Л., Цытович В. Н. Переходное излучение и переходное рассеяние. — М.: Наука, 1984. — 360 с.
2. Базылев В. А., Жеваго Н. К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. — М.: Наука, 1987.
3. Тер-Микаелян М. Л. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. — Ереван: Изд-во АН Арм. ССР, 1969.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982. — 620 с.
5. Амусья М. Я., Буймистров В. М., Зон Б. А., Цытович В. Н. и др. Поляризационное тормозное излучение частиц и атомов. — М.: Наука, 1987. — 336 с.
6. Новиков Л. С. Радиационные воздействия на материалы космических аппаратов: учебное пособие. — М.: Университетская книга, 2010. — 192 с.

COMPARATIVE ANALYSIS OF ELECTROMAGNETIC RADIATIONS ACCOMPANYING THE PROPAGATION OF HEAVY CHARGED PARTICLES IN DIELECTRIC

A. N. Almaliev, I. V. Kopytin, P. V. Lukin, T. A. Churakova

Voronezh State University

The process of electromagnetic radiation arising from the depolarization of a medium by a heavy charged particle in a dielectric layer in external electric field is described. This radiation is compared to transition radiation and bremsstrahlung. It is shown that under certain conditions, the studied radiation can be of the same order of magnitude with them.

Keywords: simulation of coherent radiation; depolarization of the dielectric; transition radiation; bremsstrahlung.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ В ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЁННОМ СОСТОЯНИИ ДЛЯ СИСТЕМ С КИСЛОТНО-ОСНОВНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ПО ЛЬЮИСУ

А. О. Наумова, Р. С. Шамсиев, П. В. Мельников, В. Р. Флид, Н. К. Зайцев

МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких
химических технологий имени М. В. Ломоносова, Москва
alina.naumova.92@bk.ru

Методом TDDFT-PBE/L11 выполнены квантово-химические расчёты значений энергии электронно-возбуждённого состояния систем Ar-BF₃. Показана возможность образования эксиплексов за счёт обмена электронными парами по кислотно-основному механизму Льюиса на примере взаимодействия нафталина, 1-метилнафталина, 1-метоксинафталина с BF₃. Определена оптимальная геометрия комплексов, рассчитаны минимальные межъядерные расстояния B-C_{Ar}.

Ключевые слова: эксиплексы, квантово-химические расчёты, кислотно-основное взаимодействие, кислота Льюиса.

Фотохимические реакции протекают через образование эксиплекса, т.е. комплекса в возбуждённом состоянии, если нет комплекса в основном состоянии. Эксиплексы были открыты в 1950-х годах аспирантом выдающегося германского фотохимика Альберта Веллера, изучавшим тушение люминесценции углеводородов донорами электрона (типа диэтиланилина) в малополярном растворителе [1]. Интенсивность люминесценции закономерно уменьшалась, но при этом в спектре люминесценции появлялась новая, ранее не наблюдавшаяся широкая бесструктурная полоса, лежащая в более длинноволновой области, чем полоса люминесценции исходного углеводорода. Например, известна система антрацен-диметиланилин, образующая синглетный эксиплекс (рис. 1).

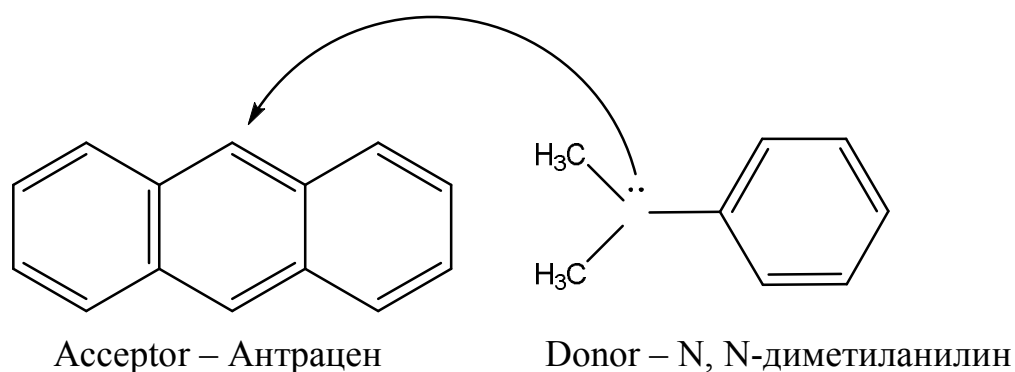
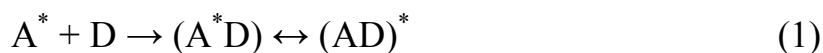


Рис. 1. Типичная система, образующая эксиплекс по механизму A* + D

Отечественные исследователи внесли значительный вклад в исследование природы и свойств эксиплексов. М. Г. Кузьмин считал, что природа связывания компонентов в эксиплексе определяется миграцией энергии электронного возбуждения между компонентами:



Н. А. Садовский предполагал другой механизм – перенос электрона от донора электрона к электронно-возбужденному акцептору с последующим удерживанием образующейся пары ион-радикалов кулоновскими силами в малополярном растворителе [2-5]:



Однако обе гипотезы требуют серьезного дополнения, поскольку, по нашему мнению, существует третья компонента, связывающая частицы, образующие эксиплекс, – обмен электронными парами по кислотно-основному механизму Льюиса, причем в некоторых случаях этот вклад может быть решающим. Для проверки данной гипотезы были проанализированы ранее не изученные экспериментально системы, где предполагается взаимодействие по схеме:



В качестве доноров нами использовались молекулы аренов в ряду: пирен, антрацен, нафталин, 1-метилнафталин, 1-метоксинафталин. В качестве акцептора – BF_3 , – типичная кислота Льюиса (таблица).

Рассчитанные (метод TDDFT-PBE) значения энергии взаимодействия (ккал/моль) между молекулами Ar и BF_3 , а также межъядерные расстояния B-C_{Ar} (Å) в основном (S_0) и возбужденном (S_1) состояниях

Ar	Состояние	Энергия взаимодействия (глубина потенциальной ямы), ккал/моль	Расстояние B-C _{Ar} , Å
Пирен	S_0	-1.74	>3
	S_1	-2.29	>3
Антрацен	S_0	-1.83	>3
	S_1	-2.07	>3
Нафталин	S_0	-1.82	>3
	S_1	-6.33	1.88
1-метилнафталин	S_0	-1.88	>3
	S_1	-10.2	1.87
1-метоксинафталин	S_0	-1.82	>3
	S_1	-14.2	1.87

Квантово-химические расчеты проведены в программе Priroda в рамках метода теории функционала плотности (DFT-PBE) для оптимизации геометрии основного состояния (S_0) и время-зависимой теории функционала плотности (TDDFT-PBE) – для оптимизации геометрии возбужденного состояния (S_1). Ис-

пользован обменно-корреляционный функционал PBE в сочетании с базисом L11 [6, 7].

Квантово-химические расчёты показали, что в основном состоянии компоненты систем Ar-BF₃ практически не взаимодействуют (выигрыш в энергии не превышает 2 ккал/моль), однако при возбуждении молекулы донора в ряду: нафталин, 1-метилнафталин, 1-метоксинафталин (S₁) наблюдается значительный выигрыш в энергии, который возрастает от 6-7 ккал/моль (для нафталина) до 14-15 ккал/моль (для 1-метоксинафталина).

Для системы с наибольшей глубиной потенциальной ямы, а именно 1-метоксинафталин - BF₃, произвели расчёт энергий в зависимости от межъядерного расстояния В-С_{Ar} (Å) в основном (S₀) и возбужденном (S₁) состояниях (энергетических профилей). На рис. 2, а видно, что в возбуждённом состоянии, в отличие от основного, молекулы донора и акцептора образуют комплекс с равновесным расстоянием В-С_{Ar} = 1.87 Å. Оптимальная геометрия структуры представлена на рис. 2, б.

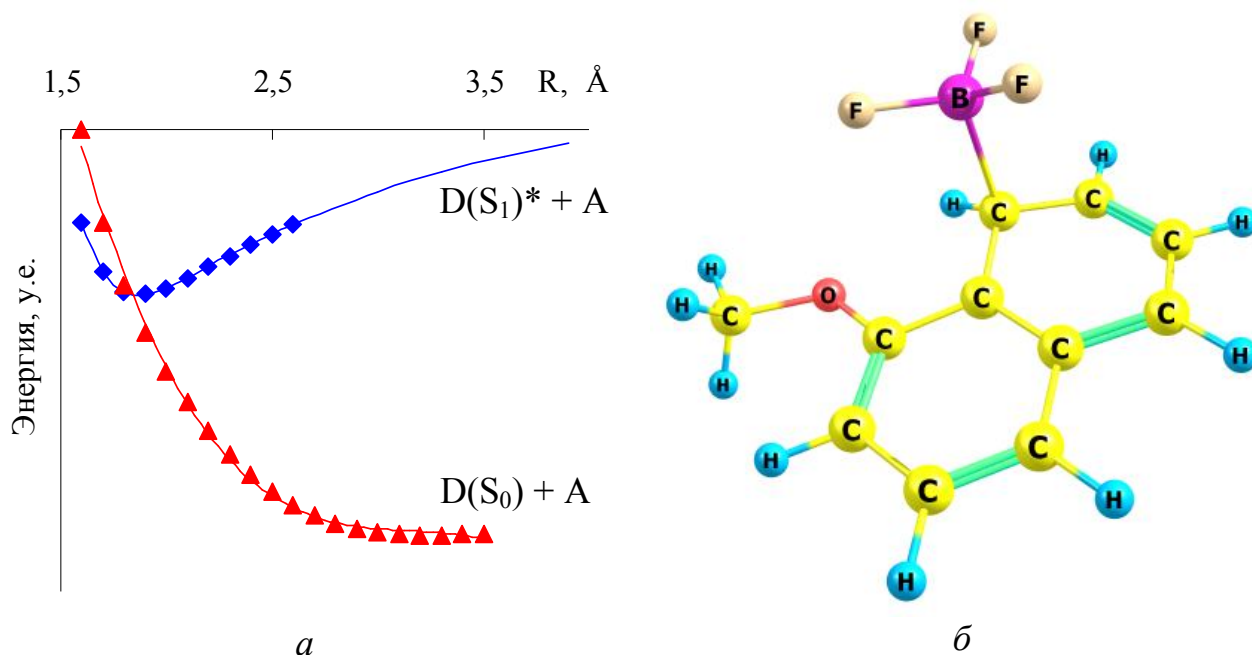


Рис. 2. Энергетическая диаграмма образования комплекса 1-метоксинафталин (D^{*}) - BF₃ (A) в возбуждённом состоянии (а); оптимизированная геометрия комплекса 1-метоксинафталин (D^{*}) - BF₃ (A) (б)

Таким образом, в настоящей работе впервые с помощью квантово-химических расчетов продемонстрирована возможность образования эксиплексов в системе D^{*}+A на примере ароматических соединений (D^{*}) с BF₃ (A). Поскольку между рассмотренными молекулами нет иного типа взаимодействия кроме кислотно-основного по Льюису, полученные результаты доказывают предложенную нами гипотезу о возможном механизме образования комплекса.

Литература

1. Gordon M., Ware W. R. The Exciplex, Academic Press Inc. 1975.
2. Соболева И. В., Садовский Н. А., Кузьмин М. Г. Кинетика образования и дезактивации эксиплексов 9,10-дицианоантрацена в гептане // Доклады Академии наук. 1977. Т. 233, № 4. С. 635-638.
3. Соболева И. В., Садовский Н. А., Кузьмин М. Г. Влияние природы донора на интеркомбинационную конверсию в эксиплексах 9,10-дицианантрацена в гептане // Доклады Академии наук. 1978. Т. 238, № 2. С. 400-403.
4. Соболева И. В., Садовский Н. А., Кузьмин М. Г. Сравнительное изучение зависимости тушения флуоресценции ароматических соединений и их эксиплексов от донорно-акцепторных свойств тушителей // Химия высоких энергий. 1980. Т. 14, № 1. С. 32-37.
5. Кузьмин М. Г., Садовский Н. А., Соболева И. В. Закономерности тушения флуоресценции эксиплексов донорами и акцепторами электрона // Химия высоких энергий. 1980. Т. 14, № 1. С. 38-42.
6. Laikov D. N. // Chem. Phys. Lett., 1997, V. 281, P. 151.
7. Laikov D. N., Ustynyuk Yu. A. // Russ. Chem. Bull. (Int. Ed.), 2005, V. 54, P. 820.

MODELING OF THE FORMATION OF COMPLEXES IN THE ELECTRON-EXCITED STATE FOR SYSTEMS WITH ACID-BASIC LEWIS INTERACTION

A.O. Naumova, R. S. Shamsiev, P. V. Melnikov, V. R. Flid, N. K. Zaytsev

MIREA – Russian Technological University, Institute of Fine Chemical Technologies named after M. V. Lomonosov, Moscow

Quantum-chemical calculations of the energy of the electronically excited state of Ar-BF₃ systems were performed using the TDDFT-PBE / L11 method. The possibility of the formation of exciplexes due to the exchange of electron pairs by the acid-base Lewis mechanism is shown on the example of the interaction of naphthalene, 1-methylnaphthalene, 1-methoxynaphthalene with BF₃. The optimal geometry of the complexes was determined, the minimum internuclear distances B-C_{Ar} were calculated.

Keywords: exciplexes, quantum-chemical calculations, acid-base interaction, Lewis acid.

ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ КОНФЛИКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СЛОЖНЫХ ЭРГАТИЧЕСКИХ СИСТЕМ СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ

М. В. Павловский

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж

В статье приведены результаты анализа научно-методического аппарата моделирования синтеза и координации сложных эргатических систем специального назначения и осуществлена формализованная постановка задачи на решение всего комплекса проблем, связанных с моделированием указанных процессов.

Ключевые слова: сложные эргатические системы специального назначения, средства и комплексы специального назначения, технические и организационно-технические системы специального назначения, информационно-управляющие системы.

Сложные эргатические системы специального назначения (СЭССН) – более широкое понятие, чем принятые и распространенные понятия отдельных средств, комплексов, технических или организационно-технических систем специального назначения (соответственно, ССН, КСН, ТССН или ОТССН). Примерами СЭССН могут быть системы радиолокационного обеспечения аэропортов, системы региональной связи, системы промышленного производства и тому подобные человеко-машинные системы территориально-промышленных комплексов (ТПК). При этом необходимо учитывать, что в составе СЭССН могут быть объединены не только отдельные ССН или КСН, но и ТССН и ОТССН. Такое объединение разнородных и разнонаправленных средств, комплексов и систем осуществляется не механическим сложением их возможностей, а инженеринговым сочленением предварительно подготовленных блоков и модулей в иерархическую совокупность взаимосвязанных элементов, приводящее к появлению нового системного свойства, недостижимого ни одним из элементов вновь создаваемой системы в отдельности [1]. Но СЭССН, создаваемые в динамике конфликта с противоборствующими ССН, КСН, ТССН и ОТССН, объединяемыми в сложные информационно-управляющие системы (ИУС), на момент их воплощения в жизнь уже морально устаревают, так как ИУС противоборствующей стороны и составляющие ее элементы постоянно развиваются. Это приводит к необходимости создания новых или координации существующих СЭССН [1], проведение анализа которых требует привлечения натурального или имитационного физико-математического моделирования. В соответствии с данными [2] для анализа СЭССН наиболее применим метод имитационного физико-математического моделирования.

В настоящее время создано много имитационных моделей и методов синтеза систем различного назначения, но, как показано в [3], все они, удовлетворяя основным требованиям системного анализа, не позволяют осуществить согласованный переход от качественно проработанных вопросов синтеза элемен-

тов и их деталей к качественно-количественному синтезу систем. СЭССН не стали исключением. Необходимо отметить, что к настоящему времени разработаны вопросы синтеза СЭССН для низших звеньев управления (отдельные цеха предприятий). Но при этом вопросы координации СЭССН остались не проработанными, а процесс их совершенствования целиком сведен к созданию (синтезу и разработке) новых систем. Необходимо отметить, что вопросы синтеза и координации СЭССН в высших звеньях управления (например, ТПК), получив математическое обоснование в ряде опубликованных работ (например, [4, 5]), не обрели применения в научных работах по причине не доведения теоретических исследований до практических моделей и методик. Данное противоречие определяет цель статьи: *необходимо разработать единый методологический подход к работам по моделированию синтеза и координации СЭССН высших звеньев управления (ВЗУ), который обеспечивает математически обоснованное принятие решений на каждом этапе процедуры «генерация – анализ – выбор», что повысит реализуемость и сбалансированность СЭССН ВЗУ.*

В соответствии с положениями [1, 6] разработка СЭССН ВЗУ предусматривает ряд последовательных процессов. Существующие в теории принятия решений методы не ориентированы на решение задачи оценки приоритетности каждого из альтернативных вариантов. Основными задачами, которые рассматривает современная теория принятия решений, являются задачи формирования множества альтернатив выполнения некоторой задачи, оценки их и выбор наиболее рациональной альтернативы [7].

Первый процесс в рамках стандартной методологии «генерация – анализ – выбор» определяет необходимость ответа на вопрос, что, в перспективный (планируемый) момент времени, должна представлять собой создаваемая СЭССН ВЗУ, из каких (и в каком числе) элементов (ССН, КСН, ТССН и ОТССН) она должна состоять. По сути, данный процесс осуществляет генерацию (или синтез) возможных альтернативных вариантов данной СЭССН.

В настоящее время задача моделирования в интересах генерации множества альтернатив в основном сводится к трем методам морфологического подхода, предложенного Ф. Цвикки [8]: 1) метод отрицания и конструирования; 2) метод систематического покрытия поля; 3) метод морфологического ящика. При этом данные методы позволяют увидеть перспективу полного поля, но целиком зависят от предубеждений исследователя. Для устранения влияния субъективных убеждений должен быть разработан формальный математический аппарат, для которого все элементы СЭССН ВЗУ (не только ССН, КСН, ТССН и ОТССН, но и связи между ними и ИУС противоположной стороны) должны быть заменены на математические объекты. В материалах [9] содержатся сведения о возможности использования в качестве математического аппарата генерации альтернативных вариантов СЭССН метода целочисленного линейного программирования (ЦЛП), проиллюстрированного формулой (1). Описание СЭССН (\mathbf{P}) и ее элементов в данной системе неравенств основано на их (и связях между ними) представлении в виде матриц пятого порядка, построение которых основано на моделировании физических элементов в виде математических объектов с использованием методов топологии и тензорного анализа Крона.

$$\mathbf{P} = \begin{cases} i_1 \mathbf{A}_{O-1} + i_2 \mathbf{A}_{O-2} + \dots + i_{N_O} \mathbf{A}_{O-N_O} \geq \mathbf{E}_{O-Tr} \\ j_1 \mathbf{A}_{K-1} + j_2 \mathbf{A}_{K-2} + \dots + j_{N_K} \mathbf{A}_{K-N_K} \geq \mathbf{E}_{K-Tr} \\ b_1 \mathbf{A}_{S-1} + b_2 \mathbf{A}_{S-2} + \dots + b_{N_S} \mathbf{A}_{S-N_S} \geq \mathbf{E}_{S-Tr} \\ i_1 + i_2 + \dots + i_{N_O} \leq N_O \\ j_1 + j_2 + \dots + j_{N_K} \leq N_K \\ b_1 + b_2 + \dots + b_{N_S} \leq N_S \end{cases} = \begin{cases} i_1 a_{O-1_1} + i_2 a_{O-2_1} + \dots + i_{N_O} a_{O-N_{O1}} \geq e_{O-Tr_{11}} \\ i_1 a_{O-1_2} + i_2 a_{O-2_2} + \dots + i_{N_O} a_{O-N_{O2}} \geq e_{O-Tr_{12}} \\ \dots \\ i_1 a_{O-1_{21}} + i_2 a_{O-2_{21}} + \dots + i_{N_O} a_{O-N_{O21}} \geq e_{O-Tr_{21}} \\ \dots \\ j_1 a_{K-1_1} + j_2 a_{K-2_1} + \dots + j_{N_K} a_{K-N_{K1}} \geq e_{K-Tr_{11}} \\ \dots \\ b_1 a_{S-1_{55}} + b_2 a_{S-2_{55}} + \dots + b_{N_S} a_{S-N_{S55}} \geq e_{S-Tr_{55}} \\ i_1 + i_2 + \dots + i_{N_O} \leq N_O \\ j_1 + j_2 + \dots + j_{N_K} \leq N_K \\ b_1 + b_2 + \dots + b_{N_S} \leq N_S \end{cases}, \quad (1)$$

где матрицы $\mathbf{A}_{O-1}, \mathbf{A}_{O-2}, \dots, \mathbf{A}_{O-N_O}$ описывают ССН, матрицы $\mathbf{A}_{K-1}, \mathbf{A}_{K-2}, \dots, \mathbf{A}_{K-N_K}$ осуществляют описание КСН в составе СЭССН ВЗУ, матрицы $\mathbf{A}_{S-1}, \mathbf{A}_{S-2}, \dots, \mathbf{A}_{S-N_S}$ определяют описание ТССН и ОТССН, а матрицы $\mathbf{E}_{O-Tr}, \mathbf{E}_{K-Tr}, \mathbf{E}_{S-Tr}$ задают требования по эффективности к элементам СЭССН ВЗУ.

Однако, данный математический аппарат в настоящее время не принят некоторыми ведущими учеными из-за: 1) неприятия (из-за кажущейся простоты) перехода от ССН, КСН, ТССН, ОТССН к отдельным полосовым фильтрам и их системам на основе подобия амплитудно-частотной характеристики таких фильтров и эффективности СЭССН ВЗУ; 2) отсутствия описанного и реализованного в виде математических процедур тензорного преобразования матриц элементов СЭССН ВЗУ к матрицам, используемым при решении задач ЦЛП, и обеспечивающим стандартизацию и нормализацию элементов матриц; 3) отсутствия соответствующей апробации математического аппарата.

Для устранения указанных выше недоработок необходимо сформировать и апробировать практические методики генерации альтернативных вариантов СЭССН ВЗУ на основе применения тензорного анализа Крона и решения задач ЦЛП, позволяющие математически обоснованно синтезировать СЭССН ВЗУ. При этом в перспективе ближайших исследований [10] будут разработаны модели и методики перехода от ССН, КСН, ТССН и ОТССН к их математическим объектам, а также программа, осуществляющая указанный переход.

Второй процесс в рамках стандартной методологии «генерация – анализ – выбор» осуществляет моделирование применения альтернативных вариантов СЭССН ВЗУ и позволяет получить ответы на вопросы: 1) каковы возможности по наращиванию характеристик составных элементов СЭССН ВЗУ (в том числе ее элементов) в перспективе планируемого ресурса времени; 2) каковы возможности их реализации и применения по совокупности показателей эффективности (как специальной, так и экономической); 3) отвечают ли предъявляемым требованиям по эффективности сформированные альтернативные варианты СЭССН ВЗУ или необходимо для каких-то из этих вариантов вернуться к первому процессу.

По сути, данный процесс осуществляет: 1) оценку всех сформированных вариантов (включая и дополнительно разработанных) по показателям специальной эффективности и экономической целесообразности (соответственно, СЭ и ЭЦ); 2) отсев из числа альтернатив тех из них, которые не удовлетворяют предъявляемым требованиям по СЭ и ЭЦ. При этом широко используются методы теории исследования операций [11], факторного анализа [12] и теоретических приложений [13]. Данные методы при всей своей проработанности, обладают существенным недостатком: они не позволяют осуществить математически обоснованное предложение комплекса работ по совершенствованию СЭССН ВЗУ в динамике изменения ИУС противоположной стороны, то есть в зависимости от изменений состава и эффективности ИУС. Для получения оценок изменения состава и свойств сложных систем на эффективность их применения в математическом анализе разработан соответствующий аппарат – инфлюентный анализ (ИА) [14]. Однако, до настоящего времени аппарат ИА не был использован для оценок влияния изменения состава и свойств СЭССН на изменение результирующей и комплексной СЭ конфликтного взаимодействия с ИУС. В материалах (например, [5]) содержатся сведения о возможности использования в качестве математического аппарата анализа сформированных (сгенерированных) альтернативных вариантов СЭССН методов ИА.

Основной задачей анализа сформированных альтернативных вариантов СЭССН ВЗУ является решение формализованного уравнения (2) при ограничениях (3) – (5):

$$\mathbf{P}_{\text{рац}}(t_1) = \text{Arg} \left\{ \max_{L_{P_0} \rightarrow L_{P_1}} \min \left(\mathbf{E}_0[\mathbf{P}_0 | \mathbf{Q}_0] \leq \mathbf{E}_1[\mathbf{P}_1 | \mathbf{Q}_1] \geq \mathbf{E}_{\text{треб}} \right) \right\}, \quad (2)$$

$$C(L_{P_0} \rightarrow L_{P_1}) \leq C_{\text{полн}}, \quad (3)$$

$$T(L_{P_0} \rightarrow L_{P_1}) \leq T_{\text{ПП}}, \quad (4)$$

$$W(L_{P_0} \rightarrow L_{P_1}) \leq W_{\text{ОПК}}, \quad (5)$$

где индексы «0» и «1» соответствуют текущему и перспективному моментам времени, \mathbf{E} – матрица СЭ СЭССН ВЗУ, \mathbf{Q} – матрица структуры ИУС, которой противостоит СЭССН ВЗУ, $L_{P_0} \rightarrow L_{P_1}$ – путь перевода СЭССН ВЗУ из состояния P_0 в P_1 , $C(L_{P_0} \rightarrow L_{P_1})$ – финансовые ресурсы, необходимые для осуществления перевода СЭССН ВЗУ, $C_{\text{полн}}$ – финансовые ограничения на реализацию всех мероприятий программы совершенствования, $T(L_{P_0} \rightarrow L_{P_1})$ – временные ресурсы, необходимые для осуществления перевода СЭССН ВЗУ, $T_{\text{ПП}}$ – длительность программного периода, $W(L_{P_0} \rightarrow L_{P_1})$ – научные и производственные ресурсы, необходимые для осуществления перевода СЭССН ВЗУ, $W_{\text{ОПК}}$ – полные научные и производственные ресурсы основного промышленного комплекса, привлекаемые для реализации всех мероприятий программы совершенствования.

Однако, данный математический аппарат, одобренный на конференциях и семинарах, до настоящего времени не реализован в виде законченных моделей и методов координации СЭССН ВЗУ вследствие отсутствия математических зависимостей эффективности противоборства с ИУС, а также их элементов от

состава и структур этих систем и их составных частей. Данные зависимости могут быть получены только на основе имитационного моделирования с ИУС по исходным данным по существующим СЭССН ВЗУ, что в настоящее время является затруднительным из-за ограничений по доступу к информации.

Не мало важным затруднением на этапе анализа, не позволяющим завершить проводимые исследования, является отсутствие реализованной имитационной модели конфликтного взаимодействия «СЭССН ВЗУ и ИУС». Отсутствие данной модели приводит к невозможности получения математических зависимостей СЭ СЭССН ВЗУ и их элементов от состава и структур этих систем и их составных частей, которые станут основой для проведения ИА сформированных альтернативных вариантов. Опубликованные к настоящему времени материалы (например, [15]) позволяют перейти непосредственно к осуществлению имитационного моделирования.

Для проведения оценок СЭ СЭССН ВЗУ в динамике конфликта с ИУС противника необходимо наличие модели и методик оценки результатов конфликта по специальным показателям. В настоящее время такая модель создана и реализуется на ЭВМ в виде программы, осуществляющей последовательный расчет данных показателей в зависимости от условий конфликта.

Третьим заключительным процессом стандартной процедуры «генерация – анализ – выбор» является предложение заказчику наиболее целесообразного для реализации и применения варианта СЭССН ВЗУ. При этом могут быть уточнены условия применения СЭССН ВЗУ или требования к ней, что означает необходимость формирования новых вариантов и, следовательно, проведения анализа этих вариантов. В основе моделирования на данном этапе лежит проведение оценок ЭЦ [16]. Для осуществления математически правомерного применения указанных методов экономического анализа и получения не противоречивых оценок ЭЦ СЭССН ВЗУ были проведены исследования, которые позволили: 1) осуществить системный охват особенностей применения СЭССН ВЗУ с учетом использования различных носителей ССН; 2) предложить для оценки ЭЦ непротиворечивые и математически обоснованные модели и методы, которые приводят к получению гарантированных стоимостей решения задач с требуемым уровнем эффективности; 3) обосновать правомерность применения эконометрических моделей определения образцов-аналогов для расчета стоимостных показателей работ по созданию (разработке и производству) перспективных (новых и модернизированных) СЭССН ВЗУ и их элементов.

Таким образом, в статье разработан и описан единый методологический подход к синтезу и координации СЭССН, который позволяет снизить риск принятия к реализации морально устаревших СЭССН ВЗУ и обеспечить математически обоснованное принятие решений на каждом этапе процедуры «генерация – анализ – выбор», что повысит реализуемость и сбалансированность СЭССН ВЗУ.

Литература

1. Месарович М. Теория иерархических многоуровневых систем / М. Месарович, Д. Мако, И. Такаха, - М.: «Мир», 1973. – 633 с.
2. Иващенко А. В. Основы моделирования сложных систем на ЭВМ / А. В. Иващенко, Р. П. Сыпченко, – Л.: ЛВВИУС, 1988. – 271 с.

3. Моисеев Н. Н. Математические задачи системного анализа. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1981. – 488 с.
4. Павловский М. В. Модель применения тензорного анализа Крона в интересах синтеза сложных специальных систем радиоэлектронного вооружения // Сборник докладов на XXII международной научно-технической конференции «Радиолокация, навигация, связь» RLNC-2016, - Воронеж: НПФ «САКВОЕЕ», 19-21 апреля, 2016. Т. 3. С. 1523-1530.
5. Павловский М. В. Метод выбора координации сложных систем радиоэлектронного вооружения на основе применения теорем непрерывности и сепарабельности инфлюентного анализа // Радиотехника. – 2016. – № 8. – С. 6- 9.
6. Дружинин В. В., Конторов Д. С. Основы военной системотехники, - М.: МО СССР, войска ПВО, 1983. – 415 с.
7. Макаров И. М., Виноградская Т. Т., Рубинский А. А., Соколов В. Б. Теория выбора и принятия решений. - М.: Наука, 1982. – 328 с.
8. Титов В. В. Морфологический подход / Интернет ресурс (дата обращения 18.01.2019 г.)
9. Павловский М. В. Метод решения матричных уравнений, используемых для синтеза сложных специальных систем // Вестник Воронежского государственного университета. Серия «Системный анализ и информационные технологии». № 1, 2018. С. 19-25.
10. Никульшин К. В. Постановка задачи на разработку методического обеспечения синтеза систем вооружения РЭБ на основе оценок показателя эффективности и применения тензорного анализа // Сборник докладов на I Всероссийской научно-практической конференции «Радиоэлектронная борьба в современном мире». - Воронеж: ВУНЦ ВВС «ВВА», 2019.
11. Вентцель Е. С. Теория вероятности. – М: Высшая школа, 1998. – 575 с.
12. Лоули Д., Максвелл А. Факторный анализ как статистический метод. Пер. с англ. Ю. Н. Благовещенского. - М.: Мир, 1967. – 144 с.
13. Тараканов К. В., Овчаров Л. А., Тарышкин А. Н. Аналитические методы исследования систем. - М: Сов. радио, 1974. – 225 с.
14. Трухаев Р. И. Инфлюентный анализ и принятие решений (детерминированный анализ), - М: Наука, 1984. – 235 с.
15. Павловский М. В. Имитационное моделирование радиоэлектронного конфликта сложных эргатических систем: структура модели // Информатика: проблемы, методология, технологии: материалы XV Междунар. науч.-метод. конф. – Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2015. Т. 1. С. 369-373.
16. Луценко А. Д. Основы военно-экономического обоснования стратегии развития системы вооружения радиоэлектронной борьбы ВС РФ: монография / А. Д. Луценко, В. А. Орлов, Д. М. Бывших. – Воронеж: ВУНЦ ВВС «ВВА», 2018. – 328 с.

PROBLEMS OF PHYSICAL AND MATHEMATICAL MODELING OF CONFLICT INTERACTION OF COMPLEX ERGATIC SYSTEMS OF SPECIAL PURPOSE

M. V. Pavlovsky

Military training and research center of the Air force "Air force Academy
named after Professor N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin", Voronezh

The article presents the results of the analysis of the developed scientific and methodological apparatus for the synthesis and coordination of complex ergatic systems of special purpose and carried out a formalized formulation of the problem to solve the whole complex of problems associated with the modeling of these systems.

Keywords: complex ergatic systems of special purpose, means and complexes of special purpose, technical and organizational-technical systems of special purpose, information and control systems.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСФОРМИРУЮЩИХСЯ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ ИЗ ПОСТОЯННЫХ МАГНИТОВ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ МИКРОЧАСТИЦАМИ

А. В. Пашковский, Н. Н. Мерзлова

Невинномысский технологический институт (филиал Северо-Кавказского
Федерального университета)
alecsandr_607@rambler.ru

Проведено моделирование структуры магнитной системы управления микро- частицами на основе постоянных магнитов для получения сфокусированного магнитного поля. Приведены результаты вычислительного эксперимента и сравнительные оценки эффективности современных программных сред на основе методов конечных элементов и стандартных элементов по расчету магнитного поля, создаваемого моделируемой системой.

Ключевые слова: метод стандартных элементов, численные методы, метод конечных элементов, полевые задачи, численное решение, ферромагнитное тело, потенциал.

1. Введение

В настоящее время использование микро- и наночастиц находит все более широкое применение в промышленных, военных, космических и медицинских технологиях. Адресная доставка магнитных частиц в заданные участки области осуществляется магнитными системами управления (МСУ) в которых могут быть использованы достаточно сильные, например, неодимовые магниты, а также электромагниты.

Факторами, осложняющими моделирование МСУ, являются:

1. Объем требуемых вычислений при необходимости изменить структуру МСУ:

– с одной стороны, моделирование должно реализовываться в реальном времени;

– с другой стороны, точный расчет требует значительных затрат времени.

2. Сложность решения задачи:

– с одной стороны, стремление максимально локализовать магнитное поле в заданной области;

– с другой стороны, сложная геометрия области.

3. Сложность технологии управления микро- частицами:

– с одной стороны, стремление к очень малым размерам частиц;

– с другой стороны, снижение мощности влияния магнитного поля на частицы при их малых размерах.

4. Требования безопасности:

– с одной стороны, стремление усилить магнитное поле для четкого управления;

– с другой стороны, соблюдение норм безопасности персонала и процесса воздействия полем.

В связи с этим в современной практике моделирования МСУ все чаще возникает необходимость:

- значительного повышения точности расчетов магнитных полей;
- многовариантных расчетов, связанных с трансформацией структуры МСУ;
- моделирования структуры МСУ в режиме реального времени;
- сохранения или незначительного увеличения требуемых вычислительных ресурсов для их решения.

2. Постановка задачи

Как отмечено в работах [1-5], существующие программные среды, основанные на использовании метода конечных элементов (МКЭ) (например, FEMM, Matlab, Maxwell и др.) зачастую не обеспечивают достаточную точность расчетов магнитных полей и силовых взаимодействий с микро- и наночастицами в условиях наличия в расчетных областях тонких включений, угловых точек с особенностями решения. Несомненно, что эти условия имеют место как в самой МСУ на постоянных магнитах в виде кубов или параллелепипедов (угловые точки магнитов, зазоры между ними), так и в расчетных областях, подвергаемых воздействию магнитного поля.

В такой ситуации для моделирования МСУ актуально использование метода стандартных элементов, использующего аналитические решения краевых задач в выделенных в расчетной области СЭ с характерной геометрией применяемых в МСУ постоянных магнитов. Это позволит значительно сократить степень разбиения расчетной области (по сравнению с МКЭ), размерность решаемой системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) и точность проводимых расчетов. Для введения таких СЭ необходимо получить в них аналитические представления решений краевых задач с учетом геометрии СЭ, граничных условий, а также определить связи на их границах между решением и нормальными производными, вынесенные на границу СЭ, в соответствии с методом стандартных элементов (МСЭ) [6, 7].

Результаты, приведенные в работах [1-3, 6, 7] подтверждают, что МСЭ эффективен и позволяет:

1. Сократить требуемые вычислительные ресурсы за счет покрытия расчетных областей СЭ и блоками СЭ.
2. Повысить гладкость решения в области за счет использования аналитических представлений решения в каждом СЭ.
3. Обеспечить высокую точность склейки нормальных производных решений на границах СЭ.
4. Получить блочно-ленточную структуру СЛАУ.
5. Учесть особенности решения во внутренних точках при сложной внутренней структуре расчетной области.

Первым шагом на пути применения МСЭ к моделированию МСУ является введение прямоугольных СЭ, моделирующих источник постоянного магнитного поля, получение аналитического решения краевых задач в них, а также связи с нормальной производной на их границах. Очевидно, что введение СЭ геометрически покрывающих источники магнитного поля в МСУ с прямоугольными постоянными магнитами позволит максимально заполнить область МСУ и окружающие МСУ расчетные области, минимизируя вычислительные затраты при одновременном росте точности расчетов.

3. Прямоугольные стандартные элементы как модель постоянного магнита

Рассмотрим плоскопараллельное магнитное поле в области Ω_1 магнитной системы из постоянных магнитов и внешней части Ω_0 (рис. 1), описываемое системой уравнений:

$$\Delta A = 0 \text{ в } \Omega_0; \quad (1)$$

$$\text{rot}_z \mathbf{B} / \mu_M - \Delta A_M = 0 \text{ в } \Omega_1. \quad (2)$$

На границе S_1 раздела сред выполняются условия:

$$\mathbf{B}_n^+ |_{S_1} = \mathbf{B}_n^- |_{S_1}; \quad \mathbf{H}_x^+ |_{S_1} = \mathbf{H}_x^- |_{S_1}, \quad (3)$$

где S_1 – граница области Ω_1 .

Считая, что постоянные магниты имеют $\mu_M = \text{const}$ и равномерную намагниченность, получим следующее уравнение плоскопараллельного магнитного поля в СЭ–«магнит»

$$1/\mu \Delta A = \Delta A_M. \quad (4)$$

Если вектор намагничивания не меняется по величине и направлению и, например, ориентирован вдоль оси Oy , то имеет место равенство

$$A_z(x, y) = -m_2 x + c. \quad (5)$$

При этом уравнение (4) приводится к виду:

$$1/\mu \Delta A = 0.$$

Из равенства (4) следует, что:

1. Производная $\partial A_M / \partial n$ отлична от нуля только на боковых частях магнита.
2. Постоянная m_2 выбирается с учётом значения вектора намагничивания M .

Таким образом, выражение нормальной производной векторного потенциала на боковой границе S_{12} СЭ–«магнит» через коэффициенты Фурье приближенного решения краевой задачи в принимает вид:

$$\begin{aligned} & 2/\sqrt{b_2 - b_1} \int_{G_{12}} \left(\left. \frac{\partial A^+}{\partial n} \right|_{S_2} - \left. \frac{\partial A_M^+}{\partial n} \right|_{S_2} \right) \sin(n\pi y / (b_2 - b_1)) dy = \\ & = F(cf_{10}, cf_1(k), cf_{20}, cf_2(k), cf_{30}, cf_3(k), cf_{40}, cf_4(k)). \end{aligned} \quad (6)$$

В таком случае условие склейки пары СЭ–«магнит» на общей боковой границе будет:

$$\begin{aligned}
& 2/\sqrt{b_2 - b_1} \int_{G_{21}} \left(\left. \frac{\partial A^+}{\partial n} \right|_{S_{21}} - \left. \frac{\partial A_M^+}{\partial n} \right|_{S_{21}} \right) \sin(n\pi y / (b_2 - b_1)) dy = \\
& = 2/\sqrt{b_2 - b_1} \int_{G_{12}} \left(\left. \frac{\partial A^+}{\partial n} \right|_{S_{12}} - \left. \frac{\partial A_M^+}{\partial n} \right|_{S_{12}} \right) \sin(n\pi y / (b_2 - b_1)) dy. \quad (7)
\end{aligned}$$

Аналогичные выкладки можно провести для СЭ-постоянный магнит с вектором намагниченности, параллельным горизонтальной оси.

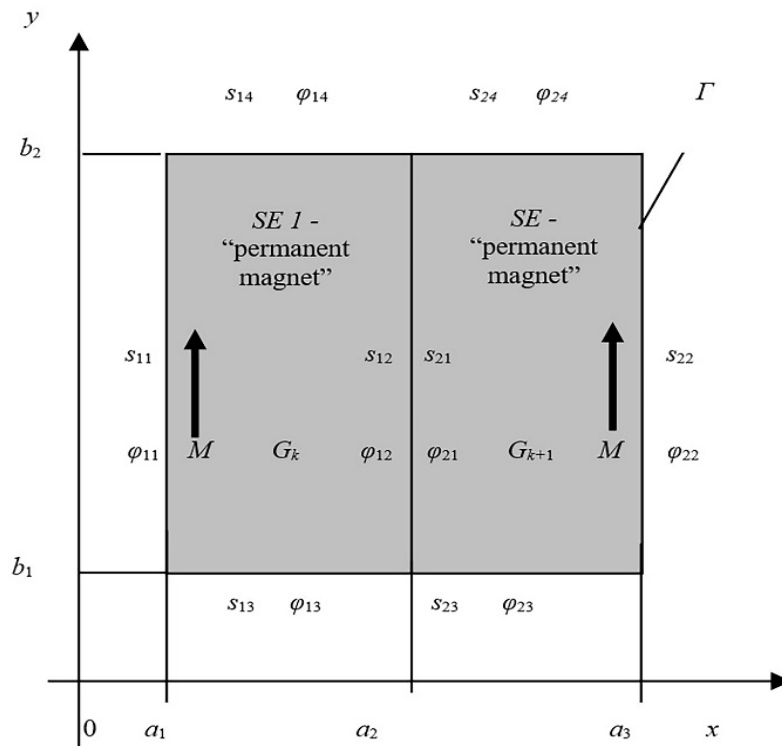


Рис. 1. Пара СЭ «магнит»-СЭ «магнит»

4. Применение МСЭ для расчета двумерного магнитного поля магнитной системы управления, содержащей постоянные магниты

Рассмотрим МСУ, состоящую из совокупности кубических постоянных магнитов с гранями размером 5х5 мм (рис. 2) класса N52 NbFeB с намагниченностью, равной $1,14 \cdot 10^6$ А/м, положенную в [8, 9] за основу для проведения тестовых вычислительных экспериментов.

Направления векторов намагниченности групп магнитов ортогональны и показаны на рис. 2 стрелками. Выбор направлений векторов намагниченности определен необходимостью минимизировать магнитную индукцию вне МСУ, за исключением области над поверхностью МСУ, используемой для управления микрочастицами.

Задача расчета магнитного поля МСУ рассматривается в двумерной постановке (1)-(3) при линейных характеристиках материалов. На внешней границе расчетной области выполняются условия Дирихле для векторного магнитного потенциала $A|_{\sigma} = 0$ (рис. 3).

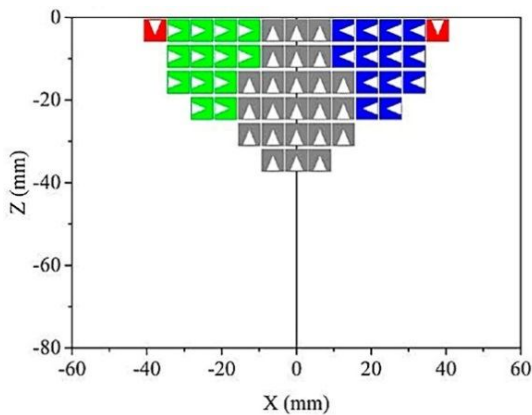


Рис. 2. Конструкция МСУ

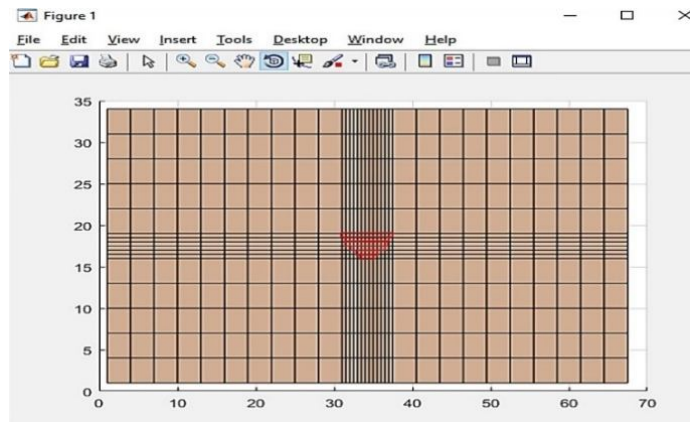


Рис. 3. Заполнение расчетной области 528 стандартными элементами

Для разбиения расчетной области, включая области постоянных магнитов, использованы 528 прямоугольных СЭ с условиями Дирихле на границах (рис. 3). При формировании СЛАУ «склейка» пары СЭ-постоянных магнитов производилась по формулам (7) и (8), в зависимости от направления векторов намагниченности.

Эффективность и точность МСЭ и МКЭ оценивалась при обычных степенях дискретизации расчетной области, возможной к реализации на ПК. Сравнение проводилось с вариантом расчета при очень высокой степени дискретизации области. Расчет МКЭ выполнялся с использованием пакетов: FEMM, PDE программной среды Matlab, ANSYS MAXWELL 16.

Относительная погрешность расчетов значений вектора магнитной индукции в 13 контрольных точках над поверхностью МСУ с использованием МСЭ и МКЭ сведены в таблицу.

Относительная погрешность расчетов значений индукции в контрольных точках

N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
δ_{FEMM} (%)	6,45	5,22	4,74	9,42	4,20	9,33	8,45	4,69	7,82	7,98	9,75	12,88	24,42
$\delta_{PDEtool}$ (%)	3,63	2,57	1,79	7,00	3,09	7,09	2,39	1,60	3,67	5,19	4,02	4,72	16,69
δ_{SEM} (%)	1,33	1,41	1,13	2,53	0,96	0,59	1,06	1,05	2,03	2,12	0,58	2,08	4,40

5. Заключение

Результаты вычислительного эксперимента позволяют сделать следующие выводы:

1. МСЭ за счет использования в прямоугольных СЭ точных решений (аналитических формул) краевых задач по сравнению FEMM обеспечил повышенную точность расчета потенциала магнитного поля при наличии особенностей в многочисленных угловых точках расчетной области.

2. Разработка математической модели пары «СЭ-магнит» и «СЭ-магнит», позволила использовать МСЭ без его комбинирования с МКЭ.

3. МСЭ обеспечил значительное сокращение временных затрат, требуемых для проведения моделирования.

4. МСЭ обеспечил повышенную точность расчета магнитного поля МСУ, что позволило учесть слабые магнитные поля.

Литература

1. Pashkovskiy A. V., Tkachev A. N., Bahvalov U. A. «New standard element types for magnetic field calculation in the electromechanical system». 2017 International Conference on Industrial Engineering, Applications and Manufacturing (ICIEAM), Saint Petersburg, Russia, 16-19 May 2017. doi: 10.1109/ICIEAM.2017.8076386.
2. Tkachev A. N., Pashkovskiy A. V., Burtceva O. A. Application of block elements method to calculate the electromechanical systems magnetic field and force characteristics. *Procedia Engineering*, 2015, vol. 129, pp. 288 – 293. doi: 10.1016/j.proeng.2015.12.064
3. А. В. Пашковский, В. И. Пашковский, «Блочные численно-аналитические методы и новые математические модели в расчете силовых взаимодействий наночастиц», Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. 2012 г. № 158. С. 39-44.
4. V. Pashkovsky, «Phans in the atomic and nano world, numerical-analytical method SEM in the calculation field of nanotechnology». – *Creative search scientists Israel today*. – Israel, Ashkelon, an international center of research and practice creation. – 2009, v. 13. – P.92-948.
5. А. В. Пашковский, «Численные и аналитические методы стандартных элементов для моделирования стационарных физических полей в линейных кусочно-однородных и нелинейных средах», Дис. д-р техн. наук: 05.13.18 / Александр Пашковский. - Новочеркасск, 2014, 364 С.
6. N. N. Merzlova, A. V. Pashkovskiy, D. V. Boldyrev; «Simulation of transforming magnetic systems based on permanent magnets to control microparticles». 2019 International Conference on Industrial Engineering (ICIE), Sochi, Russia, «Lecture Notes in Mechanical Engineering». doi: 10.1007/978-3-030-22063-1.
7. A. V. Pashkovskiy, A. N. Tkachev and U. A. Bahvalov, «New Standard Elements for Calculating Magnetic Fields of Electromechanical and Magnetic Systems with Permanent Magnets», 2018 International Conference on Industrial Engineering, Applications and Manufacturing (ICIEAM), Moscow, Russia, 2018, pp. 1-5. doi: 10.1109/ICIEAM.2018.8728739.
8. Barnsley L., Carugo D., Stride E. (2016) Optimized shapes of magnetic arrays for drug targeting applications. *Journal of Physics D Applied Physics* 49(22). doi: 10.1088/0022-3727/49/22/225501
9. Sarwar A., Nemirovski A., Shapiro B. (2012). Optimal Halbach permanent magnet designs for maximally pulling and pushing nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 324 (5), pp 742–754. doi: 10.1016/j.jmmm.2011.09.008

MODELING OF TRANSFORMING MAGNETIC SYSTEMS FROM PERMANENT MAGNETS FOR CONTROL OF MICROPARTICLES

A. V. Pashkovskiy, N. N. Merzlova

Nevinnomyssk Institute of Technology (branch of the North Caucasus Federal University)

A simulation of the magnetic control system structure of microparticles based on permanent magnets was carried out. Computational experiment results for magnetic field calculation created by the simulated system are presented. Comparative estimates of modern software environments accuracy based on the finite element method and the SEM software package based on the standard element method are obtained.

Keywords: metod of standart elements, regional field problems, numerical decision, the ferromagnetic body, potential.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОТВЕРСТИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ АЛЮМИНИЯ В ПРОЦЕССАХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО АНОДИРОВАНИЯ

Е. Д. Рябков, И. В. Кирин, Н. К. Зайцев, А. П. Антропов

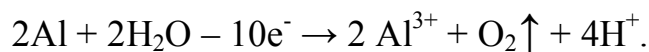
МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких
химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва
yegordryabkov@gmail.com

Исследованы условия получения наноразмерных отверстий методом высоковольтного анодирования алюминиевых пластин. Морфология поверхности образцов изучена методом сканирующей электронной микроскопии. Выявлены зависимости таких параметров как диаметр и глубина отверстий от условий технологических параметров - времени экспозиции, напряжения, подаваемого в электрохимическую ячейку, концентрации электролита, состава фонового электролита. Составлена прогностическая модель, позволяющая получать образцы с заданными свойствами.

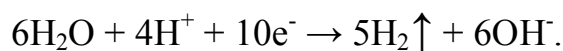
Ключевые слова: наноперфорирование алюминия, анодирование, сканирующая электронная микроскопия.

Впервые возможность образования регулярных наноразмерных отверстий на поверхности алюминия при анодировании была показана в начале 1980-х годов. При наложении на алюминиевый электрод анодного напряжения сначала формируется компактная оксидная пленка, наружная часть которой в электролитах, растворяющих оксид, начинает растворяться в дефектных местах и переходить в пористое покрытие. Дальнейший рост анодно-оксидного покрытия происходит на дне образовавшихся пор за счет превращения все более глубоких слоев металла в оксид. Прилегающий к металлу барьерный слой, состоит из беспористых ячеек (рис. 1). Ячейки пористого слоя имеют в середине одну пору. Диаметр пор и их число зависят от природы электролита и режима анодирования.

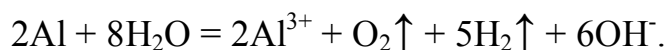
При электрохимическом анодировании алюминия реакция на аноде имеет вид:



На катоде:



Суммарное уравнение реакции, протекающей в электрохимической ячейке:



Существует множество публикаций посвященных теме электрохимического наноперфорирования алюминия, в которых этот процесс описан достаточно полно. В статье Tatsuya Masuda и др. описывается процесс электрохими-

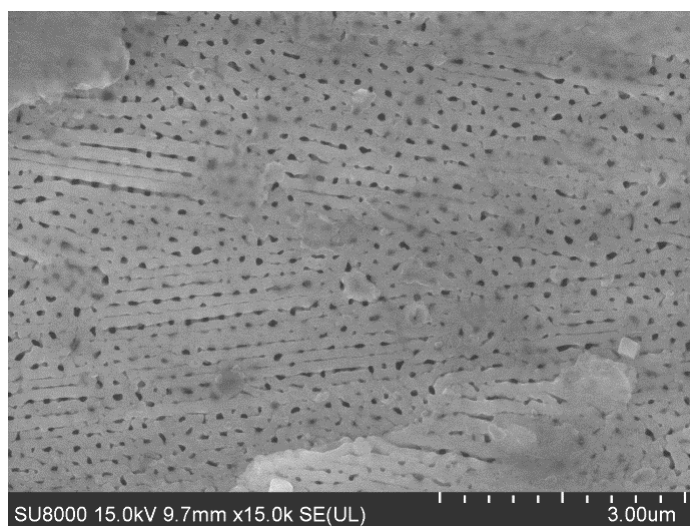


Рис. 1. Снимок СЭМ поверхности алюминиевого образца, полученного при анодировании ($t_{\text{анод}} = 15$ мин, $T_{\text{эл-та}} = 21^\circ\text{C}$, $U = 90$ В, $C_{\text{фон}} = 0,3$ М H_3PO_4)

ческого наноперфорирования алюминия в растворах фосфорной и щавелевой кислот, полученные мембраны из оксида алюминия с регулярными гексагональными наноразмерными отверстиями сравниваются между собой [1]. В статье Daiki Nakajima и др. описываются подробности процесса анодирования алюминия в растворах глутаровой кислоты и её производных [2]. В работе Akimasa Takenaga и др. сравниваются структурные различия получаемых покрытий на анодированном алюминии [3]. В этих и еще множестве других подобных работ [4-6] описываются параметры анодирования для получения наноразмерных отверстий различных размеров и с различной регулярностью. Однако отсутствует полноценное моделирование условий технологического процесса, которое позволило бы целенаправленно создавать наноперфорированные матрицы с определенными заданными параметрами для дальнейшего использования, например, в качестве шаблонов в методе реплик.

В настоящей работе приводятся обобщающие функциональные зависимости, построенные в результате изучения большого числа экспериментальных серий образцов, полученных при варьировании таких ключевых параметров процесса, как время экспозиции, напряжение, подаваемое в электрохимическую ячейку, концентрация и состав фонового электролита.

На зависимости среднего диаметра образующихся отверстий от подаваемого напряжения и времени экспозиции хорошо видно, что при увеличении данных параметров происходит увеличение среднего диаметра отверстий (рис. 2). Причем важно отметить, что увеличение среднего диаметра отверстий при увеличении напряжения хорошо описывается линейной зависимостью, в то время как увеличение среднего диаметра отверстий при увеличении времени анодирования хорошо описывается уже логарифмической функцией. Это объясняется тем, что в начале процесса происходит активный рост отверстий, как в ширину, так и в глубину, когда достигается предельный размер отверстий для данного напряжения, дальнейший рост происходит только в глубину.

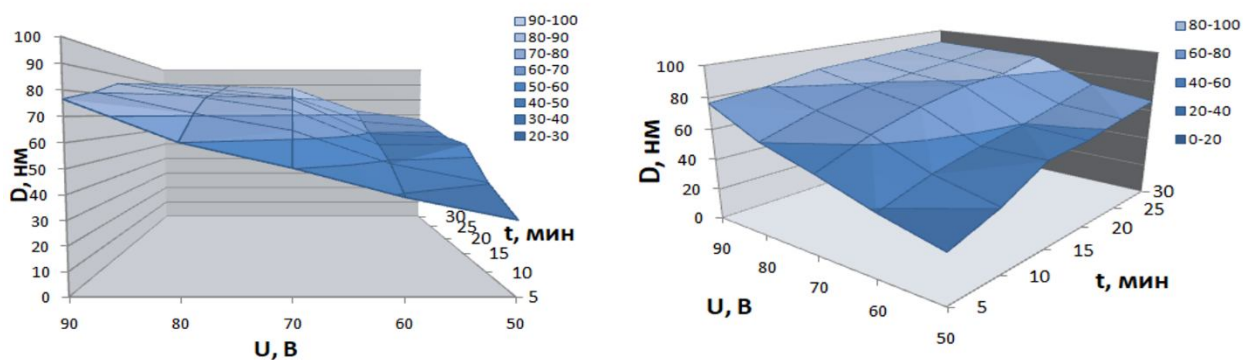


Рис. 2. Зависимость среднего диаметра отверстий, образующихся на поверхности алюминия в процессе анодирования, от напряжения U и времени анодирования t ($T_{\text{эл-та}} = 21^\circ\text{C}$, $C_{\text{фон}} = 0,3 \text{ M H}_3\text{PO}_4$)

Интересно, что для каждого типа фонового электролита существует определенный диапазон значений средних диаметров отверстий и плотностей их расположения на поверхности, которые определяются именно природой электролита, в первую очередь силой кислоты. Например, для электролита на базе ортофосфорной кислоты диапазон значений средних диаметров отверстий составляет 40 – 300 нм (рис. 3). Для щавелевой кислоты такой диапазон будет 10 – 90 нм, а для серной кислоты 4 – 15 нм.

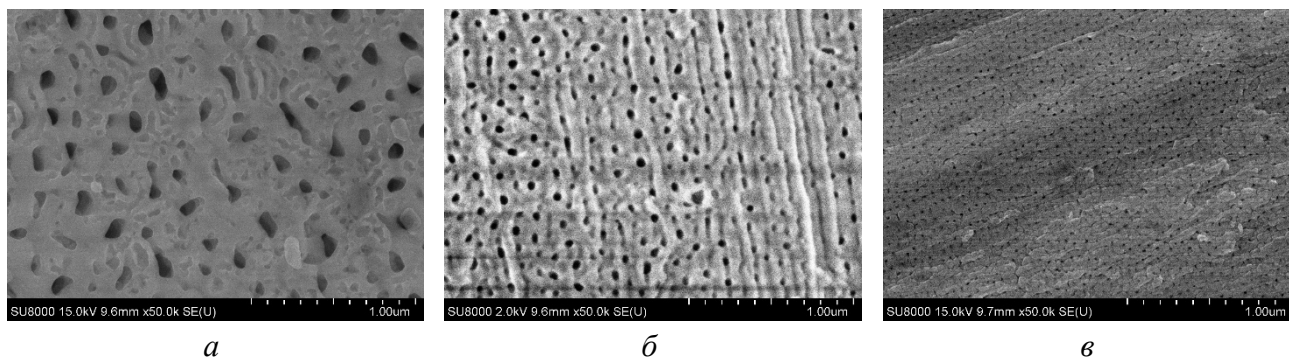


Рис. 3. Снимки СЭМ поверхностей образцов алюминия, полученных при анодировании в электролитах $0,3 \text{ M H}_3\text{PO}_4$ (а), $0,3 \text{ M C}_2\text{H}_2\text{O}_4$ (б), $0,2 \text{ M H}_2\text{SO}_4$ (в)

Таким образом, в настоящей работе впервые описывается часть созданной модели процесса наноперфорирования алюминия, получаемого методом высоковольтного анодирования. Данную модель в дальнейшем планируется использовать при производстве наноструктурированных материалов с заданными параметрами методом репликации.

Литература

1. Daiki Nakajima, Tatsuya Kikuchi, Shungo Natsui, Ryosuke O. Suzuki. Growth behavior of anodic oxide formed by aluminum anodizing in glutaric and its derivative acid electrolytes // Applied Surface Science. Vol. 321. 2014. pp. 364–370.

2. Tatsuya Masuda, Hidetaka Asoh, Satoshi Haraguchi, Sachiko Ono. Fabrication and Characterization of Single Phase α -Alumina Membranes with Tunable Pore Diameters // *Materials*. 2015. Vol. 8. pp. 1350-1368.
3. Akimasa Takenaga, Tatsuya Kikuchi, Shungo Natsui, and Ryosuke O. Suzuki. Self-Ordered Aluminum Anodizing in Phosphonoacetic Acid and Its Structural Coloration // *ECS Solid State Letters*. № 4 (8). 2015. pp. 55-58.
4. Josep Ferré-Borrull, Josep Pallarès, Gerard Macías, Lluís F. Marsal. Nanostructural Engineering of Nanoporous Anodic Alumina for Biosensing Applications // *Materials*. 2014. Vol. 7. pp. 5225-5253. DOI:10.3390/ma7075225.
5. Victor Vega, Javier García, Josep M. Montero Moreno, Blanca Hernando, Julien Bachmann, Victor M. Prida, Kornelius Nielsch. Unveiling the Hard Anodization Regime of Aluminum: an Insight into the Nanopores Self-organization and Growth Mechanism // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2015. DOI: 10.1021/acsami.5b10712.
6. G. D. Sulka, S. Stroobants, V. Moshchalkov, G. Borghs, J.-P. Celis. Synthesis of Well-Ordered Nanopores by Anodizing Aluminum Foils in Sulfuric Acid // *J. Electrochem. Soc.* 2002. Vol. 149, Issue 7, pp. D97-D103. DOI: 10.1149/1.1481527

MODELING OF FORMATION OF NANOSCALE HOLES ON THE SURFACE OF ALUMINUM IN THE ELECTROCHEMICAL ANODIZING PROCESS

Y. D. Ryabkov, I. V. Kirin, N. K. Zaitsev, A. P. Antropov

MIREA - Russian Technological University, Institute of Fine Chemical Technologies named after M. V. Lomonosov, Moscow

The conditions for producing nanoscale holes by the method of high-voltage anodizing of aluminum plates was investigated. The samples surface morphology was studied by scanning electron microscopy. The dependences of such parameters as the diameter and depth of the holes on the conditions of the technological parameters, namely exposure time, voltage supplied to the electrochemical cell, electrolyte concentration, background electrolyte composition, were determined. A prognostic model has been proposed, allowing one to obtain samples with desired properties.

Keywords: nanoetching of aluminum, anodizing, scanning electron microscopy.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ N-ОКТИЛЛЮМИНОЛА ГИПОХЛОРИТ-ИОНОМ

Т. В. Янькова, П. В. Мельников, В. И. Шишкин, Н. К. Зайцев

МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких
химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва
yankovatatyana@yandex.ru

Уточнен механизм взаимодействия N-октиллюминола с гипохлорит-ионом и установлена его схема. Вычислены константы скоростей всех стадий хемилюминесцентной реакции N-октиллюминола, и с их помощью проведено моделирование кинетических зависимостей разных стадий данного процесса. Благодаря созданной модели удалось объяснить отклонение наблюдаемых кинетических кривых в системе на основе N-октиллюминола от зависимостей в классической хемилюминесцентной реакции.

Ключевые слова: хемилюминесценция, кинетическая зависимость, константа скорости.

Хемилюминесцентные методы анализа характеризуются высокой чувствительностью и широким динамическим диапазоном измерения интенсивности свечения за счет отсутствия возбуждающего источника света [1]. Другими неоспоримыми преимуществами являются их исключительная специфичность, высокое значение отношения сигнал/шум, умеренная стоимость аппаратуры и особая чувствительность к биологическим объектам. Именно поэтому хемилюминесцентные системы активно используются в аналитической химии [2]. Изучение кинетики этих реакций позволяет не только определить механизм, но и улучшить методики определения различных веществ, основанные на данной реакции. В настоящей работе мы исследовали хемилюминесцентную реакцию окисления N-октиллюминола гипохлорит-ионом [3]. Данная система имеет большой потенциал за счет способности самоорганизовываться в мицеллы, увеличивая локальную концентрацию реагентов, но при этом обладает необычной кинетической зависимостью.

Экспериментальные кинетические кривые для хемилюминесцентной реакции N-октиллюминола с гипохлорит-ионом (рис. 1) схожи в первый момент после смешения реагентов и по прошествии 5 часов. Однако в этом интервале с течением времени наблюдается появление второго максимума на кинетической кривой, который позже исчезает. По всей видимости, в хемилюминесцентной реакции окисления N-октиллюминола гипохлорит-ионом реализуется более сложный механизм, чем в случае реакции незамещенного люминола [4], и для его установления необходимо провести тщательный анализ кинетических кривых рассматриваемой системы.

На кинетической кривой условно можно выделить 2 области (рис. 1). Область I соответствует расходованию количества N-октиллюминола, находяще-

гося в смеси в момент введения инициатора (начало хемилюминесцентной реакции). Существование области II, по-видимому, обусловлено наличием некоего обратимого медленно устанавливающегося равновесия N-октиллюминола с его неактивной формой, которая непосредственно в хемилюминесцентную реакцию не вступает.

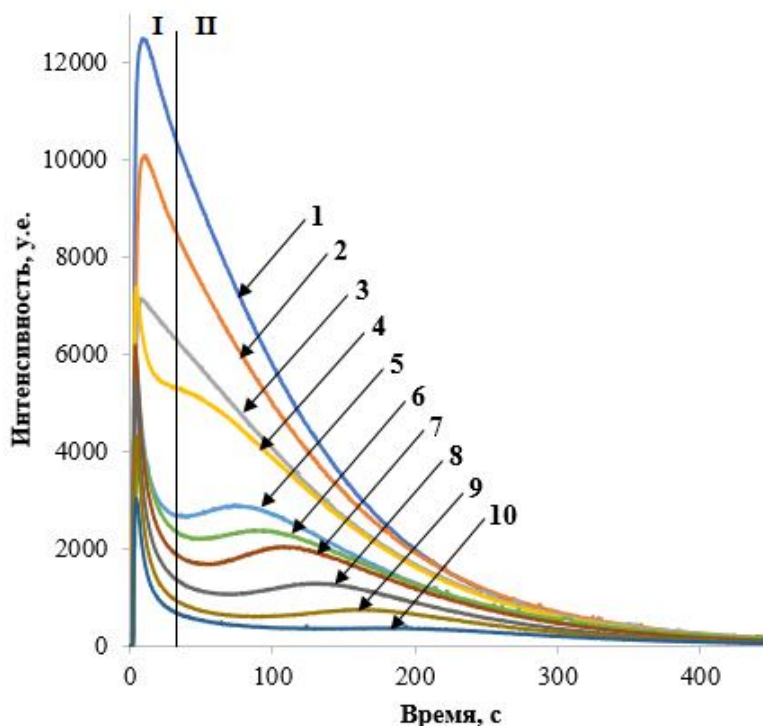
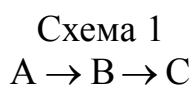


Рис. 1. Экспериментальные кинетические зависимости хемилюминесцентной реакции N-октиллюминола с гипохлорит-ионом, полученные через разные промежутки времени от смешения реагентов: (1) 3; (2) 26; (3) 57; (4) 85; (5) 117; (6) 146; (7) 207; (8) 239; (9) 266; (10) 296 мин

Форма кинетической зависимости области I качественно соответствует появлению и гибели промежуточного продукта в последовательной реакции типа:



Здесь A – активная форма моноаниона N-октиллюминола; B – окисленная форма аниона N-октиллюминола; C – возбужденная молекула N-октиламинофталевой кислоты.

Моделирование проводили двухэкспоненциальным приближением [5], рассчитывая константы скорости k_1 и k_2 итерационным способом:

$$I(t) = A[\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)]. \quad (1)$$

Пример зависимости представлен на рис. 2. Видно, что в области I модельная кривая хорошо совпадает с экспериментальной кинетической зависимостью. Так как измерения проводились при фиксированной температуре (25 °C), кон-

станты скорости k_1 и k_2 неизменны для каждой кривой (рис. 1), изменяется лишь коэффициент A , содержащий концентрацию вещества А в момент начала хемиллюминесцентной реакции $C_{0,A}$:

$$A = C_{0,A} \frac{k_1}{k_1 + k_2}. \quad (2)$$

Кинетическую зависимость области II невозможно представить в аналитическом виде, поскольку механизм реакции до конца неизвестен. Она была определена вычитанием модельной кинетической кривой области I из суммарной экспериментальной (рис. 2).

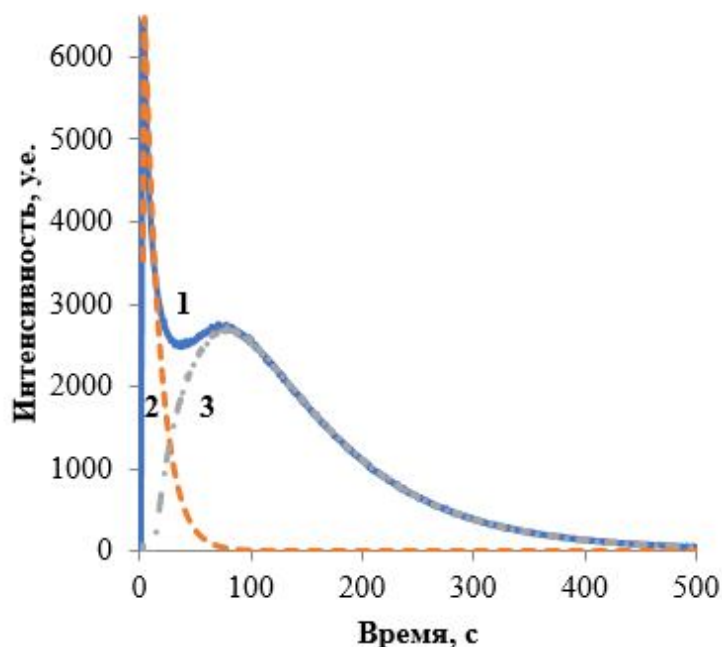
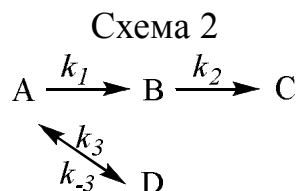


Рис. 2. Суммарная экспериментальная кинетическая зависимость (1), кинетические зависимости области I (2) и II (3)

Площадь модельной кривой области I соответствует интегральной интенсивности I_1 и характеризует количество активной формы N-октиллюминола (А) в начале реакции. На рис. 3 видно, что начиная от момента смешения реагентов, концентрация вещества А уменьшается, но затем выходит на плато. Такая кинетическая зависимость характерна для обратимых реакций, поэтому мы дополнили схему 1 стадией 3 с константами прямой и обратной реакций k_3 и k_{-3} :



Здесь D – неактивная форма моноаниона N-октиллюминола.

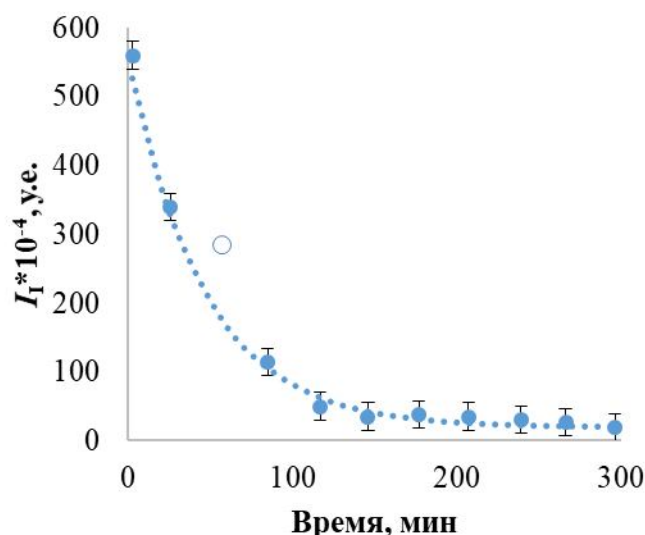


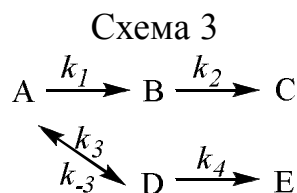
Рис. 3. Зависимость интегральной интенсивности I_I области I от времени с момента смешения реагентов и ее модельная кривая

Из рис. 3 видно, что равновесие $A \leftrightarrow D$ сильно смещено в сторону вещества D. Константы скорости k_3 и k_{-3} определяли по формуле для обратимых реакций [5]:

$$\ln \frac{y_e}{y_e - y} = (k_3 + k_{-3})t, \quad (3)$$

где y – степень превращения; y_e – равновесная степень превращения. Модельная кривая зависимости интегральной интенсивности I_I от времени с найденными значениями констант k_3 и k_{-3} хорошо совпадает с экспериментальными данными (рис. 3).

Зависимость концентрации N-октиллюминола $C_{\text{сумм.}}$ (сумма форм A и D) от времени можно разделить на две части: первая соответствует реакции первого порядка и спрямляется в логарифмических координатах (рис. 4а), а вторая отвечает реакции нулевого порядка (рис. 4б). Смена наблюдаемого порядка очевидно вызвана сменой лимитирующей стадии процесса. В первые ~120 минут устанавливается равновесие $A \leftrightarrow D$, далее равновесная концентрация вещества A практически не меняется (рис. 3), но $C_{\text{сумм.}}$ на плато не выходит (рис. 4б), что неизбежно свидетельствует о присутствии еще одной стадии процесса – переходе вещества D в некую «связанную» форму N-октиллюминола, не участвующую в хемиллюминесцентной реакции. Итоговая схема процесса выглядит следующим образом:



Здесь E – «связанная» форма N-октиллюминола.

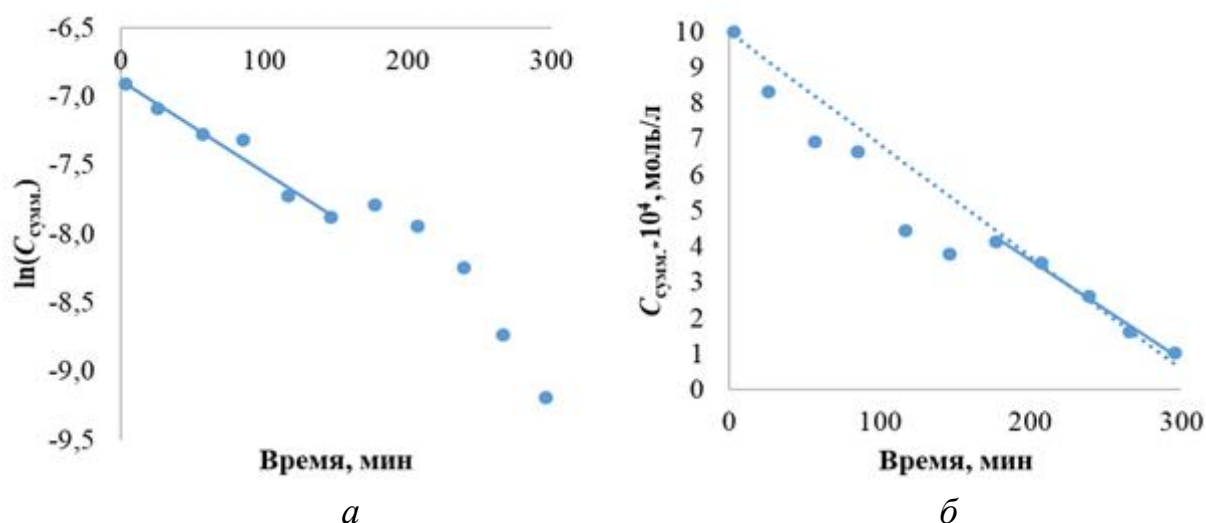


Рис. 4. Зависимость концентрации N-октиллюминола $C_{\text{сумм}}$ от времени с момента смешения реагентов в логарифмических (а) и линейных (б) координатах

Вычислить константу скорости k_4 можно по формуле для реакции нулевого порядка [5]:

$$C_A = C_{0A} - k_4 t. \quad (4)$$

Модельная зависимость концентрации N-октиллюминола от времени совпадает с экспериментальной зависимостью на участке с установившимся равновесием $A \leftrightarrow D$ (рис. 4).

Итоговые кинетические уравнения для данной системы выглядят следующим образом:

$$\Delta A = A_0 + (-k_1[B] - k_3[D] + k_{-3}[D])\Delta\tau,$$

$$\Delta B = B_0 + (k_1[A] - k_2[C])\Delta\tau,$$

$$\Delta C = C_0 + k_2[B]\Delta\tau,$$

$$\Delta D = D_0 + (k_3[A] - k_{-3}[A] - k_4[E])\Delta\tau,$$

$$\Delta E = E_0 + k_4[D]\Delta\tau.$$

Найденные константы скоростей стадий представлены в таблице.

Рассчитанные константы скорости для хемилюминесцентной реакции окисления N-октиллюминола гипохлорит-ионом

k_1 , 1/мин	k_2 , 1/мин	k_3 , 1/мин	k_{-3} , 1/мин	k_4 , моль/л·мин
5,62	135,43	$2,09 \cdot 10^{-2}$	$7,45 \cdot 10^{-4}$	$3,14 \cdot 10^{-6}$

Таким образом, уточнен механизм взаимодействия N-октиллюминола с гипохлорит-ионом и установлена его схема (схема 3). N-октиллюминол участ-

вует не только в прямой реакции окисления ($A \rightarrow B \rightarrow C$), он находится в равновесии со своей неактивной формой ($A \leftrightarrow D$). Данное равновесие сильно смещено в сторону вещества D, и именно его наличие обуславливает возникновение второго пика на кинетической кривой хемилюминесцентной реакции N-октиллюминола (рис. 1). Понижение общей концентрации N-октиллюминола вызвано переходом вещества D в «связанную» форму N-октиллюминола E. Особенно заметной эта стадия становится при максимальной концентрации вещества D (когда равновесие $A \leftrightarrow D$ уже установлено).

Работа выполнена при поддержке образовательной программой профессиональной переподготовки «Химические технологии в нанoeлектронике».

Литература

1. Siraj N., El-Zahab B., Hamdan S., et al. Fluorescence, Phosphorescence, and Chemiluminescence / Anal. Chem. 2016. V. 881. Pp. 170-202.
2. Jimenez A. M., Navas M. J. Chemiluminescence Methods (Present and Future) // Grasas y Aceites. 2002. V. 53. Pp. 64-75.
3. Янькова Т. В., Мельников П. В., Зайцев Н. К. Хемилюминесцентные реакции люминола и N-октиллюминола с гипохлоритом в анионных поверхностно-активных веществах // Вестн. моск. ун-та. сер. 2. Химия. 2019. Т. 60. № 3. С. 20.
4. Янькова Т. В., Мельников П. В., Яштулов Н. А., Зайцев Н. К. Хемилюминесцентные реакции люминола и N-октиллюминола с гипохлоритом в неионогенных поверхностно-активных веществах // Тонкие Химические Технологии. 2019. Т. 14. № 3. С. 90.
5. Романовский Б. В. Основы химической кинетики. М.: Экзамен, 2006. 415 с.

MODELING OF KINETIC DEPENDENCES OF THE CHEMILUMINESCENT REACTION OF N-OCTILLUMINOL OXIDATION BY HYPOCHLORITE-ION

T. V. Yankova, P. V. Melnikov, V. I. Shishkin, N. K. Zaytsev

MIREA - Russian Technological University, Institute of Fine Chemical Technologies named after M. V. Lomonosov, Moscow

The mechanism of the interaction of N-octilluminol with a hypochlorite ion has been clarified and its scheme has been established. The rate constants of all stages of the chemiluminescent reaction of N-octyluminol are calculated, and the kinetic dependences of different stages of this process are simulated. The created model is possible to explain the deviation of the observed kinetic curves in the system based on N-octiluminol from the dependences in the classical chemiluminescent reaction.

Keywords: chemiluminescence, luminol, kinetic dependence, rate constant, kinetic curve modeling.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОМАГНИЧИВАНИЯ ВОДОНЕФТЯНОЙ ЭМУЛЬСИИ НАНОЧАСТИЦАМИ МАГНЕТИТА

Ю. Г. Смирнов, И. В. Ивенина

Ухтинский государственный технический университет
ysmirnov@ugtu.net

Выполнено теоретическое рассмотрение процесса омагничивания капель водонефтяной эмульсии наночастицами магнетита. Численные расчеты продемонстрировали влияние размеров эмульсионных капель и времени предварительного отстоя смеси нефтяной эмульсии с магнитными наночастицами перед началом процесса магнитной очистки на эффективность процесса.

Ключевые слова: моделирование, численные расчеты, водонефтяная эмульсия, наночастицы магнетита.

Введение

В ходе экспериментальных исследований в публикациях [1-4] был описан способ извлечения эмульгированной нефти в магнитном поле из загрязненной воды после обработки водонефтяной эмульсии наночастицами магнетита Fe_3O_4 . Обладая высокой удельной поверхностной энергией, эти частицы агрегируются на границе раздела фаз вода-нефть, то есть на поверхности эмульсионных капель. Направленно двигаясь в неоднородном магнитном поле, создаваемом в сепараторе, частицы магнетита увлекают за собой эмульгированную нефть. Собранный таким образом нефть легко отделяется от жидкой фазы, чем и достигается очистка воды.

Процесс агрегации твердых наночастиц на поверхности капель дисперсной фазы эмульсии растянут во времени и зависит от многих факторов, в частности, от температуры, химического состава нефти, размера и концентрации твердых частиц магнетита. В поставленной серии экспериментов было установлено оптимальное соотношение между количеством магнетита и степенью загрязнения воды. Ориентиром служило достижение такого содержания нефти после очистки, которое не превысило бы норм ПДК для воды рыбохозяйственных водоемов. Параллельно была проведена серия опытов, позволившая установить зависимость эффективности разделения водонефтяной эмульсии от времени контакта между магнетитом и загрязненной водой.

В ходе экспериментальной работы [5] были проведены исследования по очистке воды, загрязненной нефтью Ярегского месторождения. Эксперимент показал необходимость обеспечения более длительного контакта магнетита с водонефтяной эмульсией для увеличения эффективности метода. Это обстоятельство может быть объяснено с учетом того, что передвижение наночастиц магнетита обусловлено броуновским движением. Следовательно, необходимо

некоторое время для продвижения частиц магнетита к нефтяным каплям. Процесс может быть ускорен интенсивным перемешиванием. Кроме того, сам процесс образования связей на поверхности капель нефти за счет когезионных сил требует определенного времени.

При длительном отстаивании магнетит оседает, объединяясь в более крупные агрегаты и увлекает за собой потерявшую стабильность нефтяную фазу эмульсии. Таким образом, седиментационные явления могут быть объединены с действием магнитного поля, что увеличит скорость разделения.

В выше упомянутом исследовании время выдержки соответствовало суткам. При этом органолептические свойства воды заметно улучшались, а именно, исчезал запах нефти, вода приобретала заметную прозрачность. В промышленных условиях, по-видимому, столько времени не потребуется. Предположительно, скорость агрегации может быть увеличена за счет увеличения температуры процесса и интенсивного перемешивания.

Целью настоящей работы является теоретическое рассмотрение и численные оценки необходимого времени отстоя смеси нефтяной эмульсии с магнитными наночастицами перед началом процесса магнитной очистки.

Математическая модель процесса

Будем считать, что в сосуде объемом V находится загрязненная водонефтяной эмульсией жидкость с плотностью ρ_l , содержащая эмульсионные капли радиуса R_b , с удельной плотностью ρ_b , и массовой концентрацией ϕ_b .

Предположим также, что там же находятся во взвешенном состоянии наночастицы магнетита радиуса R_a , с удельной плотностью ρ_a , и массовой концентрацией ϕ_a . Их коэффициент диффузии пусть будет D .

Размер и масса наночастиц значительно меньше размеров и массы капелек эмульсии. Поэтому можно считать, что двигаться в результате броуновского движения будут только наночастицы, а значительно более крупные по сравнению с наночастицами капли эмульсии будут практически неподвижны.

В вязкой среде движение частиц описывается законом Стокса:

$$\vec{F}_a = 6\pi\eta_a R_a \vec{v}_a, \quad (1)$$

где \vec{F}_a – движущая сила, \vec{v}_a – относительная скорость частицы по отношению к жидкости, η_a – коэффициент вязкости.

С течением времени наночастицы магнетита, совершая беспорядочное броуновское движение в жидкости, в процессе диффузии достигнут эмульсионных капель и адсорбируются на их поверхности. Капли с налипшими на них наночастицами магнетита станут тяжелее воды и начнут медленно смещаться ко дну сосуда под влиянием силы гравитации. Скорость смещения определяется соотношением:

$$v_p = \frac{2R_b^2 g(\rho_p - \rho_l)}{9\eta_p}, \quad (2)$$

где η_p – коэффициент вязкости эмульсии, g – ускорение свободного падения. Время осаждения эмульсионных капель с адсорбированными наночастицами магнетита будет $\tau_p = h/v_p$, где h – высота сосуда.

Оценим среднее расстояние между эмульсионными каплями. Будем считать, что эмульсионные капли имеют сферическую форму и равномерно распределены в объеме жидкости. Масса эмульсионной частицы m_b может быть определена по формуле

$$m_b = \frac{4}{3} \pi R_b^3 \rho_b. \quad (3)$$

Число эмульсионных капель массой m_b в объеме жидкости V будет равно

$$N_b = \frac{V \rho_l \phi_b}{m_b}. \quad (4)$$

Разобьем объем V на N_b элементарных объемов в виде кубиков со стороной L_b . Очевидно, что объем элементарного кубика будет равен

$$L_b^3 = \frac{V}{N_b}. \quad (5)$$

С учетом (4) из (5) получим

$$L_b^3 = \frac{m_b}{\rho_l \phi_b}. \quad (6)$$

Подставим (3) в (6). Получим

$$L_b = \sqrt[3]{\frac{4\pi\rho_b}{3\rho_l\phi_b}} R_b. \quad (7)$$

Максимальное расстояние L_a , которое должна преодолеть наночастица, чтобы достигнуть расположенной в центре элементарного кубика эмульсионной частицы, очевидно, будет равна половине диагонали этого кубика

$$L_a = \frac{\sqrt{3}}{2} L_b. \quad (8)$$

С другой стороны, диффузионная длина L_a , на которую смещается наночастица за интервал времени t при броуновском движении может быть определена из известной формулы [6]

$$L_a^2 = 6Dt.$$

Здесь D – коэффициент диффузии. Отсюда ожидаемый интервал времени, в течение которого наночастица магнетита в результате броуновского движения достигнет поверхности эмульсионной капли, будет определяться соотношением

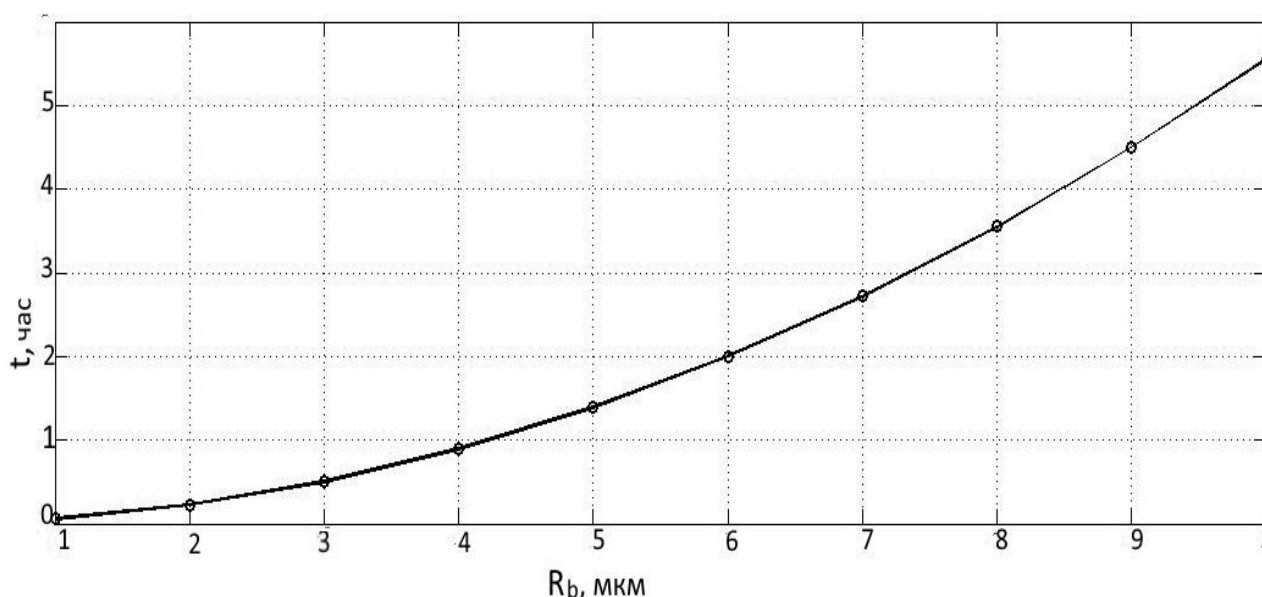
$$t = \frac{L_a^2}{6D}. \quad (9)$$

Результаты и обсуждение

Для выполнения численных расчетов примем коэффициент диффузии в загрязненной нефтью воде равным $D = 5,56 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$ [7]. Для плотности наночастиц и эмульсий ярегской нефти возьмем значения: $\rho_a = 5180 \text{ кг/м}^3$, $\rho_b = 1,017 \text{ кг/м}^3$ [8]. Примем для наночастиц $R_a = 10 \text{ нм}$.

Будем выполнять расчеты для эмульсионных капель с радиусами R_b , меняющимися в диапазоне от 0,5 до 10 мкм. Будем считать, что степень нефтяного загрязнения жидкости составляет 10 мг/л, что соответствует $\phi_b = 10^{-5}$. Положим также $\phi_a = \phi_b$.

В указанных предположениях численные расчеты по вышеприведенным формулам выполнялись в рамках пакета MatLab. Полученные результаты приведены на рисунке.



Зависимость ожидаемого интервала времени, в течение которого наночастица магнетита в результате броуновского движения достигнет поверхности эмульсионной капли, от размера этой капли

Полученные результаты позволяют сделать следующее заключение.

1. Увеличение временного промежутка между добавлением частиц Fe_3O_4 в загрязненную воду и поступлением ее в магнитный сепаратор для очистки позволит значительно увеличить эффективность разделения водонефтяной эмульсии.

2. Для сокращения времени предварительного отстоя смеси загрязненной нефтью жидкости и магнитных наночастиц следует осуществлять ее предварительное диспергирование для уменьшения размеров эмульсионных капель и увеличения их числа.

Литература

1. 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.

2. Смирнов Ю. Г. Математическое моделирование процесса очистки сточных вод от нефти с использованием магнитных наночастиц // Известия Коми научного центра Уро РАН, 2012, №2(10). С.104-107.

3. Лютоев А. А., Смирнов Ю. Г. Разработка технологической схемы очистки сточных вод от нефтяных загрязнений с использованием магнитных наночастиц // Нефтегазовое дело: электрон. науч. журн. 2013. №4. С. 424-435. URL: http://www.ogbus.ru/authors/LyutoevAA/LyutoevAA_1.pdf.

4. 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.

5. Ивенина И. В., Смирнов Ю. Г., Лютоев А. А. Исследование эффективности очистки загрязненной нефтью воды от продолжительности контакта водонефтяной эмульсии с магнетитом // Проблемы геологии, разработки и эксплуатации месторождений и транспорта трудноизвлекаемых запасов углеводородов: матер. всеросс. научно-техн. конф. (с междунар. участием) (1-2 ноября 2018г.).– Ухта: УГТУ, 2019. С. 248 -251.

6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учебное пособие. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. 3-е изд., перераб. – М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1986. 736 с.

7. Auterrieth T., Robert A., Wagner J., Grubel G. The dynamic behavior of magnetic colloids in suspension // J. Appl. Cryst. 2007. V.40 (Supplement). P. 250-253. URL: <http://journals.iucr.org/j/issues/2007/s1/00/cj6004/>.

8. Ланина Т. Д., Литвиненко В. И., Варфоломеев Б. Г. Процессы переработки пластовых вод месторождений углеводородов: монография. Ухта: УГТУ, 2006. 172 с.

MODELING THE MAGNETIZATION PROCESS OF A WATER-OIL EMULSION BY MAGNETITE NANOPARTICLES

Yu. G. Smirnov, I. V. Ivenina

Ukhta State Technical University

A theoretical review of the process of magnetizing droplets of a water-in-oil emulsion with magnetite nanoparticles has been performed. Numerical calculations have demonstrated the effect of the size of emulsion droplets and the preliminary settling time of a mixture of oil emulsion with magnetic nanoparticles before starting the magnetic cleaning process on the efficiency of the process.

Keywords: modeling, numerical calculations, oil-water emulsion, magnetite nanoparticles.

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ В СИСТЕМЕ DELPHOR

В. И. Серкова

Ухтинский государственный технический университет
viserkova@mail.ru

Рассматривается схема анализа и прогноза в системе Delphor. Нейронная сеть по своей сути напоминает множественную регрессию с той разницей, что вид функции здесь не задается, а подбирается автоматически и реализован в неявном виде. Глобальная нейронная сеть.

Ключевые слова: нечетко-логическая модель, нейронная сеть, выборка, перцептрон, нейрогрид, функция.

Общая схема анализа и прогноза состояния разработки в системе Delphor похожа на ту, которую специалисты продельывают вручную и модель в этой схеме является основой для определения наиболее важного параметра – плотности остаточных запасов в окрестности скважин или в перспективных для бурения зонах. Однако компьютерная система работает с моделью иначе, чем специалист. Для нее не имеет значения внешний вид модели и насколько она соответствует традиционным представлениям о способах предметного отображения геологического строения объекта разработки. В принципе эту модель не обязательно визуализировать. Модель просто является некоторой, подсистемой, адекватно реагирующей на внешние воздействия. При соблюдении этого условия она может быть вообще не похожа на то, что привыкли видеть геологи. Компьютер работает с моделью не визуальными, а численными методами, поэтому здесь важны не абсолютные значения, а относительные.

Построенная в рамках системы Delphor геолого-гидродинамическая модель является не целью, а средством для расчетов прогноза уровней добычи и эффекта от ГТМ. Методика расчета модели существенно изменилась и теперь это модель принципиально иного типа, чем существующие регламентные модели. Необходимость изменения методики расчета определялась тем, что существующие методики моделирования характеризуются чрезмерной детерминированностью. Например, если в какой-то точке модели указана плотность запасов 1 т/м, то это именно 1 т/м. Конечно, специалисты понимают, что это приблизительное необязательное число и, соответственно, используют модель как нечто приблизительное, но в самом представлении модели эта нечеткость явно не указана. Но если модель будет использоваться не специалистом, а самой же системой, то ее приблизительность нужно указать явно. Полагаем, что оптимальной геолого-гидродинамической моделью является нечетко-логическая, в которой определено не только само по себе геологическое строение объекта, но степень неопределенности его отображения в модели.

Система Delphor не является альтернативой существующим методам моделирования, но дополняет их. Она предназначена для того, чтобы соединить

скважину, как основной элемент разработки, с геологической и гидродинамической моделями с помощью нейронных связей. Таким образом, чтобы прогноз работы скважины опирался на эти результаты моделирования, а модели в свою очередь получали более объективные режимы работы скважин для расчета на перспективу.

Нейронная сеть по своей сути напоминает множественную регрессию с той разницей, что вид функции здесь не задается, а подбирается автоматически и реализован в неявном виде.

В мировой практике применяется много видов нейронных сетей и считается, что каждая конкретная задача требует подбора особенной структуры, и сам этот процесс подбора не формализуем. Сущность этого подхода в том, что для каждой зависимости можно подобрать наилучший вид функции, что, вообще говоря, неочевидно.

Применяется иной подход – для всех задач используется одна и та же простая структура нейронной сети (перцептрон) и называем это «простым нейроном», но зато для решения задачи применяются десятки, а иногда сотни таких нейронных сетей (или «простых нейронов»).

Тем самым реализуется основное положение теоремы Колмогорова о том, что всякую сложную функцию можно представить как суперпозицию конечного числа простых функций.

Как организовано разложение общей задачи на частные, и как суммируются результаты – в этом и заключается особенности применения нейронных сетей системой Delphog.

В системе применяется свой собственный программный модуль нейронной сети, который, в общем, ничем не отличается от перцептронов, поставляемых в известных программных пакетах типа «Statistica» или «Mathlab».

Технология использования нейронной сети заключается в том, как организован доступ к ней и адресация, как подготавливаются данные и считываются результаты.

В системе Delphog применяются «перманентно живущие» нейроны, которые могут «дообучаться» по мере поступления новой информации в базу данных. Весь процесс автоматизирован.

Применяется 3 метода объединения нейронных сетей в некоторые системы для достижения результатов нужного вида:

1. Многослойный каскад.
2. Нейрогрид.
3. Матричный лабиринт.

Всего применяется 105 наименований нейронных структур, каждый со своим набором параметров на входе.

Кроме того, имеется реализация сети Кохонена для кластеризации выборок.

Структуры нейронных сетей

1. Кумулятивный каскад – может содержать до 7 слоев нейронных сетей и использовать до 300 входных параметров.

При этом первый слой служит главным образом для подавления информационных шумов, что связано с потерей дисперсии выходного сигнала относительно входного, а все последующие слои необходимы, для усиления полезной составляющей сигнала. Чем больше входных параметров – тем больше необходимо слоев.

В любом случае увеличение числа слоев улучшает результат, но за счет увеличения машинного времени. Особенно при больших обучающих выборках.

На самом деле, нельзя в одну нейронную сеть подавать много параметров, во-первых, время обучения вырастет до нереальных размеров, а главное – результат получится очень усредненный и малоинтересный. Каскад решает обе проблемы.

2. Нейрогрид – используется для геологической модели и отличается, он может быть одно и многослойным, но способ суммирования здесь иной.

3. Матричный лабиринт – если два предыдущих типа настраиваются по фактическим значениям выходного параметра, то этот тип – на вероятности пересечения множеств параметров. Чем больше ступеней в лабиринте, тем более точно можно прогнозировать значение параметра.

Это наиболее перспективный тип сети, он позволяет работать с любыми объемами выборок и обучается быстро, но занимает больше других дискового пространства.

Обучение всех видов нейронных сетей выполняется в принципе одинаково:

– на вход подается вектор параметров,

– полученный результат сравнивается с заранее известным фактом,

– затем веса нейронных связей корректируются на разницу с некоторым коэффициентом релаксации.

Процесс повторяется сотни, тысячи раз, пока ошибка не минимизируется.

Проблемы обучения нейронных сетей:

– если уравнение регрессии при одном и том же наборе параметров всегда одинаково, то нейронная сеть при каждом повторном переобучении меняется и дает несколько иной результат,

– при слишком высокой скорости сеть можно безвозвратно испортить – она «расходится»,

– малые скорости требуют много машинного времени,

– ошибка в процессе обучения колеблется, уменьшаясь в целом, но периодами – растет и самое сложное – выбрать момент, когда выгоднее всего прекратить обучение,

– сама по себе точность настройки нейронной сети на факт вовсе не гарантирует точности прогноза, даже наоборот, слишком точно настроенная сеть «запоминает свой набор значений» и не выйдет за его пределы.

Главная проблема – как сформировать обучающую выборку, для этого недостаточно просто взять фактические данные, их нужно дополнить и отфильтровать, и это делается средствами самих нейронных сетей.

Весь аппарат «глобальных нейронных сетей» нужен именно для формирования обучающих выборок для объекта или скважины.

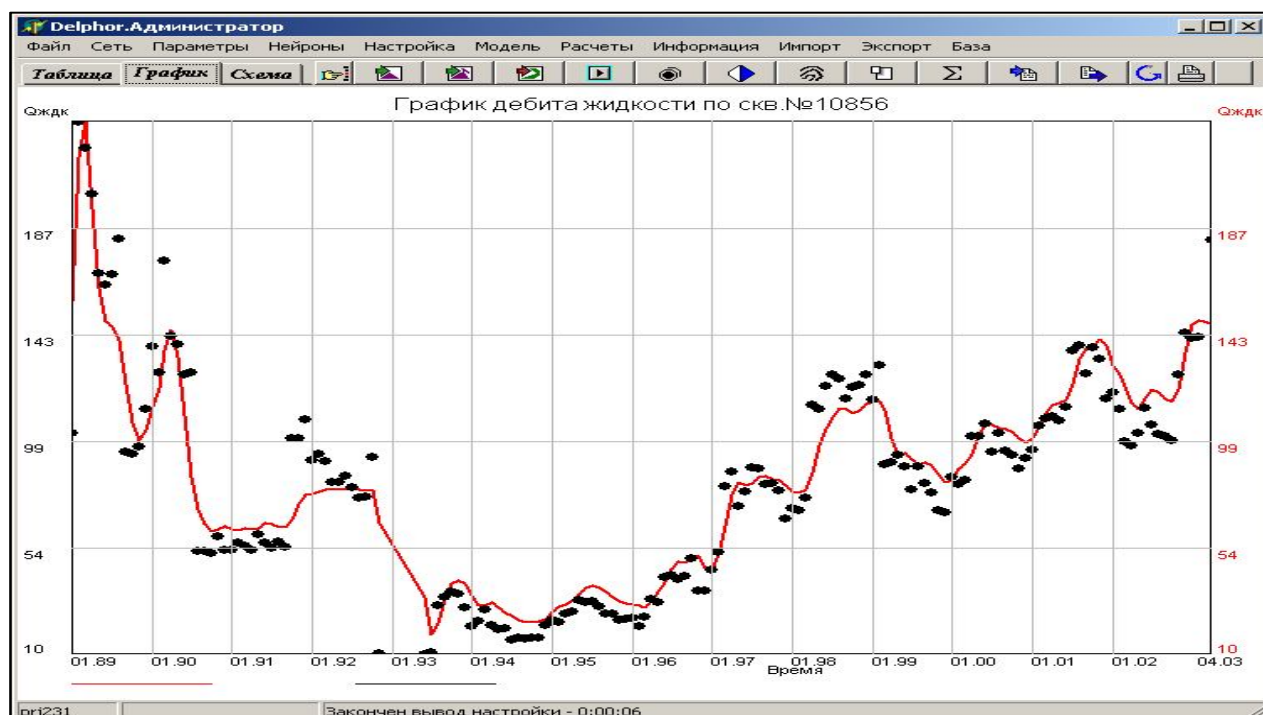


Рис. 1. График дебита жидкости по скважине

Подобно тому, как специалист использует весь свой опыт, анализируя конкретную скважину, так и система Delphog при построении модели конкретного объекта использует всю имеющуюся информацию, том числе и по другим объектам. Это делается с помощью аппарата «глобальной нейронной сети».

Зависимости, характерные для всех объектов вообще, найденные с помощью нейронной сети, используются при моделировании конкретного локального объекта для формирования его обучающих выборок.

Глобальные сети реализованы в двух вариантах, с использованием «кумулятивного каскада» и «матричного лабиринта».

«Глобальные нейронные сети» формируются для каждого крупного региона добычи нефти.

При формировании обучающей выборки для «глобальной нейронной сети» данные собираются в одну выборку со всех объектов и затем отфильтровываются дважды – с помощью стандартных функций, обычно используемых в разработке, а затем выборка отфильтровывается с помощью нейронного фильтра, который обучается на ее же начальных данных, а затем отбрасывает группы данных, выходящих за рамки установленного коридора.

Обучение «глобальной нейронной сети» – длительный процесс, поскольку обучающая выборка получается длинной, но это нужно выполнять редко, а процесс можно распараллелить на несколько компьютеров.

При обучении автоматически формируются 9 кластеров для каждой группы входных параметров, таким образом, для каждого параметра получается 27 различных функций, а для обводненности в целом 270 функций.

1171111011100010000000100100113011004770 (кластеры записываются в виде цепочки.

0010011011100010840022100000000011004230 кодов, где каждая цифра – номер кластера).

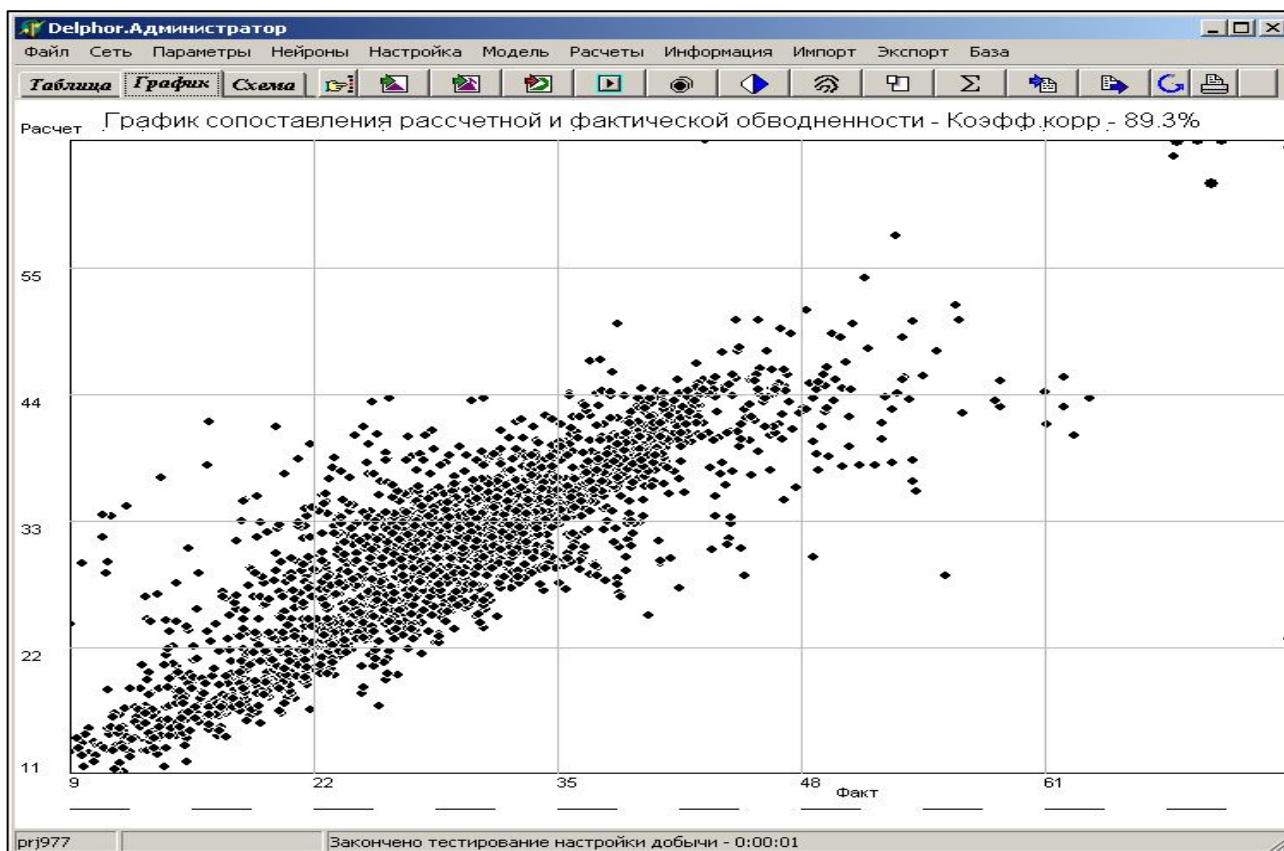


Рис. 2. График сопоставления расчетной и фактической обводненности

Это разновидность «генетического алгоритма»: скважина сама выбирает наиболее близкие для себя кластеры согласно своим геологическим или промысловым характеристикам.

Формирование обучающей выборки для нейронов скважины

К фактическим данным самой скважины в обучающую выборку добавляются несколько расчетных точек, полученных с помощью «глобальной нейронной сети».

Даже в начальный период эксплуатации скважина «должна знать», что ее в будущем ожидает высокая обводненность и рост «скин-эффекта».

Сама по себе нейросеть – это в значительной степени распознавание образа, и не более других методов способна к экстраполяции, поэтому ей нужно «показать» весь возможный спектр образов.

В системе Delphog реализовано три типа моделей, построенных на одних и тех же принципах, которые различаются своими наборами геолого-технологических параметров:

S – Упрощенная – требующая, минимум данных, использующая только промысловые данные по истории добычи и схему расположения скважин. Нейронные функции связывают здесь непосредственно одну скважину с другой без всякого промежуточного блока.

A – Объемная – наиболее близкая к традиционной, в ней скважины взаимодействуют с между собой через объемы пласта, параметры которого вводятся в систему уравнений. Эта модель требует кроме промысловых также геологических, сейсмических, и гидродинамических данных. В ней требуется расчет геологической и гидродинамической моделей пласта, близких к традиционному представлению в виде многослойного грида.

G – Точечная – также, использующая геологические данные и гидродинамические данные но при этом пласт представляется в виде ограниченного набора точек (примерно по 4 на 1 скважину) и скважины взаимосвязаны не непосредственно друг с другом, а через эти точки пласта

R – рекурсивная – в этой модели есть не только нейроны скважин, но и нейроны грида пласта, которые обучаются на результатах гидродинамической модели.

Скважины связаны с узлами грида, узлы грида – со скважинами и между собой.

Литература

1. Хайкин С. Нейронные сети. – Москва – Санкт-Петербург – Киев, 2006.
2. Соломатин Г. И, Захарян А. З., Ошкарин Н. И. Прогнозирование работы скважин с помощью искусственных нейронных сетей // Нефтяное хозяйство. 2002. №10. С. 92-98.

NEURAL NETWORKS IN DELPHI SYSTEM

V. I. Serkova

Ukhta State Technical University

The scheme of analysis and forecast in the Delphi system is considered. The neural network in its essence resembles multiple regression with the difference that the type of function is not specified here, but is selected automatically and implemented implicitly. Global neural network.

Keywords: fuzzy logic model, neural network, sampling, perceptron, neurogrid, function.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФИЛЬТРАЦИОННОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ПРОНИЦАЕМОГО ПЛАСТА НЕФТЯНОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ НА ОСНОВЕ НЕЧЕТКОЙ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

В. Е. Кунцев, А. Н. Дорогобед, П. В. Кожевникова

Ухтинский государственный технический университет
vitaly.91@yandex.ru

Работа посвящена описанию способа построения нечеткой геологической модели по результатам применения метода гидродинамической томографии, где каждому значению фильтрационного сопротивления проницаемого пласта сопоставляется значение достоверности. Фильтрационное сопротивление выражается в форме нечетких величин, рассчитанных на основе построенных функций принадлежности. Экспериментальные расчеты, представленные в работе, производились с помощью разработанного программного продукта, который позволяет вычислять нечеткую геологическую модель по данным пространственного распределения фильтрационного сопротивления с учетом подбора значения коэффициента рассеяния. В работе также приведен анализ результатов построения нечетких геологических моделей и выбора значения коэффициента, при котором модель наиболее оптимальна.

Ключевые слова: нечеткая геологическая модель, функция принадлежности, коэффициент рассеяния, гидродинамическая томография, фильтрационное сопротивление.

Введение

Мониторинг текущего состояния фильтрационно-емкостных параметров нефтяного месторождения в процессе эксплуатации скважин может быть реализован на основе метода реконструкции карты распределения фильтрационного сопротивления с применением гидродинамической томографии, а также результатов исследования процесса перемещения реперной точки КВД (кривой восстановления давления) [1]. В результате применения метода гидродинамической томографии проницаемого пласта рассчитывается поле пространственного распределения фильтрационного сопротивления [2]. Рассчитанное поле сохраняет области с неопределенностью данных, ввиду того, что лучи движения реперной точки между набором скважин осваиваемого месторождения данные зоны не затрагивают. При таких обстоятельствах следует применять интерполяционные методы определения приближенных значений. К таким методам относится гидродинамическая томография, так как итерационный процесс оптимизации внутри метода предоставляет искомый результат с определенной долей погрешности. Кроме того, могут оставаться участки в межскважинном пространстве месторождения, не охваченные рабочей областью, на которой рассчитывался метод гидродинамической томографии. Чаще всего это возникает по причине нехватки исходных данных по результатам гидродинамического прослушивания скважин или неплотной карты скважин в случае расчета гидродинамической томографии на математической модели месторождения [3]. По этим причинам в статье предлагается результат применения гидродинамической томографии представлять в форме нечетких величин [4].

Математическая модель

Функция принадлежности $0 \leq \mu(r) \leq 1$ определяет нечеткую величину r и отображает меру достоверности этой величины, то есть возможность того, что в результате расчетов получится значение r . Функция принадлежности параметра «фильтрационное сопротивление» $\mu(r)$ вычисляется для каждой ячейки сетки $r(x, y)$, где $x = \{1 \dots X\}$, $y = \{1 \dots Y\}$. Функция принадлежности по всему пласту может быть рассчитана как набор различных базовых функции.

По результатам выполненных экспериментов был сделан вывод, что наилучшей формой выражения неопределенности данных является экспоненциальная модель – гауссова функция принадлежности:

$$\mu_1(r(x, y)) = e^{-\frac{(r(x_2, y_2) - r(x, y))^2}{2\lambda^2}}, \quad (1)$$

где (x, y) – координаты текущей точки, а (x_2, y_2) – координаты точки, доля влияния которой рассчитывается для текущей. Применение экспоненциальной модели предполагает, что достоверность значений нечеткой величины r в точке (x, y) определяется с учетом удаления от значения r окружающих точек сетки (x_2, y_2) :

$$\mu_2(r(x, y)) = e^{-\frac{(x_2 - x)^2 + (y_2 - y)^2}{2\lambda^2}}. \quad (2)$$

Данное утверждение обеспечивает снижение величины достоверности функции принадлежности при отдалении реперных точек сетки месторождения от точки, для которой идет подсчет. Формулы (1) и (2) содержат параметр λ , называемый коэффициентом рассеяния, который определяет уровень разброса значений r .

Чтобы рассчитать итоговую функцию принадлежности, необходимо просуммировать рассчитанные по всем ячейкам сетки месторождения значения алгебраического произведения формул (1) и (2). Отсюда следует, что значение итоговой функции μ нечеткой величины «фильтрационного сопротивления» r , рассчитывается в таком виде:

$$\mu(r(x, y)) = \sum_{\substack{x_2, y_2=1 \\ r(x_2, y_2) \neq 0}}^{X, Y} \left[\frac{1}{\lambda\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(r(x_2, y_2) - r(x, y))^2}{2\lambda^2}} \cdot e^{-\frac{(x_2 - x)^2 + (y_2 - y)^2}{2\lambda^2}} \right]. \quad (3)$$

Пространственное распределение значений фильтрационного сопротивления осваиваемого месторождения вычисляется с использованием метода гидродинамической томографии проницаемого пласта в соответствии с теорией, описанной в статье [5]; соответствующие рассчитанному распределению значения достоверности в свою очередь вычисляются по формуле (3).

Результаты

Тестовый эксперимент был проведен на модели проницаемого пласта месторождения, содержащего пять скважин. Данный пласт представлен как проекция поверхности в виде двумерной сетки размерностью 21×21 (рис. 1). Для каждой пары скважин были заданы интервальные времена перемещения «сиг-

нала» депрессии вдоль КДВ для исследуемого фонда скважин. В качестве начального приближения была задана однородная среда, в которой значение показателя фильтрационного сопротивления во всех ячейках было равным 0,3 ($r = 0,3$). Рис. 1 отражает лучи движения «сигнала» депрессии на первой итерации метода гидродинамической томографии. Вдоль данных лучей движения рассчитываются новые значения фильтрационного сопротивления. Рис. 2 отражает результат работы метода гидродинамической томографии.

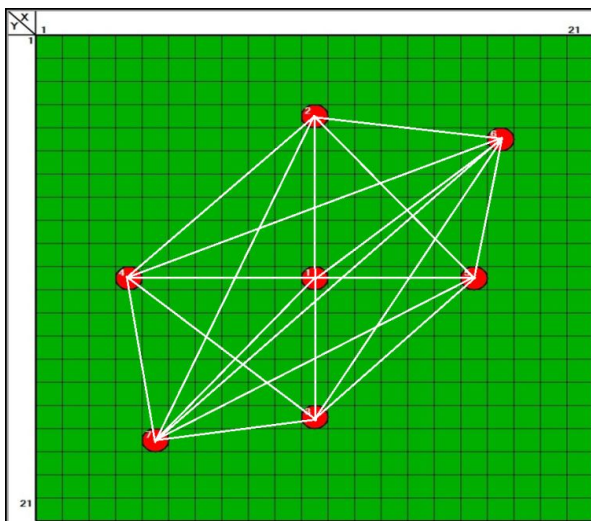


Рис. 1. Карта среды с начальным приближением и сетка скважин тестового месторождения

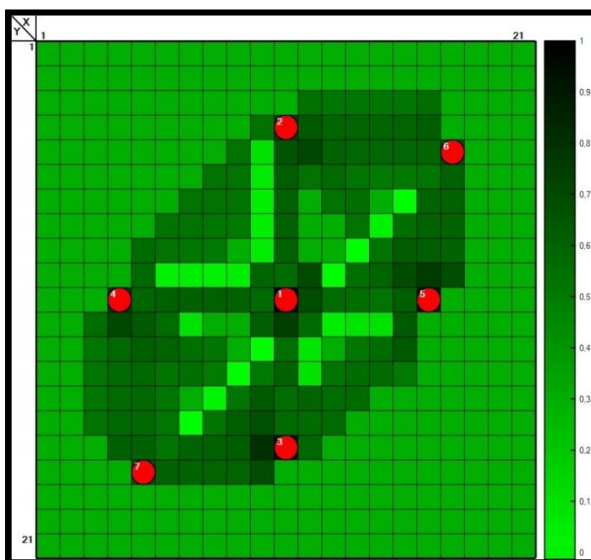


Рис. 2. Карта данных пространственного распределения фильтрационного сопротивления

Карта данных, показанная на рис. 2, является источником начальной информации при расчете функции принадлежности (3) нечеткой величины. На рис. 3 представлены карты распределения достоверности фильтрационного сопротивления, рассчитанные на основе функции принадлежности (3) с разными значениями коэффициента рассеяния λ .

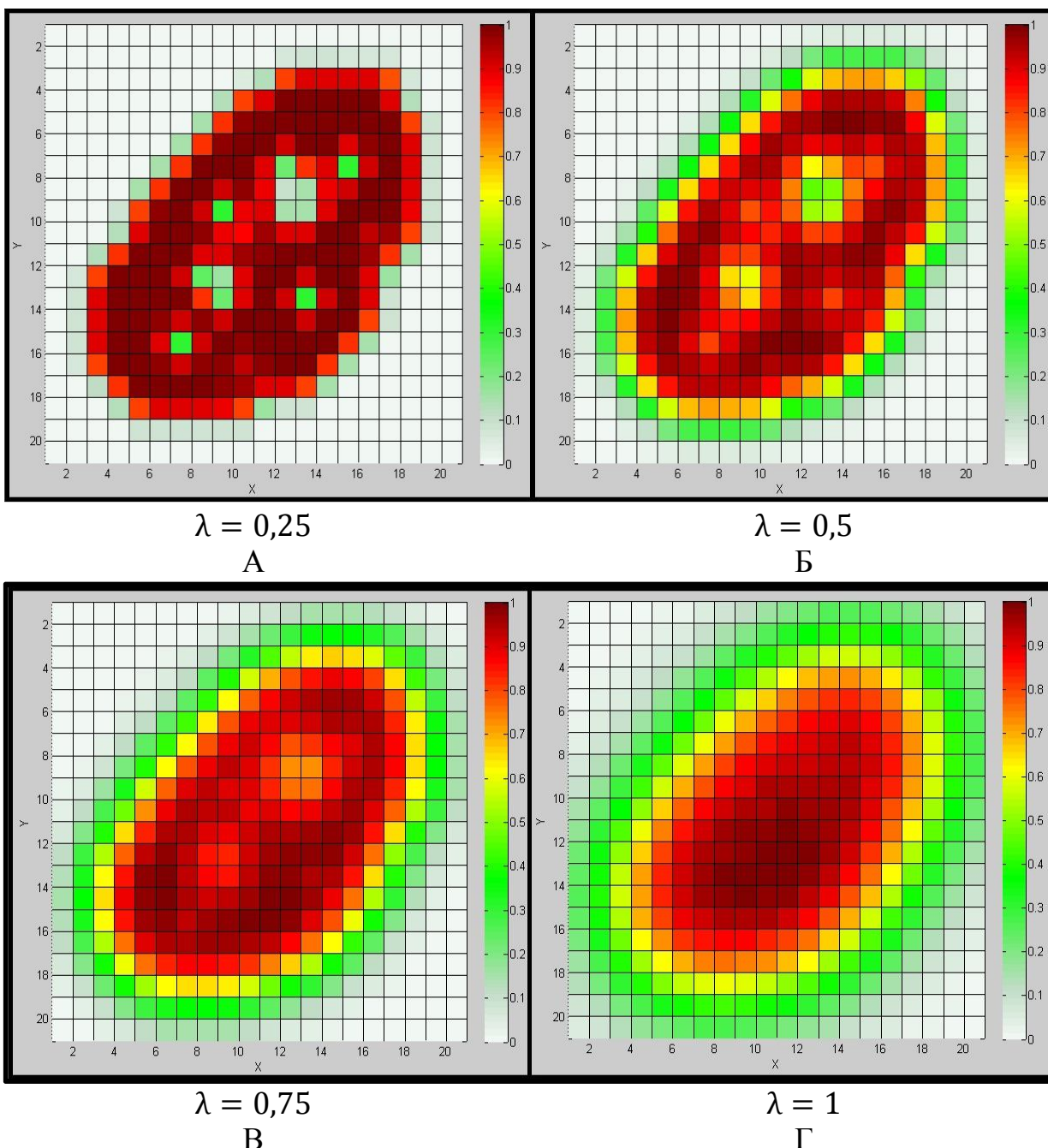


Рис. 3. Карта распределения достоверности фильтрационного сопротивления по сетке месторождения для нескольких вариантов коэффициента рассеяния

После анализа проведенных экспериментов был сделан вывод, что наилучшим результатом является расчет с коэффициентом рассеяния равным 0,5 (рис. 3Б). При данном значении коэффициента функция принадлежности отражает участки с высоким и низким уровнями достоверности пространственного распределения фильтрационного сопротивления проницаемого пласта. Резкий перепад между высокой и низкой достоверностью имеет место при меньших значениях коэффициента рассеяния (рис. 3А). Практически равномерное распределение достоверности, на которое не оказывает воздействия степень плотности данных, полученных в результате реализации гидродинамической томографии, имеет место при более высоких значениях коэффициента рассеяния (рис. 3В и Г).

Выводы

Для решения задач по оперативному мониторингу текущего состояния фильтрационно-емкостных параметров нефтегазовых месторождений в процессе эксплуатации скважин реализован метод реконструкции карты распределения фильтрационного сопротивления проницаемой среды, на основе гидродинамической томографии, нечеткую геологическую модель исследуемого месторождения. Нечеткая геологическая модель наложена на сетку месторождения, где каждой ячейке со значением исследуемого параметра (фильтрационного сопротивления) поставлено в соответствие величина уровня достоверности значения, рассчитываемый с помощью функции принадлежности. В качестве базиса для формирования функции принадлежности была определена экспоненциальная модель, на основе операции алгебраического произведения и добавления коэффициента рассеяния данных.

Проведенные расчеты на экспериментальных данных позволили дать рекомендации относительно выбора коэффициента рассеяния λ для получения информативной картины достоверности значений исследуемого параметра.

Литература

1. Кобрунов А. И., Куделин С. Г., Мухаметдинов С. В., Художилова А. Н. Метод изучения пространственного распределения фильтрационного сопротивления при эксплуатации нефтяных месторождений // Нефтяное хозяйство. – 2013. – № 8. – С.58–60.
2. Щелкачев В. Н. Основы и приложения теории неустановившейся фильтрации: Ч. 1, 2. – М.: Нефть и газ, 1995. – 586 с.
3. Кунцев В. Е., Кобрунов А. И., Мотрюк Е. Н. Теоретические предпосылки и принципы реализации пассивной гидродинамической томографии проницаемого пласта // Ресурсы Европейского Севера. Технологии и экономика освоения. – 2015. – № 1. – С. 19–26.
4. Кофман А. Введение в теорию нечетких множеств. – М.: Радио и связь, 1982. – 432 с.
5. Кобрунов А. И., Кунцев В. Е., Мотрюк Е. Н. Вычислительная схема гидродинамической томографии // Фундаментальные исследования. - 2016. - № 7 -2. – С. 230–235.

THE DISTRIBUTION OF FILTRATION RESISTANCE OF THE PERMEABLE RESERVOIR OF AN OIL FIELD BASED ON A FUZZY GEOLOGICAL MODEL

V. E. Kuntsev, A. N. Dorogobed, P. V. Kozhevnikova

Ukhta State Technical University

The article presents a method for constructing a fuzzy geological model based on the results of applying the hydrodynamic tomography method, where each value of the filtration resistance of a permeable formation is associated with a reliability value. Filtration resistance is expressed in the form of fuzzy quantities calculated on the basis of the constructed membership functions. The experimental calculations presented in this work were carried out using a developed software product that allows us to calculate a fuzzy geological model according to the spatial distribution of filtering resistance, taking into account the selection of the scattering coefficient. The paper also provides an analysis of the results of constructing fuzzy geological models and choosing a coefficient value at which the model is most optimal.

Keywords: fuzzy geological model, membership function, scattering coefficient, hydrodynamic tomography, filtration resistance.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННОГО БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА
В АМОРФНЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Re-Tb

А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов, И. М. Пашуева

Воронежский государственный технический университет
bondarev_a_v@mail.ru

Методом молекулярной динамики построены компьютерные модели атомной структуры аморфных сплавов системы Re-Tb. Рассчитаны парциальные функции радиального распределения и параметры композиционного ближнего порядка. Относительные радиусы координационных сфер для всех типов атомных пар не изменяются с изменением состава сплавов.

Ключевые слова: аморфные сплавы, молекулярная динамика, функция радиального распределения, параметры композиционного ближнего порядка.

Аморфные сплавы (АС) рения с редкоземельными металлами представляют большой научный интерес благодаря уникальному комплексу физических свойств [1]. В данной работе приводятся результаты компьютерного моделирования атомной структуры АС Re-Tb в широком интервале концентраций.

Для АС $\text{Re}_{100-x}\text{Tb}_x$ ($x = 18, 36, 53, 71, 89$ ат. %) методом молекулярной динамики при постоянной температуре $T = 300$ К построены компьютерные модели атомной структуры. В качестве начальной конфигурации бралось случайное расположение 10 000 атомов в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Межатомное взаимодействие описывалось эмпирическим полиномиальным потенциалом [2]. Модельные функции радиального распределения $g(r)$ достаточно хорошо совпадают с экспериментальными функциями $g(r)$ [3]. Таким образом, построенные модели адекватно воспроизводят реальную атомную структуру исследуемых сплавов.

Структура композиционного ближнего порядка АС Re-Tb изучалась с помощью парциальных парных функций радиального распределения $g_{\text{Re-Re}}(r)$, $g_{\text{Re-Tb}}(r)$ и $g_{\text{Tb-Tb}}(r)$ (рис. 1-3). Из рисунков видно, что положение первых пиков функций $g_{\text{Tb-Tb}}(r)$, т.е. среднее межатомное расстояние Tb-Tb, немного превышает положение первых пиков функций $g_{\text{Re-Re}}(r)$, т.е. межатомное расстояние Re-Re, что согласуется с атомными радиусами этих элементов.

Положения максимумов на функциях $g_{\text{Re-Re}}(r)$ и $g_{\text{Re-Tb}}(r)$ для атомных пар Re-Re и Re-Tb не изменяются с изменением состава сплава. Положения максимумов на функциях $g_{\text{Tb-Tb}}(r)$ смещаются вправо при увеличении концентрации атомов Tb, изменяясь от $r_1 = 0,301$ нм при $x = 18$ ат. % Tb до $r_1 = 0,351$ нм при $x = 89$ ат. % Tb. Последнее значение r_1 близко к диаметру атома тербия

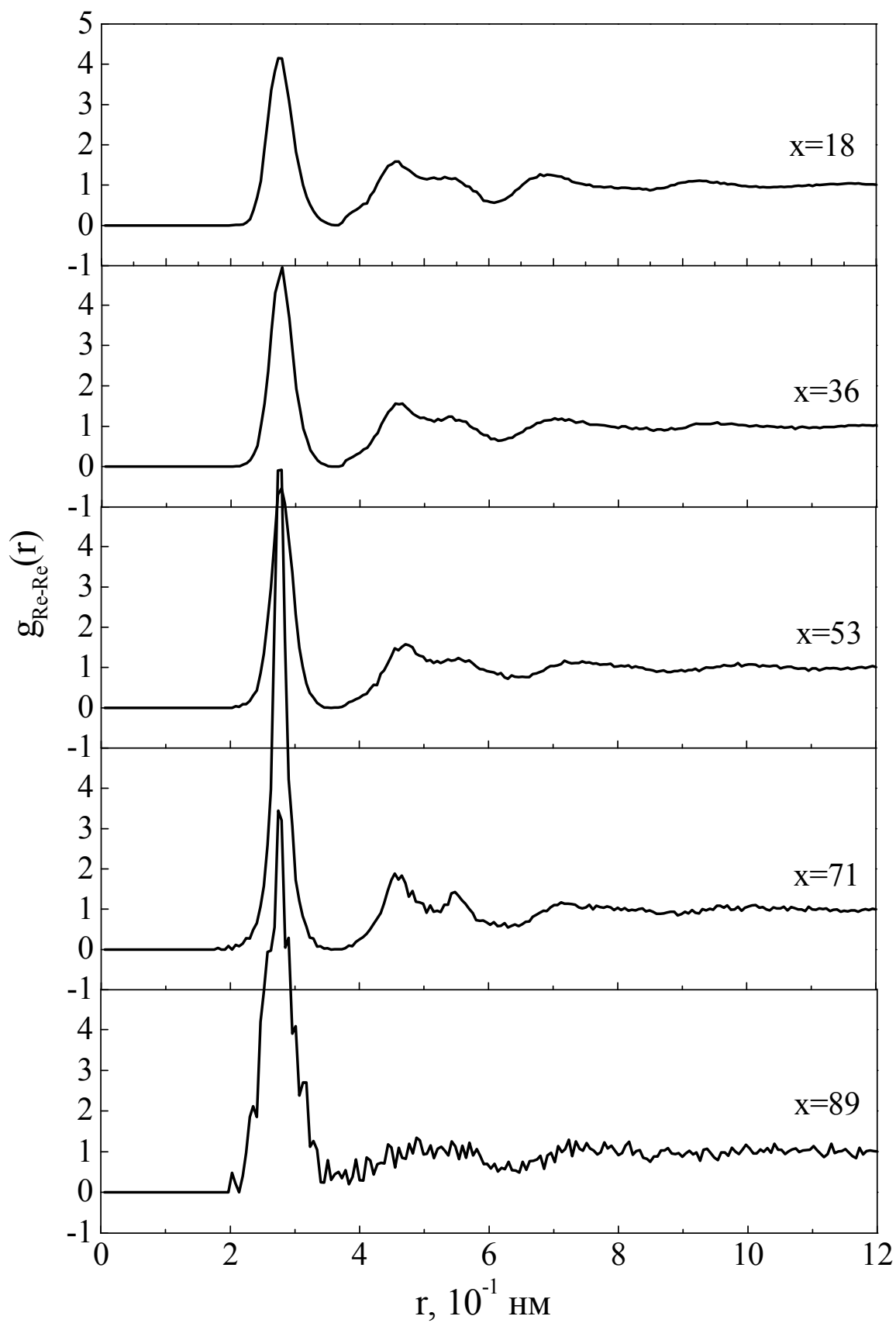


Рис. 1. Парциальные парные функции распределения атомов $g_{\text{Re-Re}}(r)$ для моделей АС $\text{Re}_{100-x}\text{-Tb}_x$

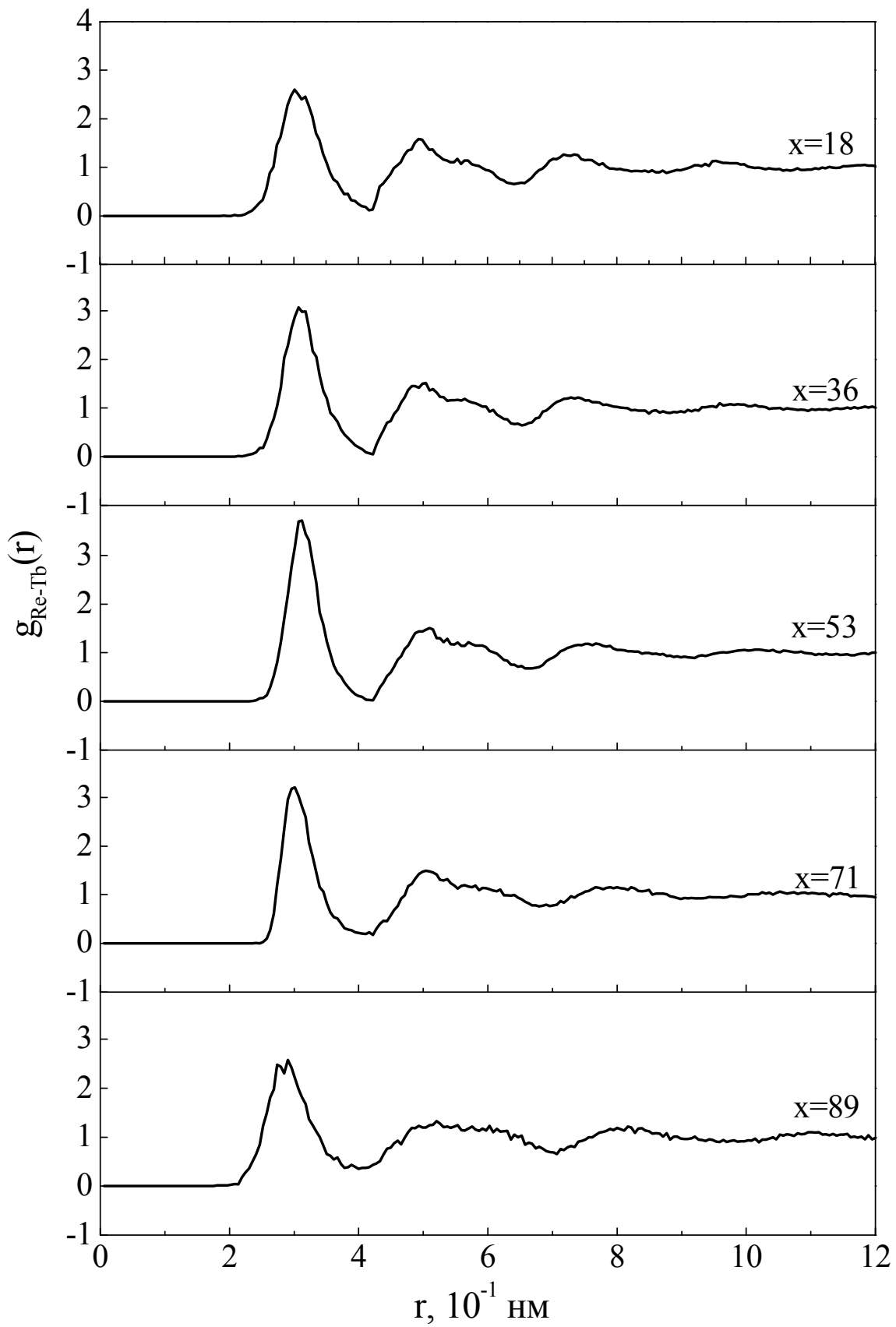


Рис. 2. Парциальные парные функции распределения атомов $g_{\text{Re-Tb}}(r)$ для моделей АС $\text{Re}_{100-x}\text{-Tb}_x$

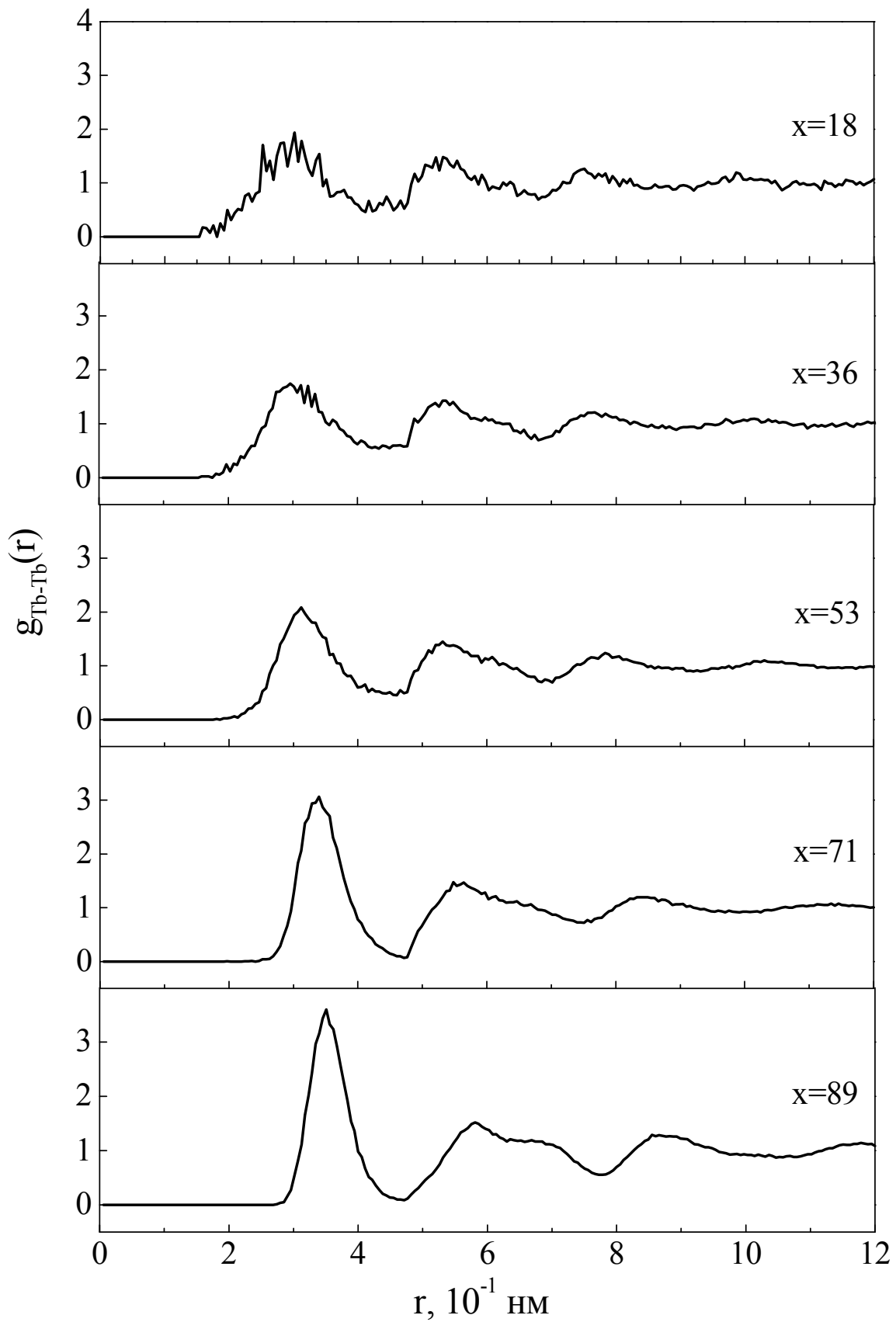


Рис. 3. Парциальные парные функции распределения атомов $g_{\text{Tb-Tb}}(r)$ для моделей АС $\text{Re}_{100-x}\text{Tb}_x$

($d_{\text{Tb}} = 0,354$ нм). С увеличением концентрации атомов Tb первый пик функции $g_{\text{Tb-Tb}}(r)$ становится более узким и высоким. Относительные радиусы координационных сфер r_i/r_1 для всех трех типов атомных пар не изменяются с изменением состава сплава.

Парциальные координационные числа $Z_{\text{Re-Re}}$, $Z_{\text{Re-Tb}}$, $Z_{\text{Tb-Re}}$ и $Z_{\text{Tb-Tb}}$ были рассчитаны как среднее число геометрических соседей определенного сорта (т.е. атомов, имеющих общую грань многогранника Вороного).

Параметры композиционного ближнего порядка для моделей АС Re-Tb приведены в таблице.

Параметры композиционного ближнего порядка АС $\text{Re}_{100-x}\text{Tb}_x$

Сплавы	$\text{Re}_{82}\text{Tb}_{18}$	$\text{Re}_{64}\text{Tb}_{36}$	$\text{Re}_{47}\text{Tb}_{53}$	$\text{Re}_{29}\text{Tb}_{71}$	$\text{Re}_{11}\text{Tb}_{89}$
$r_1^{\text{Re-Re}}, 10^{-1}$ нм	2,74	2,79	2,79	2,77	2,77
$r_1^{\text{Re-Tb}}, 10^{-1}$ нм	3,01	3,07	3,09	3,01	2,90
$r_1^{\text{Tb-Tb}}, 10^{-1}$ нм	3,01	2,96	3,12	3,40	3,51
$\sigma(r_1)^{\text{Re-Re}}, 10^{-1}$ нм	0,178	0,144	0,127	0,119	0,093
$\sigma(r_1)^{\text{Re-Tb}}, 10^{-1}$ нм	0,280	0,229	0,204	0,170	0,140
$\sigma(r_1)^{\text{Tb-Tb}}, 10^{-1}$ нм	0,632	0,530	0,446	0,361	0,293
$Z_1^{\text{Re-Re}}$	10,7	7,8	5,4	3,1	1,0
$Z_1^{\text{Re-Tb}}$	2,8	5,3	7,4	9,3	11,1
$Z_1^{\text{Tb-Re}}$	12,9	9,4	6,6	3,8	1,4
$Z_1^{\text{Tb-Tb}}$	3,3	6,2	8,5	11,8	12,9

Литература

1. Ю. В. Бармин, С. Ю. Балалаев, А. В. Бондарев и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2006. Т. 70. С. 1145.
2. И. Л. Батаронов, А. В. Бондарев, Ю. В. Бармин // Изв. РАН. Сер. физ. 2000. Т. 64. С. 1666.
3. А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов, Ю. В. Бармин // Вестник ВГТУ. Сер. Материаловедение. 2004. Вып. 1.15. С. 39.

STUDY OF THE COMPOSITIONAL SHORT-RANGE ORDER IN AMORPHOUS ALLOYS OF THE Re-Tb SYSTEM

A. V. Bondarev, I. L. Bataronov, I. M. Pashueva

Voronezh State Technical University

Using the molecular dynamics method, we constructed the computer models of atomic structure of amorphous alloys of the Re-Tb system. The partial radial distribution functions and parameters of compositional short-range order were calculated. The relative radii of coordination spheres for all types of atomic pairs do not change with changing the composition of the alloys.

Keywords: amorphous alloys, molecular dynamics, radial distribution function, parameters of compositional short-range order.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УЧАСТКОВ ПОВЕРХНОСТЕЙ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ ИХ ФОТОИЗОБРАЖЕНИЙ

С. В. Борзунов, С. Д. Кургалин, Я. А. Туровский

Воронежский государственный университет
sborzunov@gmail.com

Предложен метод моделирования участка сложной геометрической формы, расположенного на криволинейной поверхности, по его фотоизображению. Данный метод позволяет определить площадь участка и может быть полезен для анализа фотоснимков в картографии, геологии, промышленности и др., а также в случаях, когда требуется дистанционное определение площади объектов.

Ключевые слова: анализ фотоснимков, площадь геометрической фигуры.

Введение

Одним из универсальных способов получения количественных и качественных характеристик исследуемых объектов во многих прикладных областях является дистанционное зондирование поверхностей сложной геометрической формы. Необходимость анализа картографических данных большого объема возникает при исследовании природно-географических условий территорий [1, 2]. Использование методов дистанционного зондирования обеспечивает высокий уровень достоверности оценки площади лесного покрова и других типов экосистем и состояния биосферы, выявления степени ущерба от пожаров на ограниченных участках Земли [3-9] и др.

Большинство методов оценки площади поверхности по фотографическим данным не используют в явном виде информацию о геометрической форме поверхности. Оценка вычислительных и систематических ошибок, присущих этим методам, представляет собой сложную, не до конца решенную задачу [10-14]. Следовательно, разработка способов определения площади поверхности сложной формы по данным фотографии является современной актуальной задачей.

Целью настоящей работы является создание метода моделирования участка сложной геометрической формы, расположенного на криволинейной поверхности, по его фотоизображению. Предполагается, что исходные данные представляют собой фотоизображение односвязной области произвольной формы, которая расположена на поверхности в виде усеченного эллиптического конуса.

Вычисление площади области на криволинейной поверхности

В настоящей работе под криволинейной поверхностью понимается поверхность усеченного эллиптического конуса. Получим аналитические соотношения, связывающие площадь области с эксцентриситетом и главными

радиусами сечений такого конуса. Выбор поверхности в виде усеченного эллиптического конуса определяется тем, что в первом приближении такую поверхность можно считать моделью реальных объектов, таких, как неровности земной поверхности, форма конечности человека и др. Будем полагать, что вся анализируемая часть поверхности при использовании этого метода должна быть целиком «видима» устройством, которое формирует цифровое изображение. Разумеется, разные элементы изображения при этом будут расположены под разными углами по отношению к прибору.

Рассмотрим область D , расположенную на эллиптическом конусе, Пусть D ограничена замкнутым контуром Γ и контур Γ задаётся как функция $l = l(z)$ с n известными значениями в точках $y_i : l_i = l(y_i), i = 1, \dots, n$, которые получены из анализа фотоснимка (рис. 1).

Как легко видеть, величины $l(y_i)$ равны отклонениям проекций точек контура на фокальную плоскость фотокамеры от проекции оси симметрии конуса.

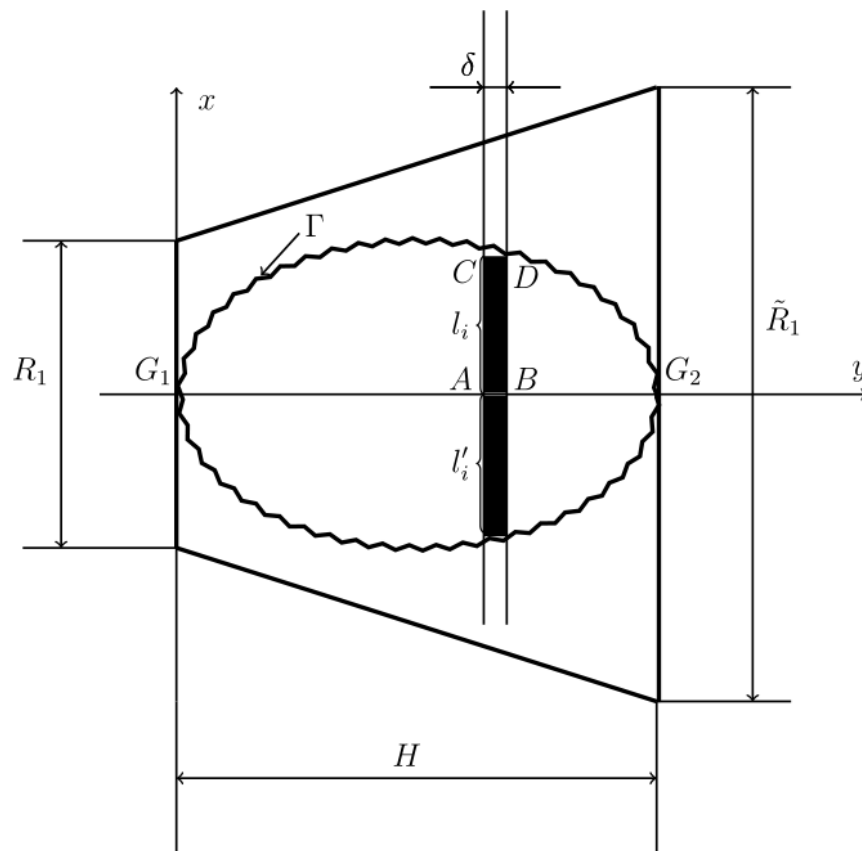


Рис. 1. Проекция области D в фокальной плоскости фотокамеры

Анализируемая поверхность – это усечённый эллиптический конус, грани которого являются эллипсами с полуосями $R_1, \sqrt{1-e^2}R_1$ и $\tilde{R}_1, \sqrt{1-e^2}\tilde{R}_1$, $\tilde{R}_1 > R_1$, где e – эксцентриситет (см. рис. 2). Сечения конуса плоскостями,

параллельными граням, образуют эллипсы с постоянным эксцентриситетом e и полуосями $R_1(y) = R_l + \frac{\tilde{R}_1 - R_l}{H} y$, $R_2(y) = \sqrt{1 - e^2} R_1(y)$.

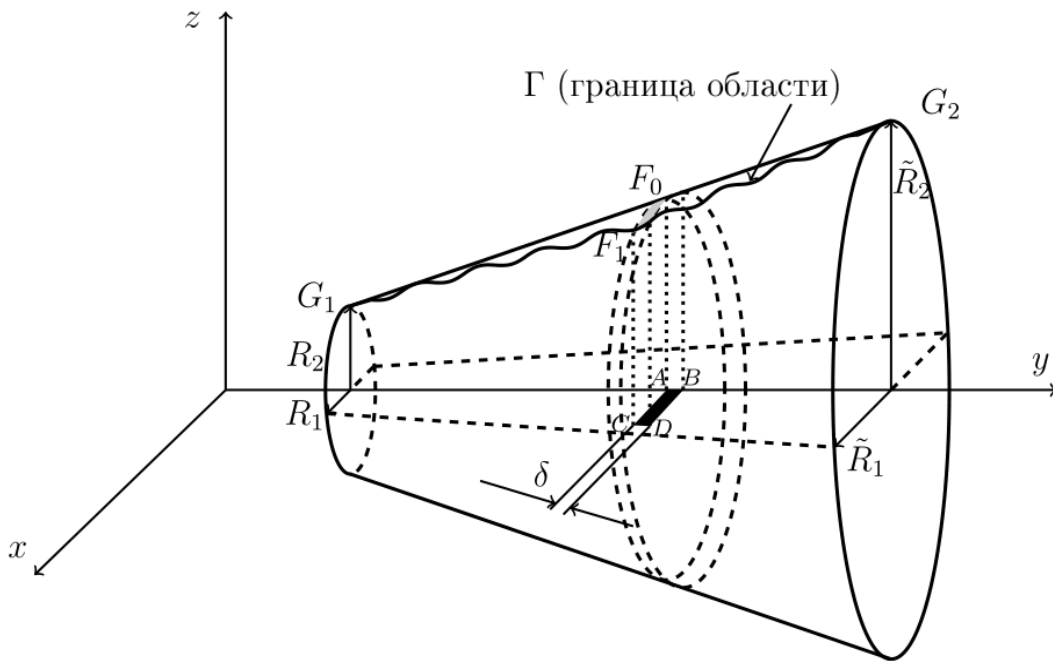


Рис. 2. Разбиение площади, ограниченной контуром Γ

Прямоугольнику $ABCD$, расположенному на плоскости xu (фокальной плоскости), соответствует фигура $A'B'C'D'$, являющаяся элементом поверхности, площадь которой предстоит определить (рис. 2).

Вычислим координаты вершин прямоугольника $ABCD$ в декартовой системе координат:

$$A(0, y, 0), B(0, y + \delta, 0), C(x, y, 0), D(x, y + \delta, 0).$$

Далее определим площадь фигуры $A'B'C'D'$. Для этого выпишем координаты вершин, которые найдём из условия принадлежности всех точек поверхности $\frac{x^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} - \frac{y^2}{c^2} = 0$. Получим следующие значения координат:

$$A' \left(0, \frac{b}{c} z, z \right), B' \left(0, \frac{b}{c} (z + \delta), z + \delta \right),$$

$$C' \left(x, b \sqrt{\frac{z^2}{c^2} - \frac{x^2}{a^2}}, z \right), D' \left(x, b \sqrt{\frac{(z + \delta)^2}{c^2} - \frac{x^2}{a^2}}, z + \delta \right).$$

В рамках данной модели боковое сечение является эллипсом с полуосями R_1 и $R_2 = \sqrt{1 - e^2} R_1$, поэтому $z(x) = R_2 \sqrt{1 - x^2 / R_1^2}$ (см. рис. 3). Тогда для $z'(x)$

имеем $z'(x) = -\frac{R_2}{R_1^2} \frac{x}{\sqrt{1-x^2/R_1^2}}$. Длина дуги L_1 выражается с помощью формулы:

$$L_i = \int_0^{l_i} \sqrt{\frac{R_1^2 - [1 - (R_2/R_1)^2]x^2}{R_1^2 - x^2}} dx = \int_0^{l_i} \sqrt{\frac{R_1^2 - e^2 x^2}{R_1^2 - x^2}} dx. \quad (1)$$

Вычисление интеграла в (1) приводит к следующему результату:

$$L_i = R_1 E \left[\arcsin \frac{l_i}{R_1}, e \right], \quad (2)$$

где через $E(\varphi, \varepsilon)$ обозначен неполный эллиптический интеграл второго рода в нормальной форме Лежандра: $E(\varphi, \varepsilon) = \int_0^\varphi \sqrt{1 - e^2 \sin^2 t} dt$.

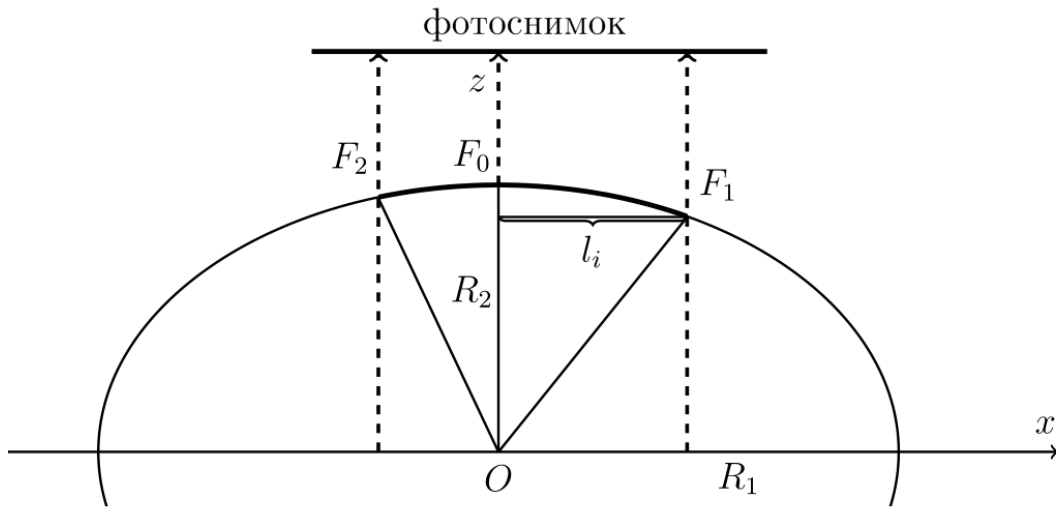


Рис. 3. Боковая проекция

Рассмотрим случай, когда боковое сечение мало отличается от окружности. Тогда эксцентриситет $e \rightarrow 0$, и существует разложение L_i по степеням малого параметра e^2 :

$$L_i = R_1 \arcsin \frac{l_i}{R_1} + \frac{1}{8} (-2R_1 \arcsin \frac{l_i}{R_1} + R_1 \sin(2 \arcsin \frac{l_i}{R_1})) \varepsilon^2 + \\ + \frac{1}{256} [-12R_1 \arcsin \frac{l_i}{R_1} + 8R_1 \sin(2 \arcsin \frac{l_i}{R_1}) - R_1 \sin(4 \arcsin \frac{l_i}{R_1})] \varepsilon^4 + o(\varepsilon^5).$$

Первый член полученного разложения, равный $R_1 \arcsin \frac{l_i}{R_1}$, отвечает круговому цилиндру, для которого выполняется равенство $R_1 = R_2$.

Длины дуги на конусе определяется согласно формуле:

$$L(A'C') = R_1 E \left[\arcsin \frac{l_{i+1}}{R_1}, \varepsilon \right]. \quad (3)$$

Площадь фигуры $A'B'C'D'$ с требуемой степенью точности может быть записана в виде:

$$S(A'B'C'D') = L(A'B')(L(A'C') + L(B'D'))/2. \quad (4)$$

Запишем выражение для площади части области, расположенной выше базисной линии G_1G_2 .

$$S^+ = \frac{R_1 \delta}{\cos \varphi} \left[\frac{1}{2} (E[\arcsin \frac{l_1}{R_1}, \varepsilon] + E[\arcsin \frac{l_n}{R_1}, \varepsilon]) + \sum_{i=2}^{n-1} E[\arcsin \frac{l_i}{R_1}, \varepsilon] \right]. \quad (5)$$

Аналогичная сумма для нижней части контура представляет площадь части области, расположенной ниже базисной линии:

$$S^- = \frac{R_1 \delta}{\cos \varphi} \left[\frac{1}{2} (E[\arcsin \frac{l'_1}{R_1}, \varepsilon] + E[\arcsin \frac{l'_n}{R_1}, \varepsilon]) + \sum_{i=2}^{n-1} E[\arcsin \frac{l'_i}{R_1}, \varepsilon] \right]. \quad (6)$$

Складывая величины $S^{(+)}$ и $S^{(-)}$, получаем выражение для площади области, ограничиваемой контуром Γ .

$$S = \frac{R_1 \delta}{\cos \varphi} \left[\frac{1}{2} (E[\arcsin \frac{l_1}{R_1}, \varepsilon] + E[\arcsin \frac{l_n}{R_1}, \varepsilon]) + \sum_{i=2}^{n-1} E[\arcsin \frac{l_i}{R_1}, \varepsilon] \right] + \\ + \frac{R_1 \delta}{\cos \varphi} \left[\frac{1}{2} (E[\arcsin \frac{l'_1}{R_1}, \varepsilon] + E[\arcsin \frac{l'_n}{R_1}, \varepsilon]) + \sum_{i=2}^{n-1} E[\arcsin \frac{l'_i}{R_1}, \varepsilon] \right], \quad (7)$$

где $\varphi = \sqrt{1 - \varepsilon^2} (\tilde{R}_1 - R_1) / H$.

Результат (7) позволяет на основе полученного из анализа фотографии области D набора величин $l_1, l_2, \dots, l_n, l'_1, l'_2, \dots, l'_n$ и параметров поверхности $\varepsilon, R_1, \tilde{R}_1, H$ вычислить искомую площадь.

Заключение

В работе предложен метод моделирования участка сложной геометрической формы, расположенного на криволинейной поверхности, по его фотоизображению. Метод базируется на предположении, что поверхность представляет собой часть эллиптического конуса. Изучен предельный случай малости эксцентриситета такого конуса, в этом случае площадь участка выражается через суммы элементарных функций.

Данный метод может быть использован для решения широкого спектра задач картографии, экологии, медицины и биологии, а также в других областях прикладных наук и на практике, когда требуется получение геометрических площадей участков, исходя из имеющихся фотографических данных. В частности, основываясь на аналитическом соотношении (7), программным

путем легко определяется площадь области, расположенной на криволинейной поверхности, по ее фотографии.

Вышеуказанный метод позволяет рассчитать фактические площади земной поверхности (включая участки, занятые лесом, кустарниками, травянистыми растениями, снежным покровом, следами воздействия пожаров и т. д.), расположенные на холмах, грядах, насыпях в гористой и холмистой местности.

Для ветеринарии и сельского хозяйства предложенный метод позволит бесконтактным образом контролировать состояние ран животных. Это в полной мере относится к диким животным, с которыми трудно непосредственно контактировать специалисту-ветеринару. Кроме того, возможен бесконтактный способ контроля повреждений плодов, форма которых близка к цилиндрической, когда они, например, движутся по конвейеру, в том числе и зерен различных злаков [15]. В лесном хозяйстве это может быть полезно для определения степени повреждения коры деревьев, в промышленности – для использования в плавильных цехах, при производстве керамической или стеклянной посуды, пластмассовых изделий.

Литература

1. Барталев С. А., Егоров В. А., Ефремов В. Ю. [и др.] Оценка площади пожаров на основе комплексирования спутниковых данных различного пространственного разрешения MODIS и Landsat-TM/ETM+ // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. – 2012. – Т. 9. – № 2. – С. 9-26.
2. Silva J., Pereira J. M. C., Cabral A. I. [et al.] An estimate of the area burned in southern Africa during the 2000 dry season using SPOT-VEGETATION satellite data // Journal of Geophysical Research: Atmospheres. – V. 108. – N. D13. – P. 34-1–34-11
3. Барталев С. А., Егоров В. А., Лупян Е. А., Уваров И. А. Оценка площади повреждений наземных экосистем Северной Евразии пожарами в 2000-2003 годах по спутниковым данным инструмента SPOT-VEGETATION // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса: Сб. статей под ред. Е. А. Лупяна и О. Ю. Лавровой, Т. II. – М.: «GRANP polygraph», 2005. – С. 354-366.
4. Ершов Д. В. Методика оценки покрытой лесом площади по спутниковым изображениям спектрорадиометра MODIS среднего пространственного разрешения // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. – 2007. – № 4. – Т. 2. – С. 217-225
5. Стыценко Ф. В., Барталев С. А., Иванова А. А. [и др.] Возможности оценки площадей лесных пожаров в регионах России на основе данных спутникового детектирования активного горения // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. – 2016. – Т. 13. – № 6. – С. 289-298.
6. Терехов А. Г. Оценка точности спутниковой технологии определения площади сельскохозяйственных масок в схеме с использованием снимков различного разрешения // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. – 2009. – № 6. – Т. 2. – С. 459-465
7. Cahoon D. R., Stocks B. J., Levine J. S. [et al.] Satellite analysis of the severe 1987 forest fires in northern China and southeastern Siberia // Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 1994. – V.99. – N. D9. – P.18627-18638.
8. Kajii Y., Kato S., Streets D. G. [et al.] Boreal forest fires in Siberia in 1998: Estimation of area burned and emissions of pollutants by advanced very high resolution radiometer satellite data / Journal of Geophysical Research: Atmospheres. – 2002. – V. 107. – N. D24. – P. 4-1–4-8.

9. McRoberts R. E., Nelson M. D., Wendt D. G. Stratified estimation of forest area using satellite imagery, inventory data, and the k-Nearest Neighbors technique // *Remote Sensing of Environment*. – 2002. – V. 82. – P. 457-468.

10. Повх В. И., Воробейчик Е. А., Беков Б. Р., Шляхова Л. А. Снижение погрешности оценок площадей озимых по данным дистанционного зондирования Земли с учетом структуры сельскохозяйственных угодий // *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса*. – 2012. – Т. 9. – №4. – С. 249-254.

11. Терентьев Д. Ю., Гиниятов И. А. Сравнительный анализ результатов оценки точности площадей земельных участков // *Геодезия и картография*. – 2014. – № 5. – С. 35-37.

12. Каленицкий А. И., Васильева Е. Е. Методика и некоторые результаты экспресс-оценки площади поверхности участков и территорий // *Геодезия и картография*. – 2011. – № 2. – С. 35-39.

13. Маркузе Ю. И., Чуклин С. И. Определение площадей земельных участков с изломанными границами с оценкой точности // *Геодезия и картография*. – 2015. – № 6. – С. 16-20.

14. Baddeley A. J., Gundersen H. J. G., Cruz-Orive L. M. Estimation of surface area from vertical sections // *Journal of Microscopy*. – 1986. – V. 142. – N. 3. – P. 259-276.

15. Алгазинов Э. К., Дрюченко М. А., Минаков Д. А., Сирота А. А., Шульгин В. А. Аппаратно-программный комплекс для анализа неоднородного потока объектов в системах фотосепарации реального времени // *Измерительная техника*. – 2014. – № 5. – С. 23-29.

MODELING SURFACES OF COMPLEX SHAPE BY THEIR PHOTOGRAPHS

S. V. Borzunov, S. D. Kurgalin, Ya. A. Turovsky

Voronezh State University

A method of modeling a complex geometric shape area located on a curved surface by its photo image is proposed. This method makes it possible to determine the area of the site and can be useful for the analysis of photographs in cartography, geology, industry, etc, as well as in cases where remote determination of the area of objects is required.

Keywords: image analysis, the area of a geometric figure.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ
МОНОКЛИННОЙ МОДИФИКАЦИИ ТРИОКСИДА МОЛИБДЕНА

С. В. Павлов, О. И. Дубровский

Воронежский государственный университет
dubrovskiy@phys.vsu.ru

Методом линейризованных присоединенных плоских волн с помощью программного пакета Wien2k проведен расчет зонной структуры моноклинной модификации триоксида молибдена β -MoO₃. Получена зонная диаграмма и парциальные плотности электронных состояний.

Ключевые слова: триоксид молибдена, электронная структура, плотность электронных состояний, метод присоединённых плоских волн, программный пакет Wien2k, обобщенное градиентное приближение, модифицированный потенциал Беке-Джонсона, моноклинная сингония, непрямозонный полупроводник.

Благодаря своему уникальному кристаллическому строению и связанным с ним свойствам, триоксид молибдена обладает большими потенциальными возможностями использования в различных областях твердотельной электроники. В связи с этим сложно переоценить важность исследования его электронной структуры, поскольку достоверная информация о ней позволяет не только прогнозировать широкий спектр электрофизических характеристик материала, но и определять пути целенаправленного улучшения последних с помощью тех или иных внешних воздействий.

MoO₃ имеет несколько кристаллических модификаций: термодинамически устойчивая орторомбическая модификация – α -MoO₃, метастабильная моноклинная модификация – β -MoO₃, а также несколько других метастабильных модификаций.

В данной работе в рамках теории функционала плотности с помощью полнопотенциального метода линейризованных присоединенных плоских волн, реализованного в программном пакете Wien2k, была рассчитана электронная структура моноклинного β -MoO₃. Параметры кристаллической структуры данного соединения были взяты с сайта Materials Project [1], исследовательской площадки, посвященной изучению свойств различных материалов. Фрагмент кристаллической структуры β -MoO₃, содержащий 4 элементарные ячейки, приведен на рис. 1. При расчете электронной структуры вначале для обменно-корреляционного потенциала использовалось обобщенное градиентное приближение (GGA), после чего для исключения недооценки ширины запрещенной зоны был произведен перерасчет с модифицированным потенциалом Беке-Джонсона (mBJ).

В работе была получена зонная структура моноклинного β -MoO₃ (рис. 2), а также рассчитаны полная и локальные парциальные плотности электронных состояний (рис. 3-5).

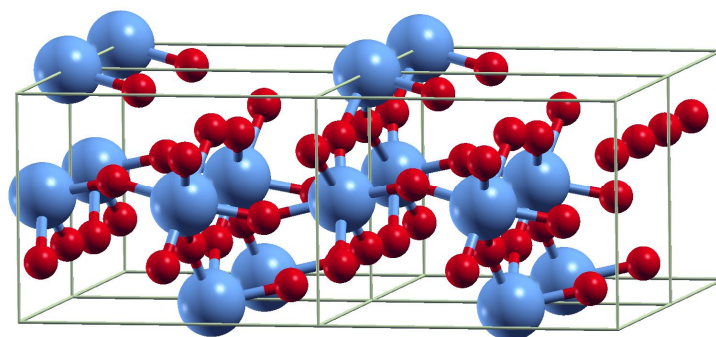


Рис. 1. Кристаллическая структура β - MoO_3 (показаны четыре элементарные ячейки), синим цветом обозначены атомы Mo, красным – атомы O

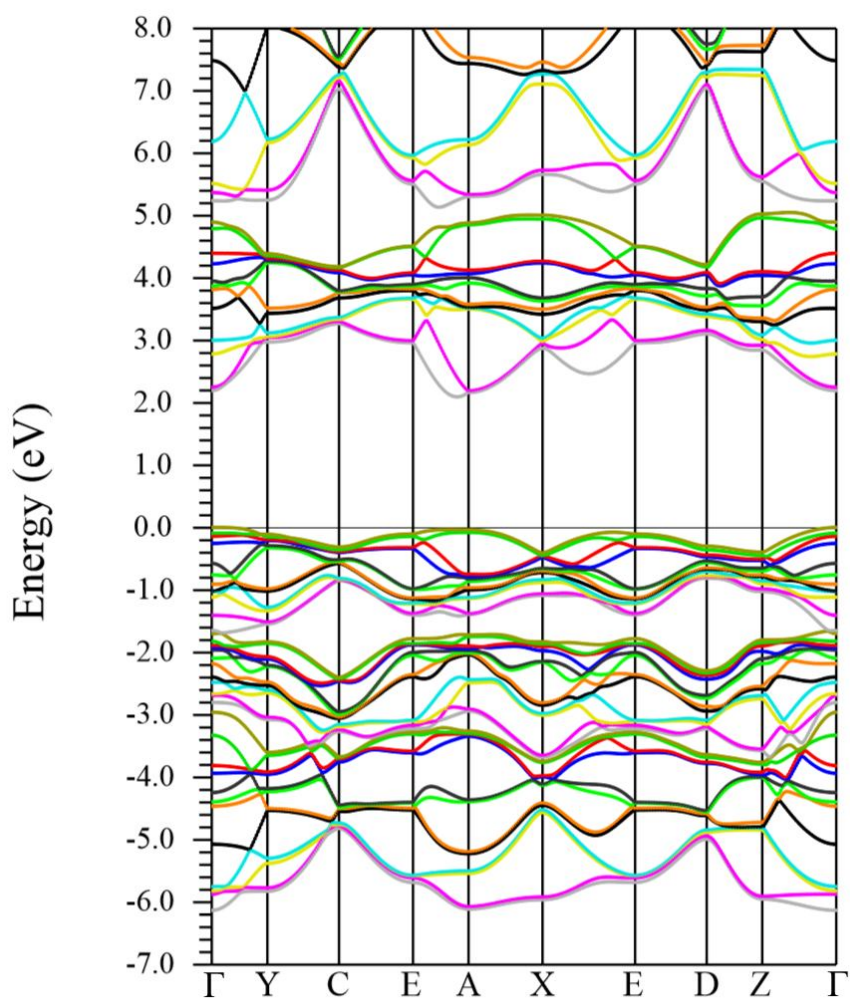


Рис. 2. Зонная диаграмма β - MoO_3

Известно, что в отличие от широко применяемых в микроэлектронике силицидов молибдена, обладающих металлическими свойствами [2], триоксид молибдена является полупроводником. При этом из рис. 2 видно, что как и в случае орторомбической модификации α - MoO_3 , рассчитанной нами ранее в работе [3], в β - MoO_3 мы наблюдаем зонную структуру, характерную для непрямозонного полупроводника: потолок валентной зоны находится в точке Γ , а дно зоны проводимости в направлении E - A , ближе к точке A зоны Бриллюэна.

Ширина запрещенной зоны составила 2.09 эВ. Это значение оказалось меньше, чем значения ширины запрещенной зоны для моноклинной фазы, полученные в экспериментальных работах: 2.9 [4] и 2.6-2.9 эВ [5]. Однако, стоит отметить, что авторы этих работ не указывали, какая именно моноклинная модификация была ими рассмотрена. С другой стороны, полученное нами значение ширины запрещенной зоны оказалось больше значения этой величины из теоретической работы – 0.74 эВ [6], в которой рассматривалась соответствующая моноклинная модификация триоксида молибдена. Таким образом, использование в нашей работе модифицированного обменно-корреляционного потенциала *mVJ* позволило существенно уменьшить систематическую недооценку ширины запрещенной зоны, как правило наблюдающуюся в расчетах, и приблизить ее значение к экспериментальным данным.

Анализируя распределение плотностей электронных состояний, можно отметить, что, как и в орторомбической модификации [3], из рис. 3-5 видно, что валентная зона образована преимущественно *p*-состояниями кислорода, а вклад *d*-состояний молибдена является относительно небольшим. В формировании зоны проводимости *d*-состояния молибдена и *p*-состояния кислорода вносят

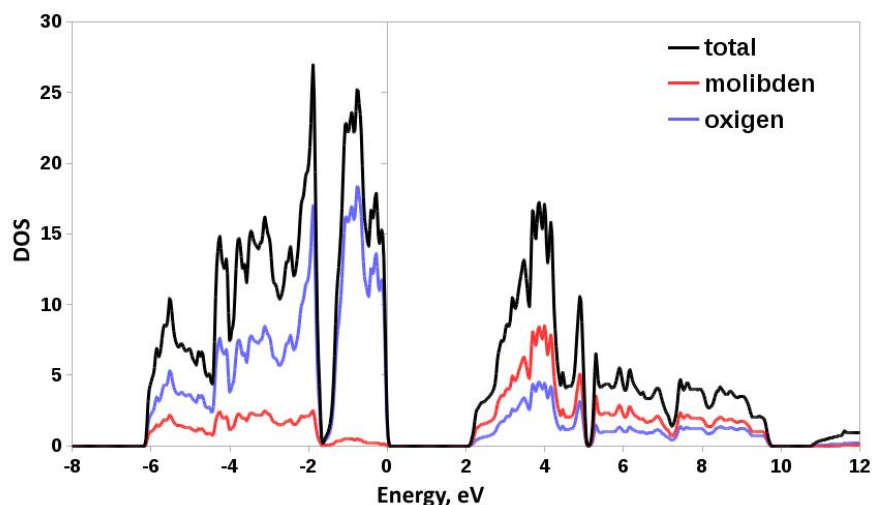


Рис 3. Полная плотность электронных состояний β - MoO_3 ; показан вклад атомов молибдена и кислорода

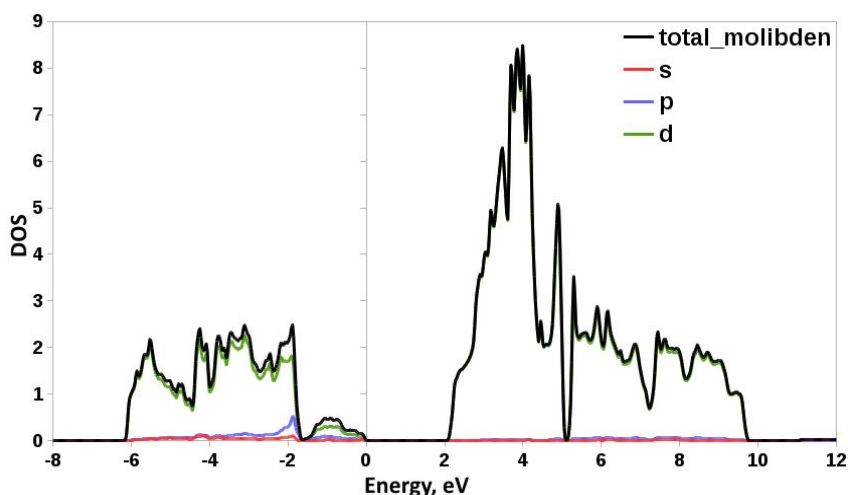


Рис 4. Полная и парциальные плотности состояний атома молибдена в β - MoO_3

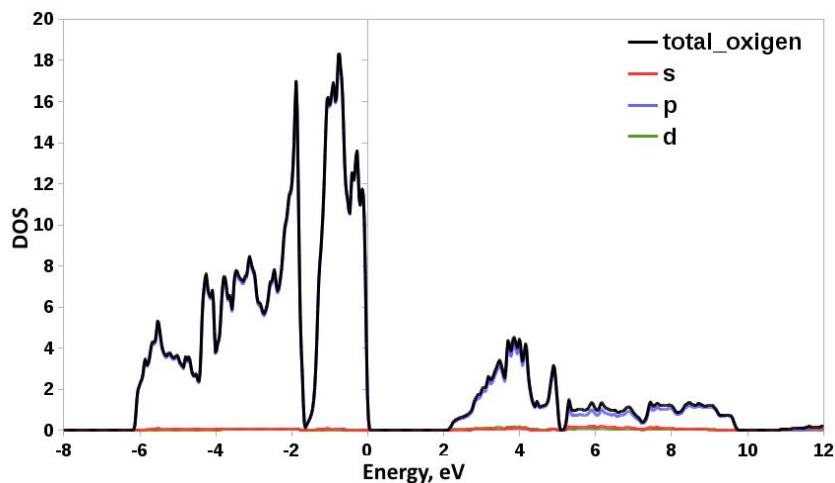


Рис 5. Полная и парциальные плотности состояний атомов кислорода в β - MoO_3

приблизительно равный вклад с небольшим преобладанием Mo d -состояний. При этом наблюдается сильная гибридизация состояний молибдена и кислорода. Отметим, что эти результаты согласуются с результатами работы [6].

Литература

1. <http://materialsproject.org/>
2. Kurganskii S. I., Pereslavl'tseva N. S., Levitskaya E. V., Yurakov Yu. A. Electronic structure of molybdenum disilicide // *Physica status solidi (b)*. 2002. V. 233. P. 306-311.
3. Павлов С. В., Дубровский О. И., Домашевская Э. П. Расчет электронной структуры орторомбической модификации триоксида молибдена // *Физико-химические процессы в конденсированных средах и на межфазных границах (ФАГРАН-2018): материалы VIII Всероссийской конференции с международным участием, посвященной 100-летию Воронежского государственного университета (г. Воронеж, 8-11 октября 2018 г.)*. – Воронеж: Научная книга, 2018. С. 316-319.
4. Carcia P. F., McCarron E. M. Synthesis and properties of thin film polymorphs of molybdenum trioxide // *Thin Solid Films*. 1987. Vol. 155. P. 53-63.
5. Simchi H., McCandless B. E., Meng T., Boyle J. H., Shafarman W. N. Characterization of reactively sputtered molybdenum oxide films for solar cell application // *J. Appl. Phys.* 2013. Vol. 114. P. 013503.
6. Sayede A. D. An ab initio LAPW study of the α and β phases of bulk molybdenum trioxide, MoO_3 / A. D. Sayede, T. Amriou, M. Pernisek, B. Khelifa, C. Mathieu // *Chemical Physics*. 2005. Vol. 316. P. 72-82.

THEORETICAL STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE MONOCLINIC MOLYBDENUM TRIOXIDE

S. V. Pavlov, O. I. Dubrovskii

Voronezh State University

Band structure of the monoclinic molybdenum trioxide has been theoretically investigated by the Wien2k package in the network of the linearized augmented plane-wave method. Band structure and local partial densities of electronic states have been obtained.

Keywords: molybdenum trioxide, electronic structure, density of electronic states, linearized augmented plane-wave method, program package Wien2k, generalized gradient approximation, modified Becke-Johnson potential, monoclinic syngony, indirect band-gap semiconductor.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ВЕРИФИКАЦИИ ПО РУКОПИСНОЙ ПОДПИСИ

Е. В. Журавлева, Д. С. Салита, Г. Р. Седашкин

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
petruhno85@mail.ru

Данная статья посвящена методу статической верификации рукописной подписи. Проведен обзор типов распознавания подписи. Рассмотрен предложенный авторами статьи алгоритм верификации рукописной подписи пользователей методом опорных векторов, дано описание его этапов, приведены результаты реализаций алгоритма на языке программирования Python.

Ключевые слова: верификация, информационная безопасность, машинное обучение, обработка изображений, рукописная подпись.

В настоящее время существуют различные способы проверки достоверности личных данных, начиная с использования подписи и заканчивая отпечатками пальцев. Подпись – это уникальный набор символов человека, написанный от руки. Проверка подписи используется в различных сферах: электронная коммерция, банковское дело, страховое дело, учет рабочего времени, контроль физического доступа, офисная деятельность и так далее.

Основная проблема, которая возникает при использовании подписи – это то, что иногда бывает трудно различить подлинную подпись от поддельной. С усовершенствованием технологий появилась возможность выявлять и количественно оценивать различные характеристики подписи. Хотя и подпись обладает меньшей стабильностью, чем другие биометрические данные, однако, задача верификации подписи актуальна в наши дни, так как подпись остается привычным способом подтверждения документов и операций.

Чтобы понять процесс распознавания подписи, нужно разбить этот процесс на некоторые этапы:

1. Ввод в систему эталона подписи. Человек несколько раз вводит подпись. По этим данным собирается статистика.
2. Определяются и анализируются уникальные характеристики эталона подписи конкретного пользователя.
3. Ввод в систему образца подписи. Аналогичным образом, выделяются характеристики образца, который ввели аналогично регистрации эталона.
4. Сравнение характеристик и оценка совпадения образца и эталона.

Существует два типа распознавания подписи [1]:

Статический метод (offline – метод). При данном методе человек оставляет подпись, например, на бумаге. Затем эту подпись фотографируют или сканируют. Далее с помощью биометрической системы анализируется изображение с подписью.

Динамический метод (online – метод). Человек в режиме реального времени расписывается, например, на графическом планшете. Во время того, как человек делает подпись, происходит считывание определенных характеристик: пространственная координата конца пера, давление конца пера на планшет, угол движения, наклон пера.

Для каждого человека при написании подписи можно выявить уникальные характеристики. В наше время существует большое число алгоритмов, при помощи которых различаются разные характеристики подписи, и позволяющие их сравнивать. Стоит отметить, что разные алгоритмы распознавания могут отображать разные характеристики.

Разработка программного обеспечения для верификации рукописной подписи разделяется на следующие этапы (рис. 1):

- Сбор данных.
- Предварительная обработка.
- Извлечение признаков.
- Классификация и верификация.

Для тестирования программного обеспечения в рамках данной работы выбрана база данных подписей University of Tehran Persian Offline Signature Dataset (далее – UTSig). UTSig содержит 115 классов, содержащих: 27 подлинных подписей; 3 образца с подписью противоположных рук и 42 простых подделки. Каждый класс соответствует одному конкретному человеку. UTSig имеет 8280 изображений, собранных студентами и аспирантами Тегеранского университета и Шарифского технического университета. Сигнатуры были отсканированы с разрешением 600 точек на дюйм и сохранены в виде 8-битных файлов Tiff.



Рис. 1. Алгоритм работы

Для эксперимента взято 10 классов с 27 подлинными простыми подписями и 42 поддельными простыми подписями.

Предобработка осуществляется по следующему алгоритму [2]:

1. Изображение подписи преобразуется из цветного в оттенок серого.
2. С помощью фильтра с изображения убираются шумы.
3. Изображение преобразуется в бинарный вид.
4. Обрезаются лишние края изображения.
5. Над изображением проводится процесс скелетизации.
6. После этого переходят к этапу извлечения признаков.



Рис. 2. Примеры подписей из базы UTSig

Выбор признаков является важным фактором, который может повлиять на ошибки первого и второго рода. На этом этапе из обработанных изображений будут извлекаться признаки для уменьшения размерности изображения. Как говорилось ранее, эти признаки делятся на локальные и глобальные [3].

Глобальные признаки показывают структуру изображения подписи и извлекаются из всего изображения. Признаки, которые использовались в данной работе: центр масс, количество черных пикселей на изображении, вертикальная проекция, горизонтальная проекция, максимум вертикальной проекции, максимум горизонтальной проекции, количество крайних точек, количество точек пересечения, отношение сторон подписи. Пример вычисления вертикальной проекции приведен ниже.

Листинг 1 – Вычисление вертикальной проекции

```
# arr – изображение подписи, h и w – высота и ширина подписи
# Pv – вертикальная проекция
def verticalProjection(arr):
    h, w = arr.shape
    Pv = []
    for j in range(h):
        tmp = 0
        for i in range(w):
            if arr[j, i] == 255: # "Черные" пиксели
                tmp = tmp + 1
        Pv.append(tmp)
    return Pv
```



Рис. 3. Пример подписи из базы

Локальные признаки извлекаются из сегментов изображения подписи. Бинарное изображение преобразовывается в размер 256x256, затем разделяется на равные сегменты размером 16x16. После этой операции подсчитывается количество черных пикселей изображения подписи.

После предобработки начинается процесс классификации и верификации.

Для реализации алгоритма была написана программа на языке программирования Python 3.7 для верификации подписи. Используются такие библиотеки для языка Python, как Skimage, OpenCV для обработки изображений, NumPy, для расчетов, Scikit-Learn для классификации. Набор данных разделяется на обучающую и тестовую выборки. Классификация осуществляется методом опорных векторов [4].

В данной работе были рассмотрены типы распознавания подписи, реализован алгоритм верификации по рукописной подписи на языке программирования Python. В результате работы алгоритма были получены следующие значения:

- Ошибка первого рода (FFR) – 0,11;
- Ошибка второго рода (FAR) – 0,06;
- Точность верификации (Accuracy) – 0,73.

В результате эксперимента были получены следующие данные (таблица).

Результаты верификации

№ п/п	Точность на тестовой выборке, %	Точность на валидирующей выборке, %	FAR, %	FRR, %
1	95	86	11	10
2	96	84	7	13
3	91	84	11	12
4	93	85	9	9
5	95	83	10	19
6	92	85	11	10
7	95	87	10	16
8	93	83	11	11
9	91	85	7	15
10	95	83	8	17
среднее	93,6	84,5	9,5	13,2

Выходная функция должна показать нам, разрешён ли доступ в систему или запрещен. Поэтому в качестве выходной функции используется бинарная классификация с одним выходом.

Литература

1. R. Plamondon and S. N. Srihari, "On-line and offline handwritten character recognition: A comprehensive survey," IEEE. Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, Vol. 22, no. 1, pp. 63-84, 2000.
2. Р. Гонсалес. Цифровая обработка изображений / Р. Гонсалес, Р. Вудс – М.: Техносфера, 2005. – 1072.
3. V. Nguyen, M. Blumenstein, G Leedham. Global Features for the Off-Line Signature Verification Problem // 10th International Conference on Document Analysis and Recognition (Barcelona, Spain, 26-29 July 2009) – Barcelona, 2009. – p. 1300 – 1304.
4. Вьюгин В. В. Математические основы теории машинного обучения и прогнозирования / В. В. Вьюгин – М.: МЦНМО, 2013. - 387 с.

THE DEVELOPMENT OF AN ALGORITHM FOR HANDWRITTEN SIGNATURE VERIFICATION

E. V. Zhuravleva, D. S. Salita, G. R. Sedashkin

Military Training and Research Center Air Force "Air Force Academy
n. a. prof. N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin", Voronezh

This article is devoted to the method of statistical verification of handwritten signature. The review of signature recognition types is carried out. The algorithm of verification by the method of support vectors is considered, the description of its stages given, the results of the programming language Python.

Keywords: verification, Information Security, machine learning, image processing, handwritten signature.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ
СОЕДИНЕНИЯ Al_3Si В. Р. Иминова¹, Е. Р. Лихачев²¹Воронежский государственный университет²Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж
viminova@inbox.ru

В данной работе представлены результаты расчета электронной структуры ранее неизвестного соединения Al_3Si , которое недавно было получено экспериментально методами ионно-лучевого и магнетронного распыления. Расчет проведен в рамках ЛППВ метода. Совпадение результатов с экспериментальными данными привели к выводу о возможности существования соединения с химической формулой Al_3Si .

Ключевые слова: электронная структура, плотность электронных состояний, рентгеновский эмиссионный спектр, система алюминий-кремний, силумины, нанокомпозит, метод ЛППВ.

Силумины представляют собой соединения и сплавы системы алюминий-кремний. На рис. 1 приведена фазовая диаграмма системы Al-Si [1]. В двойных сплавах Al-Si эвтектика состоит из твердого раствора и кристаллов практически чистого кремния. Эвтектическая точка находится при 12.2 ± 0.1 атомных % алюминия [1]. На вставках иллюстрируется растворимость компонентов в твердом состоянии на основе алюминия и кремния.

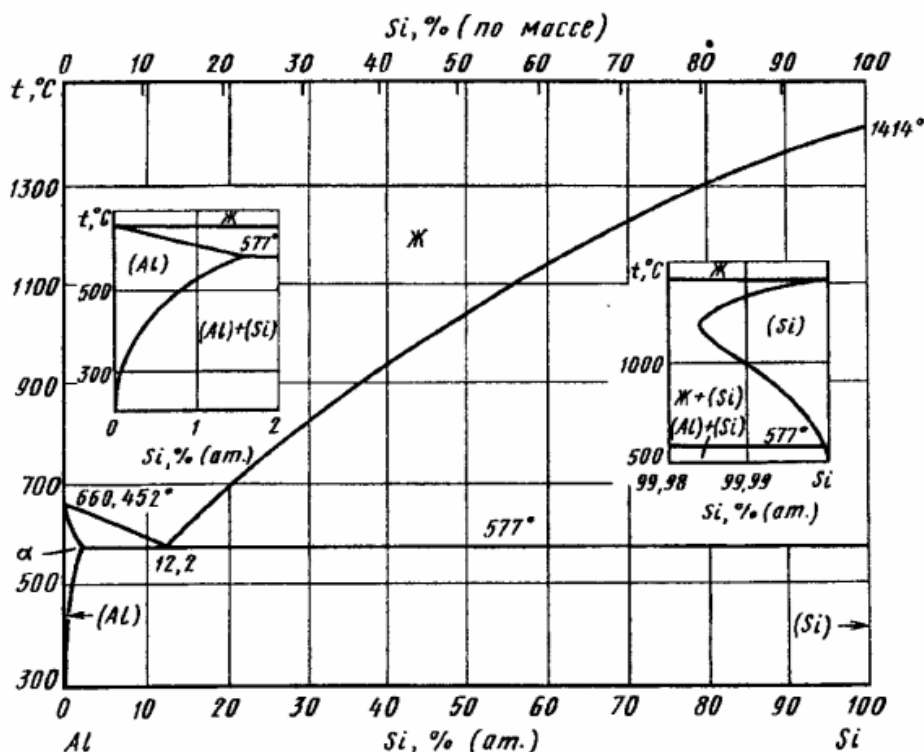


Рис. 1. Диаграмма состояний системы Al-Si [1]

Бинарная система Al-Si считается хорошо исследованной экспериментально и теоретически. Однако развитие нанотехнологий позволяет создавать материалы и структуры с новыми свойствами, такие, как, например, атомные кластеры [2, 3], нанослои [4, 5], клатратные кристаллы [6].

Авторы работ [7, 8] экспериментально исследовали пленки системы Al-Si на подложке Si (100) вблизи состава $Al_{0,75}Si_{0,25}$, которые были получены в неравновесных условиях ионно-лучевого и магнетронного распыления.

Было показано, что магнетронное распыление приводит к образованию в поликристаллической Al-матрице нанокристаллов кремния размером ~ 25 нм и упорядоченного твердого раствора Al_3Si . Пленки $Al_{0,75}Si_{0,25}$, полученные ионно-лучевым напылением, содержали только упорядоченный твердый раствор Al_3Si .

До настоящего времени в научной литературе не сообщалось о существовании соединения с химической формулой Al_3Si . В данной работе, чтобы подтвердить/опровергнуть выводы [7, 8], мы провели теоретическое исследование электронной структуры соединения Al_3Si и сравнили результаты с экспериментальными данными [7].

Расчет электронной структуры был проведен методом линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) в программном пакете Wien2k [9] с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) для обменно-корреляционной энергии. Для более точного расчета ширины запрещенной зоны кремния E_g был использован потенциал mbj [9], который позволяет получить величину E_g , близкую к экспериментальным значениям и рассчитанным методами псевдопотенциала или ОПВ [10]. По результатам зонного расчета в дипольном приближении вычислялась интенсивность рентгеновских эмиссионных спектров. Кристаллические параметры исследованных структур приведены в таблице.

Кристаллические параметры исследованных структур

Вещество	Параметр решетки, Å	Пространственная группа
Si	3,57 [11,12]	Fd3m
Al	3,57 [11]	Fm3m
Al_3Si	3,57 [7]	Fm3m

На рис. 2 приведены спектры полной и локальных парциальных плотностей состояний кристаллического кремния (a) и Si в соединении Al_3Si (b), рассчитанные в приближении GGA.

Кривая плотности s -состояний в валентной зоне кремния имеет характерное расщепление на две компоненты у дна валентной зоны. В спектре плотности s -состояний Si в соединении Al_3Si такого расщепления нет. Это связано с отсутствием коротких связей Si-Si в соединении Al_3Si .

На рис. 3 приведены плотности электронных состояний кристаллического Al (a) и алюминия в соединении Al_3Si (b).

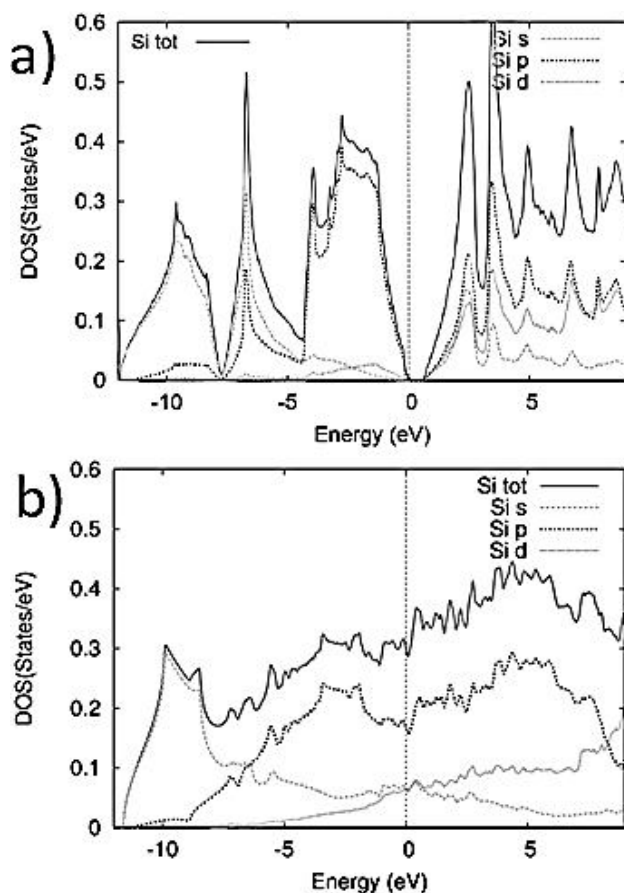


Рис. 2. (а) Полная и парциальные плотности электронных состояний кристаллического Si. (б) Полная и парциальные плотности электронных состояний кремния в соединении Al_3Si

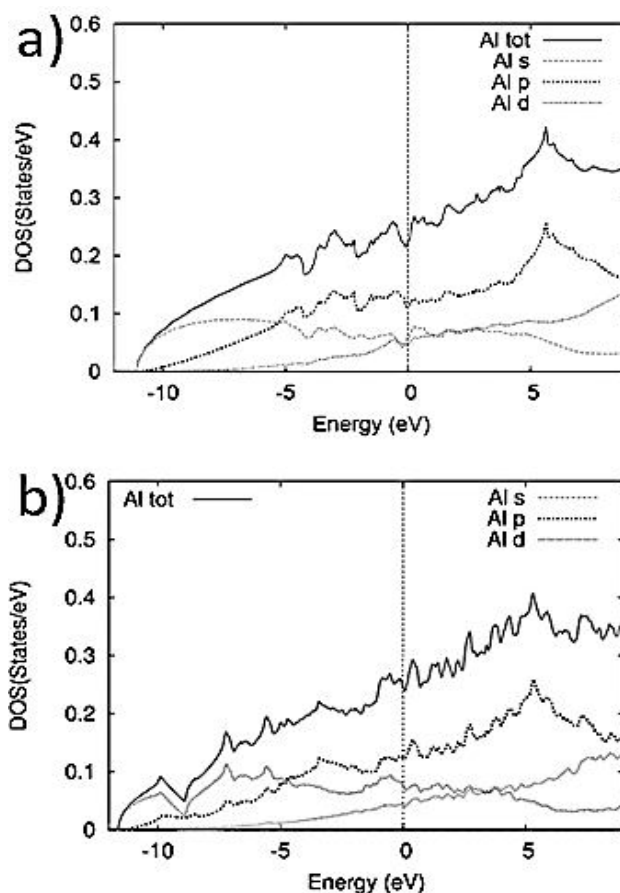


Рис. 3. (а) Полная и парциальные плотности электронных состояний кристаллического алюминия. (б) Полная и парциальные плотности электронных состояний Al в соединении Al_3Si

Анализ спектров полной ПЭС показывает, что для элементарного Al практически во всей валентной полосе характерна параболическая зависимость. В то же время в спектре плотности состояний Al в соединении Al_3Si зависимость $\sim E^{1/2}$ не так продолжительна. Причина этого заключается в том, что в соединении Al_3Si в плотность состояний вклад дает и кремний.

Также было выявлено, что плотность Al 3s-состояний вблизи уровня Ферми в соединении Al_3Si меньше, чем в чистом алюминии. Такого рода изменения указывают на перераспределении электронной плотности в средней части валентной зоны алюминия при формировании фазы Al_3Si .

На рис. 4 приведены Si $L_{2,3}$ -спектры в соединении Al_3Si и в кристаллическом кремнии.

Согласно дипольным правилам отбора, спектры Si $L_{2,3}$ отражают распределение s- и d-состояний кремния в валентной зоне. Анализ результатов показывает, что распределение этих состояний в пленке отличается от кристаллического кремния. Такой результат согласуется с экспериментальными данными [7].

Рентгеновские эмиссионные спектры имеют те же свойства, которые мы выявили в ПЭС. В спектрах кристаллического кремния наблюдаются два максимума при энергиях -7.5 эВ и -10.4 эВ, которые соответствуют первым двум валентным подзонам кремния. В спектрах соединения имеется только один максимум при энергии ~ -8.5 эВ. Это возможно при большом содержании металла в силициде, то есть в низших силицидах типа Me_3Si и Me_2Si , в которых отсутствуют короткие связи Si-Si.

На рис. 5 приведены Al $L_{2,3}$ -спектры в соединении Al_3Si и металлическом алюминии.

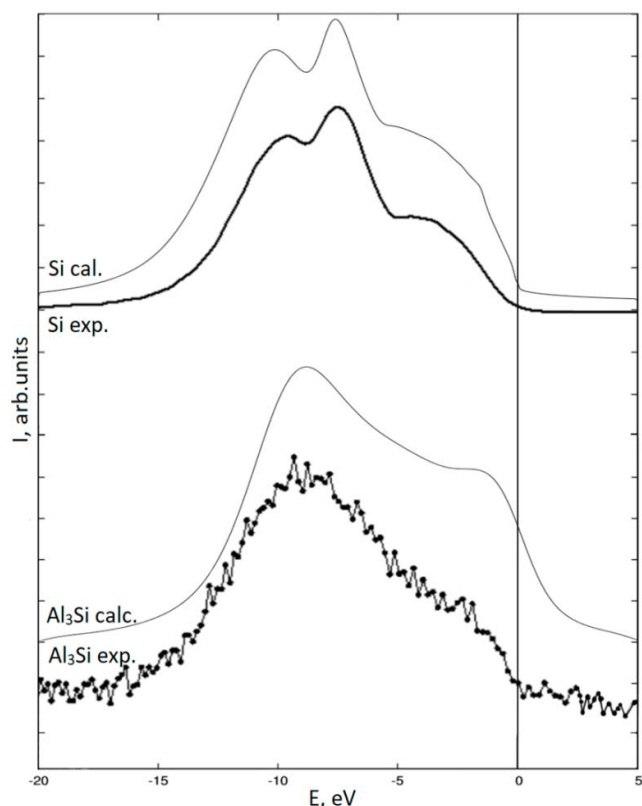


Рис. 4. Рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры в соединении Al_3Si в сравнении со спектром кристаллического кремния

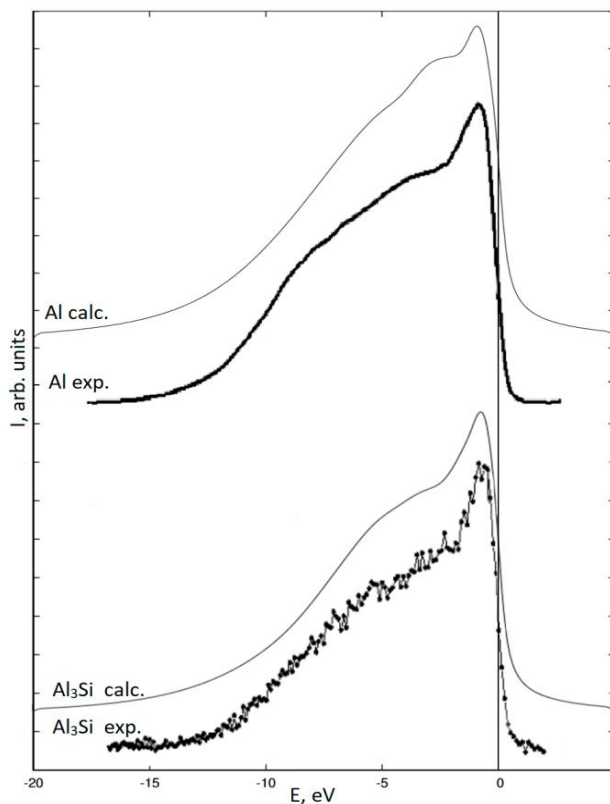


Рис. 5. Рентгеновские эмиссионные Al $L_{2,3}$ -спектры в соединении Al_3Si в сравнении со спектром металлического алюминия

Видно, что при $E \leq -12$ эВ есть "хвост" Al $L_{2,3}$ -спектра, затем при $E > -12$ эВ с ростом энергии интенсивность растет как $E^{1/2}$, далее при $E \sim -1$ эВ наблюдается выраженный максимум, а затем резкий спад интенсивности выше уровня Ферми.

Можно сделать вывод, что Al $L_{2,3}$ -спектры соединения и чистого алюминия отличаются не так сильно, как спектры кремния. Отличие состоит лишь в том, что наблюдается некоторое возрастание относительной интенсивности и большая выраженность главного максимума в соединении по сравнению с металлическим алюминием.

Таким образом, наши расчеты подтверждают возможность самоорганизации структуры пленки состава $Al_{0,75}Si_{0,25}$, растущей на подложке Si (100) в условиях ионно-лучевого и магнетронного распыления, на основе упорядоченного твердого раствора Al_3Si .

Литература

1. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Т.1. Под ред. Н. П. Лякишева. М.: Машиностроение, 1996. – 992 с.
2. Курганский, С. И. Геометрическая структура и спектральные характеристики электронных состояний кремниевых наночастиц / С. И. Курганский, Н. А. Борщ // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38. – № 5. – С. 580-584.
3. Борщ, Н. А. Пространственная и электронная структура германий-танталовых кластеров TaGe_n^- ($n = 8 - 17$) / Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – № 11. – С. 2259-2264.
4. Kurganskii, S. I. Electronic structure of molybdenum disilicide / S. I. Kurganskii, N. S. Pereslavl'tseva, E. V. Levitskaya, Yu. A. Yurakov // Physica status solidi (b). – 2002. – V. 233. – № 2. – P. 306-311.
5. Electronic structure of rhenium disilicides / S. I. Kurganskii, N. S. Pereslavl'tseva, E. V. Levitskaya, Yu. A. Yurakov, I. G. Rudneva, E. P. Domashevskaya // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2002. – V. 14, № 27. – P. 6833-6839.
6. Борщ, Н. А. Электронная структура и спектральные характеристики Zn-замещенных клатратных силицидов / Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45. – № 6. – С. 729-739.
7. Терехов, В. А. О возможности формирования метастабильной фазы Al_3Si в композитных пленках Al-Si , полученных ионно-лучевым и магнетронным напылением / В. А. Терехов, Д. С. Усольцева, О. В. Сербин, И. Е. Занин, Т. В. Куликова, Д. Н. Нестеров, К. А. Барков, А. В. Ситников, С. К. Лазарук, Э. П. Домашевская // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2018. – Т. 20. – № 1. – С. 135-147.
8. Терехов, В. А. Особенности фазообразования и электронного строения в пленочных композитах $\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x$ при магнетронном и ионно-лучевом напылении / В. А. Терехов, Д. С. Усольцева, О. В. Сербин, И. Е. Занин, Т. В. Куликова, Д. Н. Нестеров, К. А. Барков, А. В. Ситников, С. К. Лазарук, Э. П. Домашевская // Физика твердого тела. – 2018. – Т. 60, вып. 5. – С. 1004-1010.
9. Schwarz, K. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences / K. Schwarz, P. Blaha, G. K. H. Madsen // Comput. Phys. Commun. – 2002. – V. 147. – № 1-2. – С. 71-76.
10. Farberovich, O. V. Problems of the OPW method. II. Calculation of the band structure of ZnS and CdS / O. V. Farberovich, S. I. Kurganskii, E. P. Domashevskaya // Physica status solidi (b). – 1980. – V. 97. – № 2. – P. 631-640.
11. Торопов, Н. А. Элементарный кремний / Н. А. Торопов, И. Ф. Андреев. – Л.: изд-во ЛТИ, 1963. – 97 с.
12. Рабинович, В. А. Краткий химический справочник / В. А. Рабинович, З. Я. Хавин. – Л.: Химия, 1978. – 392с.

COMPUTER SIMULATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE Al_3Si COMPOUND

V. R. Iminova¹, E. R. Likhachev²

¹Voronezh State University

²Military Educational and Scientific Center of the Air Force
“N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

In this paper the results of calculating the electronic structure of a previously unknown Al_3Si compound, which was recently obtained experimentally by ion beam and magnetron sputtering are presented. The calculation was carried out within the LAPW method. The coincidence of the results with the experimental data led to the conclusion that a compound with the chemical formula Al_3Si can exist.

Keywords: electronic structure, density of states, emission spectrum, aluminum-silicon system, silumins, compound, method LAPW.

АНАЛИЗ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СХЕМЫ УСИЛИТЕЛЯ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ ПО НАПРЯЖЕНИЮ МЕТОДОМ ГРАФОВ

А. А. Катрахова, В. С. Купцов, Д. О. Рыбалко

Воронежский государственный технический университет
danil.ribalko@yandex.ru

В работе произведен анализ электрической схемы усилителя с отрицательной обратной связью по напряжению методом графов.

Ключевые слова: метод графов, отрицательная обратная связь, усилитель.

Известно, что метод графов представляет собой эффективное средство анализа электрических цепей. Его применение позволяет в ряде случаев сохранить объем работы примерно на порядок по сравнению с обычными методами. Граф цепи можно представить себе как карту, иллюстрирующую процессы, протекающие в электрической схеме. Граф наглядно демонстрирует кратчайший путь между любыми двумя точками.

При решении задач анализа электрических цепей обычно составляют (на основе законов Кирхгофа) систему уравнений для переменных величин в цепи. Полученная система уравнений затем решается одним из следующих способов: методом подстановки, методами матричной алгебры, топологическими методами, либо методом графов. Граф представляет собой схему, состоящую из узлов (точек), соединенных направленными ветвями, и выражающую систему алгебраических уравнений. Узлы графа соответствуют переменным (параметрам), а ветви – коэффициентам при этих переменных. С помощью правил операций над графами, которые позволяют получить все возможные решения системы уравнений, можно найти передаточные функции, характеристические уравнения или связь между любыми двумя переменными. Для этого нужно упростить граф путем последовательного исключения его лишних частей, либо (при нахождении передаточной функции) воспользоваться правилом Мэсона (правилом нахождения контуров) [1]. Метод графов особенно эффективен при анализе электрических цепей с обратными связями. При этом предполагается, что схема содержит какой-либо элемент с односторонней проводимостью (например, электронную лампу или транзистор).

Рассмотрим ламповый усилитель с отрицательной обратной связью по напряжению, изображенный на рис. 1, а его эквивалентная схема для переменного тока – на рис. 2. Предположим, что напряжение обратной связи снимается с высокоомного потенциометра, при этом токи в сопротивлениях R_1 и R_2 относительно малы и ими можно пренебречь. Граф схемы, приведенный на рис. 3, содержит один контур обратной связи. Усиление напряжения в схеме равно

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{-S[r_a/(r_a + Z_L)]Z_L}{1 + S[r_a/(r_a + Z_L)][Z_L R_2/(R_1 + R_2)]}$$

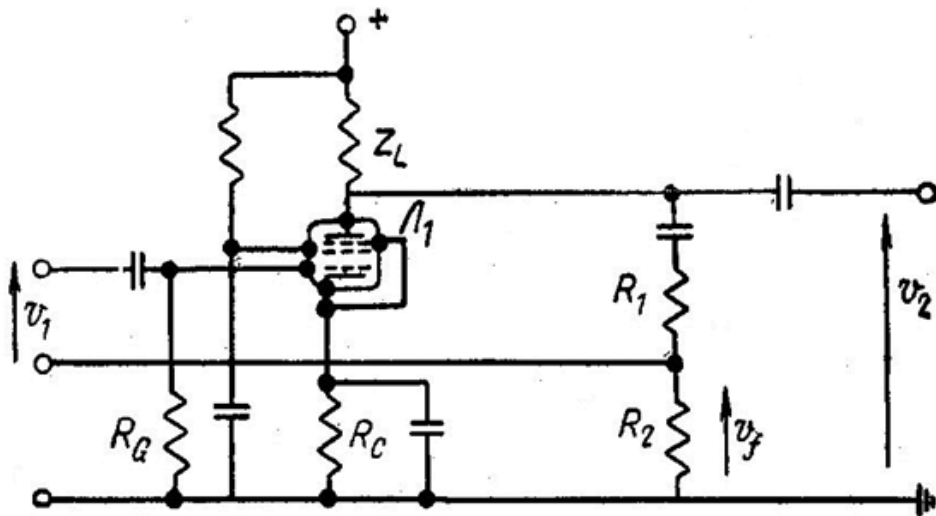


Рис. 1. Ламповый усилитель с отрицательной обратной связью по напряжению

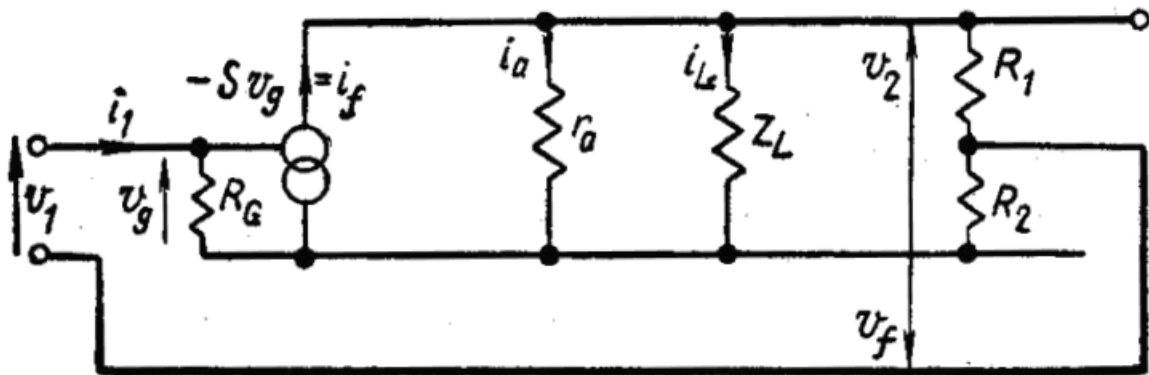


Рис. 2. Эквивалентная схема усилителя на рис. 1

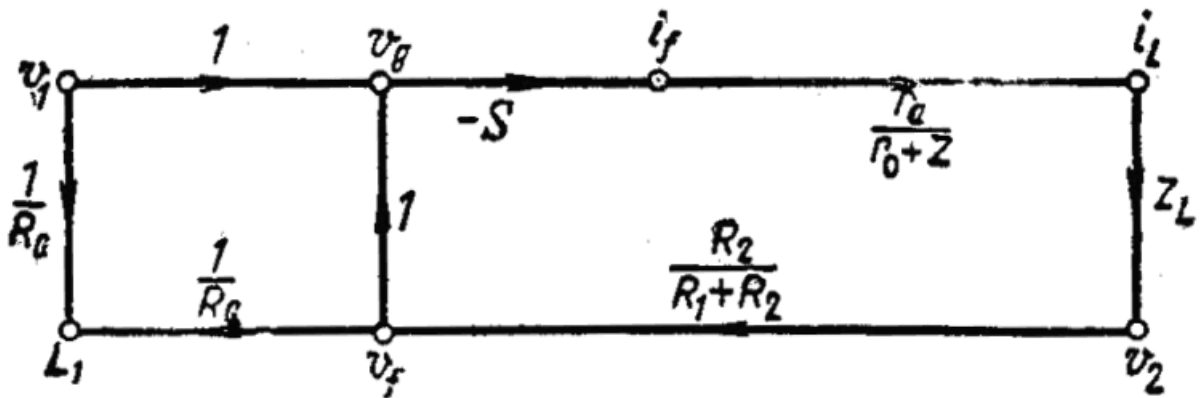


Рис. 3. Граф усилителя на рис. 1

Упрощая, получим

$$\frac{v_2}{v_1} = G = \frac{-S r_a Z_L}{(r_a + Z_L) + S r_a [R_2 / (R_1 + R_2)] Z_L}$$

Отношение $R_2 / (R_1 + R_2)$ называется коэффициентом обратной связи и обозначается через β . Кроме того, $S r_a = \mu$ равно статическому коэффициенту усиления лампы. Принимая эти обозначения, напишем выражение усиления схемы в новой форме:

$$\frac{v_2}{v_1} = G = \frac{-\mu Z_L}{r_a + Z_L(1 + \mu\beta)}$$

Логарифмируя это выражение, получаем (без учета знака «минус»)

$$\ln v_2 - \ln v_1 = \ln \mu Z_L - \ln(r_a + Z_L + \mu\beta Z_L).$$

Если величина входного напряжения остается постоянной и меняется только коэффициент усиления лампы μ , то можно написать

$$\frac{\partial v_2}{v_2} = \frac{Z_L \partial \mu}{\mu Z_L} - \frac{\beta Z_L \partial \mu}{r_a + Z_L + \mu\beta Z_L},$$

Или

$$\frac{\partial v_2}{v_2} = \frac{Z_L \partial \mu (r_a + Z_L + \mu\beta Z_L) - \beta Z_L \partial \mu (\mu Z_L)}{\mu Z_L (r_a + Z_L + \mu\beta Z_L)},$$

откуда,

$$\frac{\partial v_2}{v_2} = \frac{(r_a + Z_L) \partial \mu}{\mu (r_a + Z_L + \mu\beta Z_L)}.$$

Из последнего выражения видно, что если изменение коэффициента усиления лампы равно $\partial \mu / \mu$, то изменение выходного напряжения составит часть от изменения μ , равную

$$\frac{r_a + Z_L}{r_a + Z_L + \mu\beta Z_L}.$$

Если член $\mu\beta Z_L$ достаточно велик, то эта величина много меньше единицы. Таким образом, отрицательная обратная связь обеспечивает стабилизацию коэффициента усиления при изменениях параметров лампы.

Входное и выходное сопротивления такого усилителя могут быть найдены непосредственно из графа. Здесь, отрицательная обратная связь вызывает увеличение входного сопротивления и уменьшения выходного сопротивления.

Литература

1. Абрахамс Дж. Анализ электрических цепей методом графов / Дж. Абрахамс, Дж. Каверли. – М.: Мир, 1967. – 175 с.
2. Оре О. Теория графов / О. Оре. – М.: Наука, 1980.
3. Ионкин П. А. Основы построения и преобразования графов для расчета электрических цепей / П. А. Ионкин, А. А. Соколов // Электричество. – 1984. – № 5.

ANALYSIS OF THE ELECTRIC BOOSTER CIRCUIT WITH NEGATIVE VOLTAGE FEEDBACK BY THE GRAPH METHOD

A. A. Katrachowa, V. S. Kuptsov, D. O. Rybalko

Voronezh State Technical University

In the work, the analysis of the electric booster circuit with a negative feedback voltage by the graph method was carried out.

Keywords: graph method, negative feedback, amplifier.

ЗАДАЧА УПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЕМ МАТЕРИАЛЬНОЙ ТОЧКИ ПРИ НЕПРЕРЫВНОМ УПРАВЛЯЮЩЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ

О. С. Дудкин, Ю. В. Коряпаева, Н. Е. Красова, Е. В. Лебедев

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия
имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж
malena1975@mail.ru

В работе рассматривается задача оптимального управления движением материальной точки в случае, когда управляющие воздействия являются непрерывными функциями. При решении этой задачи использованы классические методы вариационного исчисления. В результате получены выражения для фазовых переменных, управляющей функции, построены их графики при различных значениях малого параметра. Найдены моменты времени перехода с торможения точки на разгон для разных значений малого параметра.

Ключевые слова: вариационное исчисление, малый параметр, сингулярные возмущения.

Наряду с задачами, в которых необходимо определить экстремум функции, в задачах физики и технических дисциплин нередко возникает необходимость найти экстремум величины особого рода – функционала. Вариационное исчисление изучает методы, позволяющие находить экстремумы функционалов.

Толчком к развитию этого раздела математики послужила поставленная в 1696 году Иоанном Бернулли проблема, обычно называемая задачей о брахистохроне. Однако в самостоятельную математическую дисциплину с собственными методами исследования вариационное исчисление оформилось после фундаментальных Л. Эйлера (1707-1783), который считается основоположником этого раздела математики.

В пятидесятых годах двадцатого века многочисленные потребности прикладных дисциплин (техники, экономики и др.) стимулировали постановку и рассмотрение нового класса экстремальных задач, получивших название задач оптимального управления.

Для решения задач оптимального управления используется вариационное исчисление, методы которого можно условно разделить на классические и современные. К классическим методам относятся методы, основанные на уравнениях Эйлера, Лагранжа, Якоби, а к современным – принцип максимума Понтрягина.

При моделировании ряда процессов в различных областях научного знания возникают задачи оптимального управления, содержащие малый параметр в некоторых слагаемых динамической системы. Появление этого параметра может повлечь серьезные изменения в ходе и результате решения задачи, в связи с чем возникает разделение возмущений на регулярные и сингулярные.

В течение последних шестидесяти лет внимание многих авторов привлекали дифференциальные уравнения, содержащие малый параметр при производной. Подобные возмущения относятся к классу сингулярных.

Интерес к подобным задачам обусловлен интенсивным развитием таких областей, как теория автоматического регулирования, теория нелинейных колебаний, квантовая механика, гидродинамика, кинетика и др. Эти уравнения естественным образом возникают при моделировании и исследовании объектов различной природы, характерной особенностью которых является способность совершать одновременно быстрые и медленные движения, например, гироскопические и электромеханические системы.

В данной статье рассматривается одна из задач оптимального управления, которая принадлежит к классу сингулярно возмущенных, так как содержит малый параметр при одной из производных динамической системы. Управляющая функция берется из класса непрерывных функций, поэтому при решении использованы классические методы.

Постановка задачи

В классе непрерывных управляющих воздействий рассмотрим следующую задачу оптимального управления движением материальной точки:

$$\begin{cases} y' = z, \\ \varepsilon z' = -z + u, \end{cases} \quad (1)$$

$$y(0) = y^0, \quad z(0) = 0, \quad y(T) = 0, \quad z(T) = 0, \quad (2)$$

$$J(u) = \frac{1}{2} \int_0^T u^2(t) dt \rightarrow \min \quad (3)$$

Здесь ε – малый положительный параметр. Таким образом, задача относится к классу сингулярно возмущенных. Переменные y, z – фазовые, $u(t)$ – непрерывная управляющая функция, T – конечный момент времени.

Решение поставленной задачи

Запишем гамильтониан для данной задачи: $H = \frac{1}{2} u^2(t) - \lambda_1 z - \frac{\lambda_2}{\varepsilon} (-z + u)$.

Далее выпишем условия Эйлера-Лагранжа, которые для рассматриваемой задачи примут вид:

$$\begin{cases} \lambda_1' = 0, \\ \lambda_2' = \lambda_1 - \frac{\lambda_2}{\varepsilon}, \\ u - \frac{\lambda_2}{\varepsilon} = 0, \\ y' = z, \\ \varepsilon z' = -z + u, \end{cases} \quad (4)$$

Система (4) влечет $\lambda_1 = c_1$, $\lambda_2 = \varepsilon c_1 + c_2 e^{-t/\varepsilon}$, $u = c_1 + \frac{c_2 e^{-t/\varepsilon}}{\varepsilon}$, $y' = z$,

$$z' + \frac{z}{\varepsilon} = \frac{c_1}{\varepsilon} + \frac{c_2 e^{-t/\varepsilon}}{\varepsilon^2}.$$

При решении последнего, а затем предпоследнего, линейных дифференциальных уравнений в системе получим:

$$z = c_1 + \frac{c_2 t e^{-t/\varepsilon}}{\varepsilon^2} + c_3 e^{-t/\varepsilon}, \quad y = c_1 t - \frac{c_2 t e^{-t/\varepsilon}}{\varepsilon} - c_2 e^{-t/\varepsilon} - \varepsilon c_3 e^{-t/\varepsilon} + c_4.$$

Пользуясь начальными условиями (2), найдем значения постоянных c_1, c_2, c_3, c_4 . Рассмотрим этот процесс более подробно:

$$y(0) = y^0 \Rightarrow c_4 - \varepsilon c_3 - c_2 = y^0, \quad z(0) = 0 \Rightarrow c_1 + c_3 = 0,$$

$$y(T) = 0 \Rightarrow c_1 T + c_4 - \frac{c_2 T e^{-T/\varepsilon}}{\varepsilon} - c_2 e^{-T/\varepsilon} - \varepsilon c_3 e^{-T/\varepsilon} = 0,$$

$$z(T) = 0 \Rightarrow c_1 + \frac{c_2 T e^{-T/\varepsilon}}{\varepsilon^2} + c_3 e^{-T/\varepsilon} = 0.$$

Получим систему линейных уравнений относительно переменных c_1, c_2, c_3, c_4 :

$$\begin{cases} c_4 - \varepsilon c_3 - c_2 = y^0, \\ c_1 + c_3 = 0, \\ c_1 T + c_4 - \frac{c_2 T e^{-T/\varepsilon}}{\varepsilon} - c_2 e^{-T/\varepsilon} - \varepsilon c_3 e^{-T/\varepsilon} = 0, \\ c_1 + \frac{c_2 T e^{-T/\varepsilon}}{\varepsilon^2} + c_3 e^{-T/\varepsilon} = 0. \end{cases}$$

Далее, из второго уравнения следует, что $c_1 = -c_3$. Если подставить это соотношение в четвертое уравнение системы, то получим $c_2 = \frac{\varepsilon^2 c_3 (e^{T/\varepsilon} - 1)}{T}$.

Полученные соотношения для c_1 и c_2 подставим в третье уравнение системы и найдем $c_4 = c_3 T + \varepsilon c_3 + \frac{\varepsilon^2 c_3}{T} - \frac{\varepsilon^2 c_3}{T} e^{-T/\varepsilon}$.

Далее, все выражения для c_1, c_2, c_4 подставим в первое уравнение системы и находим c_3 :

$$c_3 = \frac{y^0}{T + \frac{2\varepsilon^2}{T} - \frac{\varepsilon^2}{T} (e^{T/\varepsilon} + e^{-T/\varepsilon})},$$

ИЛИ

$$c_3 = \frac{y^0}{D},$$

где $D = T + \frac{2\varepsilon^2}{T} - \frac{\varepsilon^2}{T}(e^{T/\varepsilon} + e^{-T/\varepsilon})$.

Таким образом, оптимальный процесс рассматриваемой задачи выглядит следующим образом:

$$z^* = c_1 + \frac{c_2 t e^{-t/\varepsilon}}{\varepsilon^2} + c_3 e^{-t/\varepsilon}, \quad y^* = c_1 t - \frac{c_2 t e^{-t/\varepsilon}}{\varepsilon} - c_2 e^{-t/\varepsilon} - \varepsilon c_3 e^{-t/\varepsilon} + c_4, \quad u^* = c_1 + \frac{c_2 e^{-t/\varepsilon}}{\varepsilon},$$

где входящие в выражения постоянные определяются по формулам:

$$c_1 = -\frac{y^0}{D}, \quad c_2 = \frac{\varepsilon^2 \cdot y^0}{T \cdot D} \cdot (e^{T/\varepsilon} - 1), \quad c_3 = \frac{y^0}{D}, \quad c_4 = \left(T + \frac{\varepsilon^2}{T} - \frac{\varepsilon^2}{T} e^{-T/\varepsilon} + \varepsilon \right) \cdot \frac{y^0}{D}.$$

На рисунках ниже изображены графики фазовых траекторий y (рис. 1) и z (рис. 2), а также управления u (рис. 3) при различных значениях малого параметра ε и при $T = 1, y^0 = 1$.

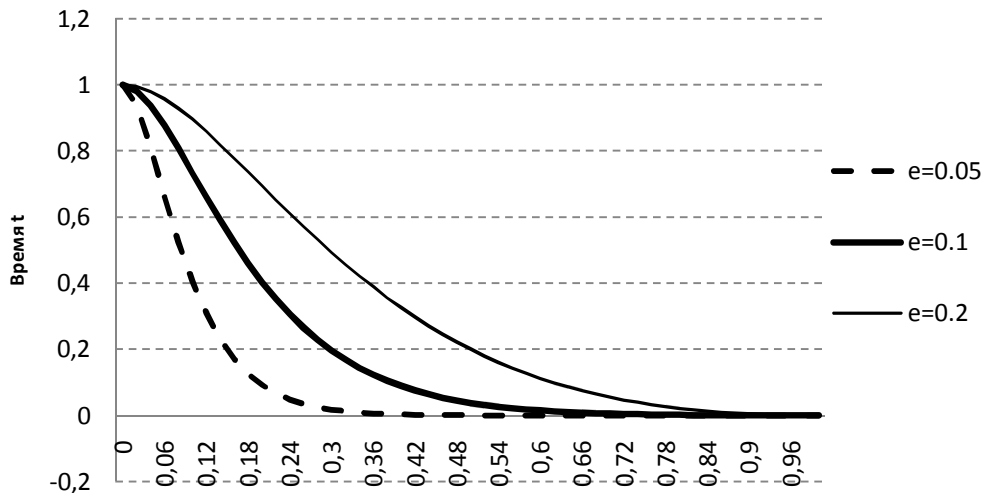


Рис. 1. Графики траектории y

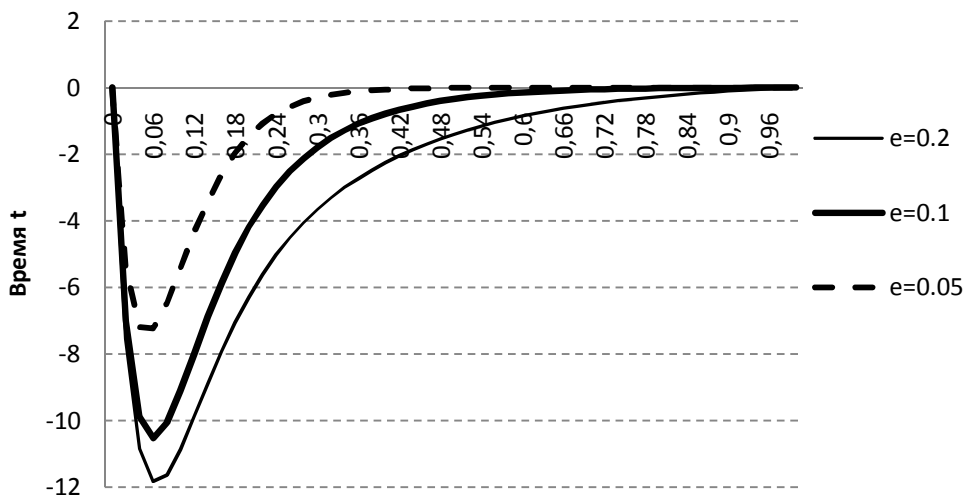


Рис. 2. Графики траектории z

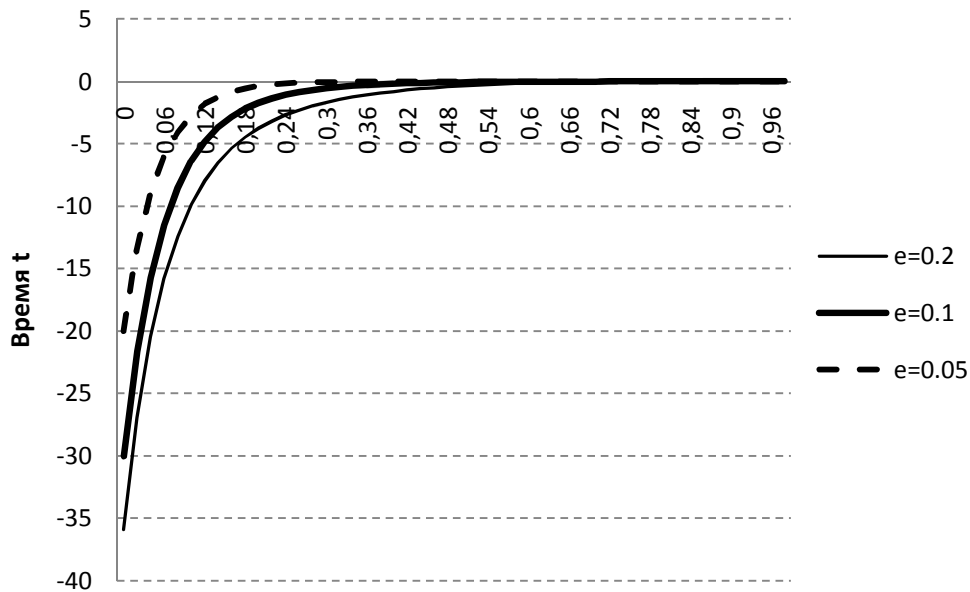


Рис. 3. График управления u

На рис. 4 изображен участок графика для управляющей функции, где четко виден момент перехода с торможения на разгон.

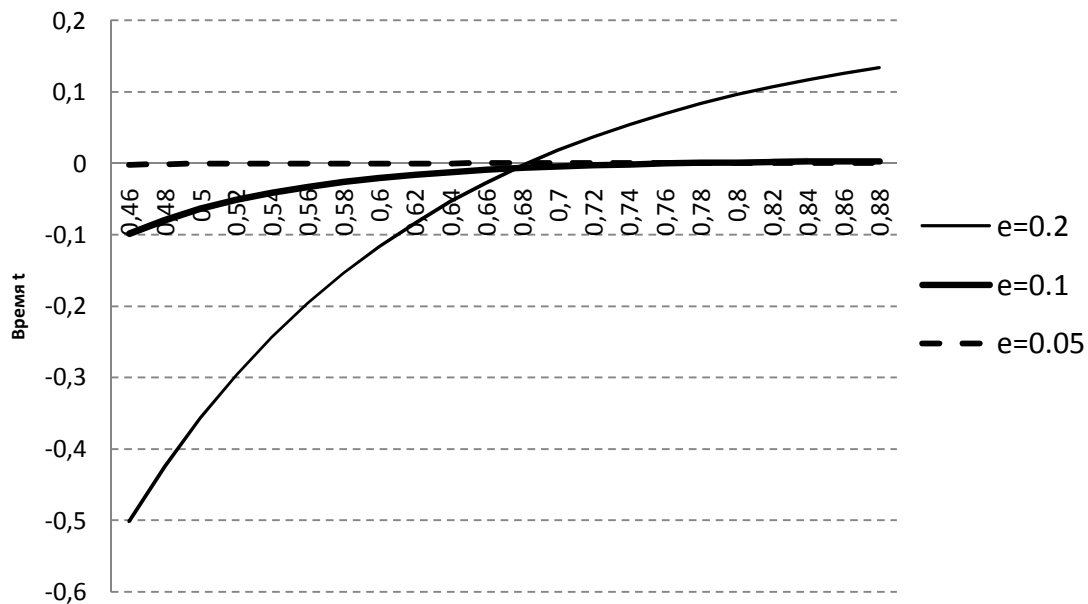


Рис. 4. График управления u в момент смены торможения на разгон

Найдем в общем случае момент времени, в который следует менять управление с торможения на разгон:

$$u^* = 0 \Rightarrow c_1 + \frac{c_2 e^{-t^*/\varepsilon}}{\varepsilon} = 0, \quad e^{-t^*/\varepsilon} = -\frac{\varepsilon c_1}{c_2}, \quad e^{-t^*/\varepsilon} = \frac{T}{\varepsilon(e^{T/\varepsilon} - 1)} \Rightarrow t^* = \varepsilon \ln \frac{\varepsilon(e^{T/\varepsilon} - 1)}{T}.$$

Таблица содержит значения для t^* при различных значениях малого параметра ε и при $T = 1, y^0 = 1$.

Значения малого параметра ε	Момент t^*
0,01	0,953948298
0,05	0,850213386
0,1	0,769736951
0,2	0,676760268
0,5	0,580719681

Заметим, что значения для t^* удаляются от значений T при возрастании параметра ε . При $\varepsilon \rightarrow 0$ значения $t^* \rightarrow T$.

В заключение хочется отметить, что в задачах с замкнутой областью значений управляющей функции применение классических методов не приемлемо. В этом случае является актуальным принцип максимума Понтрягина и его сочетание с асимптотическими методами. В дальнейшем предполагается работа именно в этом направлении.

Литература

1. Эльсгольц Л. Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 280-292 с.

THE PROBLEM OF CONTROLLING THE MOVEMENT OF A MATERIAL POINT WITH CONTINUOUS CONTROL ACTION

O. S. Dudkin, J. V. Korypaeva, N. E. Krasova, E. V. Lebedev

Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N.E. Zhukovsky
and Y.A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

The paper considers the problem of optimal control of the movement of a material point in the case when the control actions are continuous functions. In solving this problem, we used classic methods of variational calculus. As a result, expressions for phase variables and the control function are obtained, and their graphs are constructed for different values of a small parameter. The time points of the transition from point deceleration to acceleration for different values of the small parameter are found.

Keywords: variational calculus, small parameter, singular perturbations.

БЕЗОПАСНОСТЬ ПЕРЕДАЧИ ИНФОРМАЦИИ В СЕТЯХ СОТОВОЙ СВЯЗИ СТАНДАРТА GSM

Л. Г. Косырева-Фурсова, О. Д. Козенков, А. Ю. Климов

Военный учебно-научный центр военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия
имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина»

Kosyreva-Lyudmila@yandex.ru

Рассмотрены методы обеспечения безопасности связи, используемые в стандарте сотовой связи GSM. Указаны их недостатки и уязвимости. Предложена возможность использования устройств с абонентским принципом шифрования для повышения уровня защиты конфиденциальной информации от прослушивания.

Ключевые слова: сотовая связь, защита информации, криптозащита, абонентское шифрование.

Безопасность связи, наряду с другими мероприятиями достигается использованием технических средств защиты информации, в том числе засекреченной связи, предварительным шифрованием и кодированием информации.

При нынешнем широком распространении сотовой связи остро встает вопрос защищенности передаваемой с ее помощью информации. Стандарт GSM включает в себя несколько различных механизмов, предназначенных для защиты информации. Это способы предусматривают аутентификацию, шифрование, а так же использование временного идентификатора абонента [1-3].

Аутентификация абонента в первую очередь происходит при введении PIN-кода для получения доступа к SIM-карте. Кроме PIN-кода в данный стандарт сотовой связи включен метод, в котором применяется псевдослучайное число из огромного диапазона (128 бит). Диапазон чисел настолько велик, что даже при возможном количестве абонентов вероятность совпадения указанного псевдослучайного числа ничтожно мала. Абонентское оборудование производит вычисление с секретным параметром, который связан с данным пользователем, но при этом его не может знать даже сам абонент. Результат этого вычисления передается в виде ответа при регистрации устройства в сети.

Криптографические методы позволяют довольно легко получить высокую степень безопасности [4]. В стандарте GSM все передаваемые данные, включая системные сигналы и пользовательскую информацию, защищаются с применением одних и тех же методов. Длина ключа шифрования, используемого для защиты данных, составляет 114 бит. Генерация ключа производится специальным алгоритмом, на входе которого имеются два параметра, длиной 22 бита и 64 бита, на выходе создается последовательность длиной 114 бит [3].

Таким образом, кодирование информации происходит в режиме реального времени и передача всей информации в радиоэфир происходит в зашифрованном виде. При получении этой зашифрованной информации оборудованием

абонента (телефоном) или оператора (базовой станцией) происходит обратный процесс декодирования. Только после этого абонент может слышать речь своего собеседника. Такой метод реализации криптозащиты дает основание говорить о достаточно высокой степени защиты связи стандарта GSM как от подмены абонентского номера, так и от прослушивания разговора.

Несмотря на это, уже в конце 1990-х годов появилась информация как о возможности клонирования номера абонента, так и о взломе системы криптозащиты в режиме реального времени [2].

Известно, что в самом стандарте GSM предусмотрена возможность отключения шифрования передаваемых в сеть данных. При работе в таком режиме вся информация передается в радиэфир в незашифрованном виде, что позволяет получить к ней доступ любому, при использовании соответствующего оборудования. Помимо этого, как указано выше, и без отключения шифрования в стандарте GSM существуют проблемы с безопасностью. Дело в том, что используемые в стандарте GSM алгоритмы шифрования запрещены к экспорту в страны, находящиеся под действием международных санкций. Не смотря на эти ограничения, использование самой сотовой связи стандарта GSM в этих странах не запрещено, более того, связь в этих странах также охвачена глобальным роумингом, а для выполнения запрета на использование алгоритмов криптозащиты, оборудование базовых станций вообще не использует шифрование. Это означает, что нельзя исключить возможность подмены базовой станции для аппарата абонента. Данная подмена заключается в создании ложной базовой станции, которая посылает на телефонный аппарат абонента информации, соответствующей нахождению аппарата в одной из стран, на которую наложены международные санкции. Таким образом, происходит автоматическое отключение шифрования, после чего аппарат подключается к ложной станции и злоумышленники получают доступ к информации. Долгое время зарубежные криптографические алгоритмы, обеспечивающие защиту сотовой связи не были сертифицированы Центром безопасности связи ФСБ России, соответственно не было законных оснований для их применения на территории Российской Федерации.

На сегодняшний день существует возможность повышения уровня защищенности в российских GSM-сетях. Она заключается в использовании дополнительного абонентского шифрования. Суть данного метода состоит в том, что весь процесс шифрования и дешифрации происходит на абонентских телефонных аппаратах, при этом оборудование операторов сотовой связи используется только для передачи зашифрованной информации (см рисунок). Специальный сотовый телефон SMP-Атлас стал первым в России законным защищенным аппаратом, который предназначен для передачи данных с использованием дополнительного абонентского шифрования. Российскими и европейскими сертификатами подтверждается, что данный телефон обеспечивает гарантированную защиту передаваемой речевой информации при работе в защищенном режиме. Специальный процессор выполняет аппаратное шифрование с использованием симметричного ключа длиной 256 бит.

В процессе эксплуатации невозможно извлечь SIM-карту из телефона без сброса ключей шифрования, что исключает возможность использования аппарата при его утере или краже.

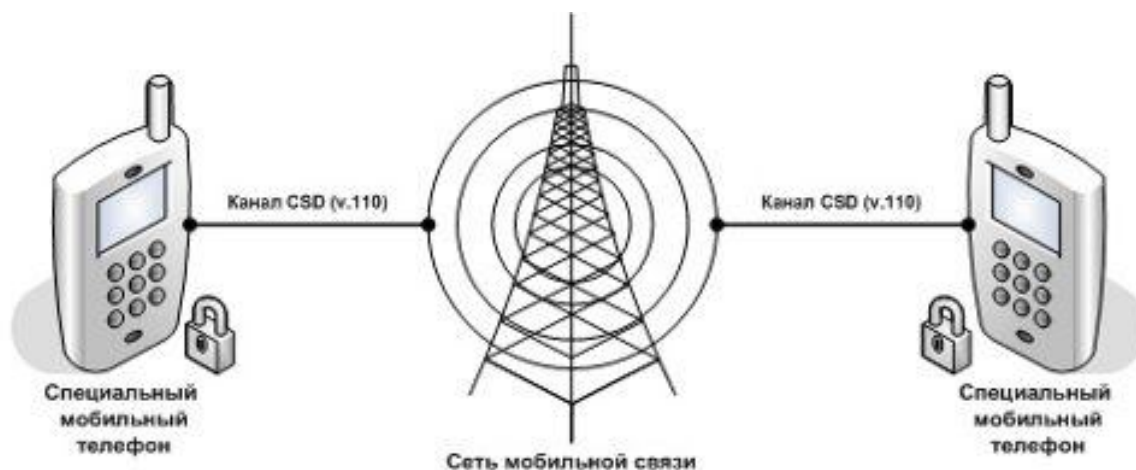


Схема использования абонентского шифрования в сети мобильной связи

Таким образом, на примере одного из самых распространенных стандартов сотовой связи с заявленной высокой степенью стойкости к утечкам информации можно показать потенциальную уязвимость систем защиты. На основании этого можно сделать вывод о необходимости постоянного совершенствования механизмов, обеспечивающих безопасность информации и связи в целом.

Литература

1. Уязвимости стандарта GSM и прослушивание телефонных разговоров / А. В. Новицкий, Д. М. Михайлов, А. В. Стариковский, А. В. Зуйков // Безопасность информационных технологий. «Безопасность мобильной связи», 2012. – 2БМС. – С. 8-10.
2. Барсуков В. С. Безопасность GSM: реальная или виртуальная? // Специальная техника. 2006. № 1. URL: http://st.ess.ru/publications/1_2006/barsukov/barsukov.htm.
3. 3rd Generation Partnership Project (3GPP). Спецификация 43.020 архитектуры системы безопасности сетей GSM. Описание аспектов безопасности в стандарте GSM. URL: http://www.3gpp.org/ftp/Specs/archive/43_series/43.020/.
4. Брюс Шнайер. Прикладная криптография.

INFORMATION SECURITY IN GSM COMMUNICATION

L. G. Kosyreva-Fursova, O. D. Kozenkov, A. Yu. Klimov

Military Training and Research Center Air Force “Air Force Academy
n. a. prof. N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin”, Voronezh

Communication security methods used in the GSM standard are considered; their disadvantages and vulnerabilities are shown. The possibility of using devices with a subscription principle of encryption to increase the level of protection of confidential information from listening is proposed.

Keywords: cellular communication, information security, cryptographic protection, subscription encryption.

ФОРМИРОВАНИЕ ЗОНЫ «ПИТАНИЯ» НИТЕВИДНОГО КРИСТАЛЛА, В МОДЕЛИ РОСТА ЛИМИТИРУЕМОГО ГЕТЕРОГЕННОЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИЕЙ

О. Д. Козенков, Л. Г. Косырева-Фурсова, И. С. Обозный

Военный учебно-научный центр военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
kozenkov_w@mail.ru

Совершенство нитевидных кристаллов их уникальная форма и аномально высокая прочность позволяют создавать на их основе датчики пожарно-охранной сигнализации. Для решения проблем массового производства нитевидных кристаллов требуется наличие адекватных моделей, объясняющих известные экспериментальные ростовые закономерности. В работе рассмотрено формирование зон «питания» нитевидных кристаллов, обсуждены их размеры и зависимость размеров зон «питания» от скорости роста кристаллов. Результаты, полученные в работе, будут полезны для управления ростовыми процессами.

Ключевые слова: нитевидный кристалл, гетерогенная химическая реакция, расплав, скорость роста, зона «питания».

Нитевидные кристаллы (НК) – протяженные «одномерные» монокристаллы с исключительным кристаллографическим совершенством [1-4]. Совершенство НК, их одномерная форма и аномально высокая прочность создают перспективы для изготовления чувствительных элементов исполнительных механизмов пожарно-охранной сигнализации [5]. Особый интерес вызывают НК для изготовления тензометров (прочность близкая к теоретической) и термометров (одномерная форма) [5].

Существуют проблемы воспроизводимого выращивания НК различных веществ с заданной геометрией и физическими свойствами, что не дает возможности для организации массового промышленного производства и соответствующего применения нитевидных кристаллов [1-3]. Для решения проблем, ограничивающих возможность массового получения НК, требуется построение модели их роста, базирующейся на известных экспериментальных данных. В работе [6] предложена модель роста НК кремния для случая, когда процесс роста определяется гетерогенной реакцией образования кремния. Анализ экспериментальных данных подтверждает решающую роль гетерогенной химической реакции приводящей к выделению кристаллизующегося вещества на границе жидкость-газ:

– реакция образования кристаллизующегося вещества происходит в газовой фазе на границе расплава на вершине кристалла и газа. Кристаллизация на боковой поверхности НК, а тем более объеме газовой смеси мала или отсутствует [1-3];

– скорость роста НК определяется составом расплава на его вершине и с ростом концентрации кристаллизующегося вещества в нем, падает [7, 8];

– скорость роста НК определяется величиной площади расплава (углом смачивания) при прочих равных условиях и с ростом угла смачивания увеличивается [3];

– скорость роста НК зависит от технологических параметров процесса (температура, мольное отношение исходных реагентов [9], скорость движения газовой смеси в реакторе, природой расплава (состав сплава и угол смачивания) [3, 15];

– скорость роста НК зависит от величины радиуса его поперечного сечения R . Для $2,5-5 \text{ мкм} \leq R \leq 50 \text{ мкм}$ скорость роста обратно пропорциональна R [10], а для $R < 2,5 \text{ мкм}$ корень квадратный из скорости роста обратно пропорционален радиусу кристалла R [2];

– скорость роста НК определяется плотностью их расположения относительно друг друга и с ростом плотности она падает, стремясь к некоторому постоянному значению при предельной плотности [11];

– в процессе роста кристалла вокруг его вершины возникает зона «питания», размеры которой падают с уменьшением радиуса НК [3, 11]. НК с радиусом $R = 30 \text{ мкм}$ имеют зону «питания» с радиусом $\sim 500 \text{ мкм}$;

– с ростом концентрации SiCl_4 в исходной газовой смеси скорость роста НК падает и рост сменяется травлением через жидкий расплав с образованием «отрицательных» кристаллов [12];

– НК растут конусными [13, 14]. Конусность определяется составом газовой фазы, температурой и природой расплава на вершине кристалла;

– скорость роста НК зависит от температуры [3]. Наличие максимума, на кривой зависимости скорости роста НК от температуры принципиально согласуется с величиной выхода химической реакции от температуры.

– температура вершины НК превышает температуру среды [16], причем это превышение может быть существенным при обратной конусности.

В данной работе обсуждаются причины формирования зоны «питания» вокруг вершины НК. Наличие таких зон неизбежно приводит к ростовому взаимодействию между кристаллами. Если расстояние между НК достаточно мало, то зоны «питания» частично перекрываются, уменьшая скорость роста кристаллов.

Пусть j_0 – это плотность потока частиц кристаллизующегося вещества на поверхность жидкой фазы на вершине НК, которую будем считать сферой с радиусом $R_{\text{НК}}$. Поток кристаллизующегося вещества – величина постоянная для произвольной сферической поверхности. Плотность потока j_0 прямо пропорциональна скорости роста кристалла. Тогда, поток J через сферическую поверхность жидкой фазы на вершине НК радиуса $R_{\text{НК}}$:

$$J = 4\pi R_{\text{НК}}^2 j_0. \quad (1)$$

Плотность потока j кристаллизующегося вещества на сферической поверхности произвольного радиуса:

$$j = \frac{J}{4\pi R^2} = j_0 \frac{R_{\text{НК}}^2}{R^2}. \quad (2)$$

Введем соотношение между плотностями потоков j_0 – на поверхности жидкой фазы и j – на поверхности сферы радиуса R :

$$\frac{j}{j_0} = \frac{R_{\text{НК}}^2}{R^2}. \quad (3)$$

Существует некоторый радиус сферической поверхности R_{max} , начиная с которого можно пренебречь диффузионным вкладом среды, что связано с движением газовой смеси в реакторе. Плотность потока на сфере радиуса R_{max} достигает некоторого малого постоянного для данных условий значения $j_{\text{min}} = \text{const}$.

Для заданных условий роста НК коэффициент δ , определяет радиус сферической поверхности в газовой фазе R_{max} , начиная с которого можно пренебречь диффузионным вкладом среды:

$$\delta = \frac{j_{\text{min}}}{j_0} = \frac{R_{\text{НК}}^2}{R_{\text{max}}^2}. \quad (4)$$

Под условиями роста понимается скорость движения газовой смеси в реакторе и температура.

При изменении скорости роста НК пропорционально меняется и плотность потока, приходящего на поверхность жидкой фазы. Запишем новую плотность потока j'_0 на поверхность жидкой фазы на вершине НК при изменившейся в ε раз скорости роста кристалла в виде:

$$j'_0 = \varepsilon j_0. \quad (5)$$

Считая минимальную плотность потока на сфере радиусом R_{max} для данных условий роста постоянной, получим:

$$j'_0 \delta' = j_0 \delta, \quad (6)$$

откуда следует:

$$\delta' = \frac{\delta}{\varepsilon}. \quad (7)$$

Следовательно, если скорость роста НК и, соответственно, плотность потока кристаллизующегося вещества, приходящего на поверхность жидкой фазы, изменяется в ε раз, то коэффициент δ' находится по последней формуле.

Учтем (7) в выражении (3):

$$\delta' = \frac{\delta}{\varepsilon} = \frac{R_{\text{НК}}^2}{R_{\text{max}}'^2}, \quad (8)$$

откуда:

$$R_{\text{max}}' = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\delta}} R_{\text{НК}}. \quad (9)$$

Учтем в (9) выражение (4), и учитывая пропорциональность плотности потока частиц кристаллизующегося вещества на поверхность жидкой фазы на вершине НК скорости его роста V , получим:

$$R'_{\max} = \sqrt{\frac{1}{\delta} \frac{V'}{V_0}} R_{\text{НК}}, \quad (10)$$

где V' – изменившаяся скорость роста НК, V_0 – скорость роста НК радиуса $R_{\text{НК}}$.
Последнее с учетом (4) приведем к виду.

$$R'_{\max} = \sqrt{\frac{V'}{V_0}} R_{\max}. \quad (11)$$

Выражение (10) связывает радиус кристалла $R_{\text{НК}}$, имеющего скорость роста V_0 с радиусом зоны «питания» НК R'_{\max} , того же радиуса $R_{\text{НК}}$, растущего в тех же условиях со скоростью V' . Выражение (11) связывает радиус зоны «питания» кристалла R_{\max} , имеющего скорость роста V_0 и радиус $R_{\text{НК}}$, с радиусом зоны «питания» НК R'_{\max} , растущего в тех же условиях со скоростью V' и с тем же радиусом кристалла $R_{\text{НК}}$.

На рис. 1 показана экспериментальная зависимость скорости роста НК кремния от его радиуса при постоянной скорости потока газовой смеси в реакторе и температуре для четырех мольных отношений исходных реагентов SiCl_4 к H_2 : кривая 1 – $n = 0,0075$; кривая 2 – $n = 0,01$; кривая 3 – $n = 0,005$; кривая 4 – $n = 0,015$.

Пользуясь экспериментальными данными, которые дают для НК кремния с радиусом $R = 30$ мкм, растущих со скоростью $V_{\text{НК}} = 1,3$ мкм/с радиус зоны «питания» $R_{\text{ЗП}} = R_{\max} = 500$ мкм, и выражением (10), построим зависимость радиуса зоны «питания» НК кремния $R_{\text{ЗП}}$ от радиуса кристалла $R_{\text{НК}}$ по данным рис. 1. Полученные результаты представлены на рис. 2, где кривая 1 – $n = 0,0075$; 2 – $n = 0,01$; 3 – $n = 0,005$; 4 – $n = 0,015$.

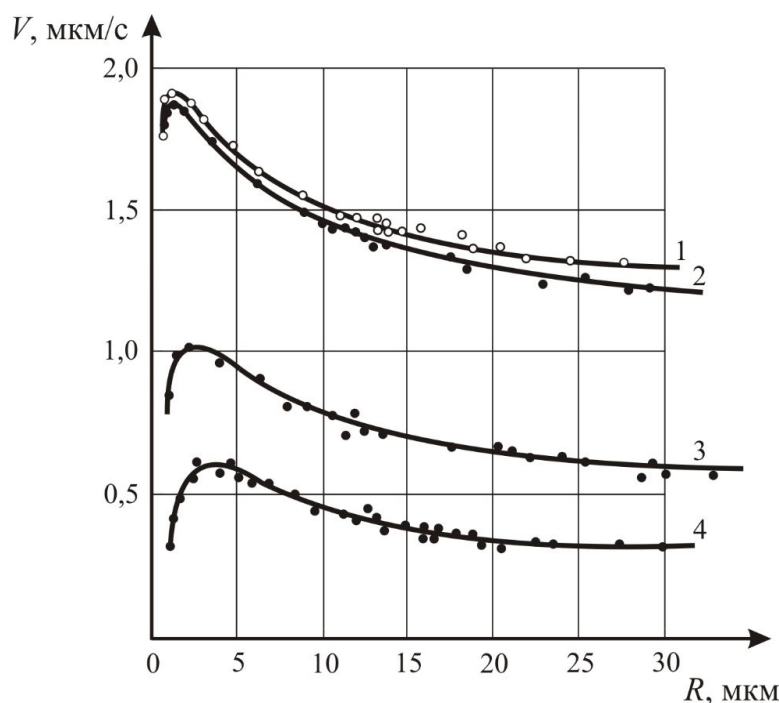


Рис. 1. Зависимость скорости роста V НК кремния от их радиуса R .
Кривая 1 – $n = 0,0075$; 2 – $n = 0,01$; 3 – $n = 0,005$; 4 – $n = 0,015$

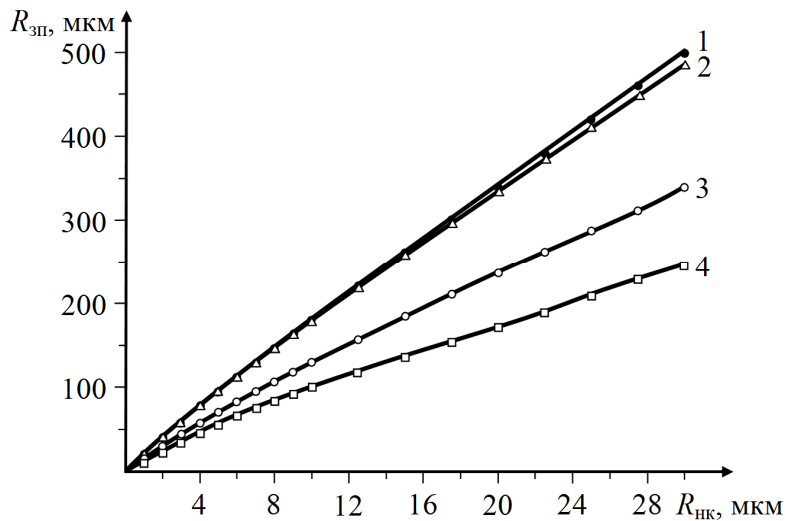


Рис. 2. Зависимость радиуса зоны «питания» НК кремния $R_{зп}$ от радиуса кристалла $R_{нк}$ по данным рис. 1. Кривая 1 – $n = 0,0075$; 2 – $n = 0,01$; 3 – $n = 0,005$; 4 – $n = 0,015$

Нелинейность на рис. 2 связана с зависимостью скорости роста НК от радиуса (рис. 1). Если скорость роста не зависит от радиуса являясь константой, то зависимость радиуса зоны «питания» НК кремния $R_{зп}$ от радиуса кристалла $R_{нк}$ является линейной в соответствии с (10), (11).

Если расстояние между двумя кристаллами a оказывается меньше суммы радиусов их зон «питания», как на рис. 3, то происходит их перекрытие, что приводит к уменьшению скорости роста обоих кристаллов.

Как видно из рис. 2. область перекрытия зон «питания» оказывается более значимой для кристалла меньшего размера. Если считать, что в перекрытой области ростовой поток делится между кристаллами, то скорость роста кристалла меньшего размера падает сильнее, чем кристалла большего размера, так как у кристалла меньшего размера доля поверхности попадающей в область перекрытия больше, чем у кристалла большего размера.

Приведенная схема на рис. 3 позволяет качественно объяснить обратную зависимость скорости роста НК от его радиуса в рамках модели роста НК лимитируемого гетерогенной химической реакцией выделения кристаллизующегося вещества и зависимость скорости роста НК от плотности их расположения на подложке.

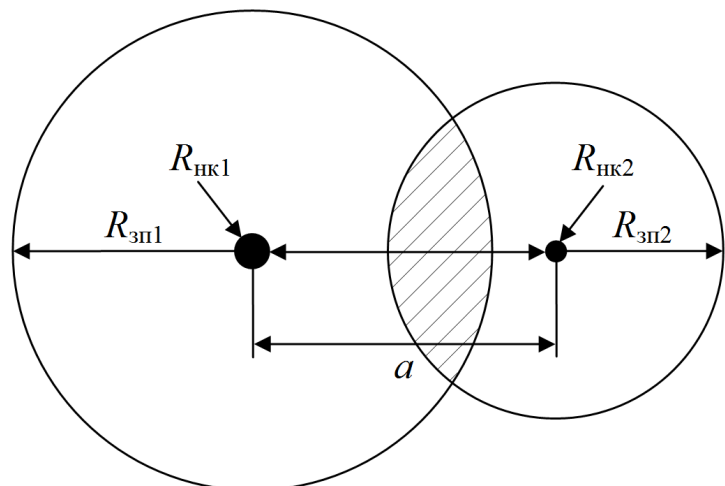


Рис. 3. Схема перекрытия зон «питания» двух кристаллов разного поперечного размера ($R_{нк1} > R_{нк2}$)

Литература

1. Вагнер Р. Монокристалльные волокна и армированные ими материалы // под ред. А. Т. Туманова. – М.: Мир, 1973. – 464 с.
2. Гиваргизов Е. И. Рост нитевидных и пластинчатых кристаллов из пара. М.: Наука, 1977. – 304 с.
3. Небольсин В. А. Рост нитевидных кристаллов / В. А. Небольсин, А. А. Щетинин // Воронеж: ВГТУ, 2003. – 620 с.
4. Антипов С. А., Дрожжин А. И., Рощупкин А. М. Релаксационные явления в нитевидных кристаллах полупроводников. Воронеж: ВГУ. – 1987. 192 с.
5. Дрожжин А. И. Преобразователи на нитевидных кристаллах P-Si <111>. Воронеж 1984. – 241 с. Деп в ВИНТИ 29 июня 1984. № 6606-84 Деп.
6. Козенков О. Д. Модель роста нитевидного кристалла, лимитируемого гетерогенной химической реакцией // Неорганические материалы. 2014. Т. 50. № 11. С. 1-5.
7. Козенков О. Д. Зависимость скорости роста нитевидного кристалла, лимитируемого гетерогенной химической реакцией, от состава жидкой фазы // Конденсированные среды и межфазные границы. 2016. Т. 18. № 3. С. 338–344.
8. Щетинин А. А., Бубнов Л. И., Козенков О. Д. Влияние природы примеси на скорость аксиального роста нитевидных кристаллов кремния в открытой системе Si-H-Cl // Неорганические материалы. 1987. Т. 23. № 10. С. 1589-1592.
9. Козенков О. Д., Косырева Л. Г. Зависимость скорости роста нитевидного кристалла, лимитируемого гетерогенной химической реакцией, от состава газовой фазы // Неорганические материалы. 2015. Т. 51. № 11. С. 1255-1259.
10. Даринский Б. М., Козенков О. Д., Щетинин А. А. О зависимости скорости роста нитевидных кристаллов от их диаметра // Известия вузов. Физика. 1986. Т. 32. № 12. С. 18-22.
11. Щетинин А. А., Козенков О. Д., Небольсин В. А. О зонах питания нитевидных кристаллов кремния растущих из газовой фазы // Известия вузов. Физика. 1989. Т. 32. № 6. С. 115-116.
12. Щетинин А. А., Дунаев А. И., Козенков О. Д. О травлении монокристаллов кремния через жидкую фазу и образовании систем обычных и «отрицательных» нитевидных кристаллов // Воронеж. Политехн. Ин-т. 1981. Деп. в ВИНТИ. 8.12.81. № 5596-81. 9 с.
13. Козенков О. Д., Козьяков А. Б., Щетинин А. А. О конусности нитевидных кристаллов кремния // Известия вузов. Физика. 1986. Т. 29. № 9. С. 115-117.
14. Козенков О. Д. Конусность нитевидного кристалла, обусловленная гетерогенной химической реакцией // Неорганические материалы. 2016. Т. 52. № 3. С. 279-284.
15. Козенков О. Д. Зависимость скорости роста нитевидного кристалла, лимитируемого гетерогенной химической реакцией, от состава жидкой фазы // Конденсированные среды и межфазные границы. 2016. Т. 18. № 3. С. 338-344.
16. Козенков О. Д., Горбунов В. В. Модель теплового баланса бесконечно длинного нитевидного кристалла // Неорганические материалы. 2015. Т. 51. № 5. С. 576-580.

INFORMATION SECURITY IN GSM COMMUNICATION

O. D. Kozenkov, L. G. Kosyreva-Fursova, I. S. Oboznyi

Military Training and Research Center Air Force “Air Force Academy
n. a. prof. N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin”, Voronezh

The perfection of whiskers, their unique shape and anomalously high strength make it possible to create fire alarm sensors on their basis. To solve the problems of mass production of whiskers, adequate models are needed to explain the known experimental growth laws. In the work, the formation of «nutrition» zones of whiskers was considered, their sizes and the dependence of the sizes of «nutrition» zones on the crystal growth rate were discussed. The results obtained in this work will be useful for managing growth processes.

Keywords: whisker, heterogeneous chemical reaction, melt, growth rate, «nutrition» zone.

КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ВТОРОГО РОДА ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

В. Н. Нечаев, А. В. Шуба

ВУНЦ ВВС «ВВА им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
shandvit@rambler.ru

В рамках феноменологической теории Ландау исследованы особенности фазового перехода (ФП) в тонкой сегнетоэлектрической пленке (СЭП) во внешнем электрическом поле в зависимости от толщины пленки и типа закрепления поляризации на ее поверхности. Обнаружено, что в электрическом поле ФП не только размывается, но и смещается по температуре, причем величина смещения зависит от толщины пленки, свойств ее поверхности и не зависит от напряженности поля.

Ключевые слова: поляризация, диэлектрическая восприимчивость фазовый переход, параэлектрическая фаза.

Введение

Как известно [1], в объемном материале фазовый переход (ФП) во внешнем электрическом поле размывается и точка сингулярности термодинамических характеристик материала на температурной шкале исчезает. Такая ситуация не сохраняется в случае образцов конечных размеров и, в частности, тонких сегнетоэлектрических пленок (СЭП). ФП в этой ситуации происходит по механизму потери устойчивости и описывается как появление решения, отвечающего первому собственному значению соответствующей краевой задачи. При наличии внешнего поля краевая задача становится неоднородной и разрешимость ее будет определяться альтернативой Фредгольма. В результате изменяется как температура T_f ФП – включение внешнего поля $h(z)$ приводит к ее конечному сдвигу, так и вид решения вблизи точки перехода.

Постановка задачи

Проанализируем такую ситуацию на примере сегнетоэлектрического ФП, пренебрегая для простоты деполяризующими электрическими полями. Рассмотрим тонкую СЭП толщиной l с вектором поляризации $\vec{P} = (0, 0, P)$, расположенную в плоскости (x, y) и испытывающую ФП второго рода. В линейном приближении параметр порядка $P(z)$ должен удовлетворять уравнению равновесия

$$\kappa \frac{d^2 P}{dz^2} + \alpha P = -h(z) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\kappa \frac{dP}{dz} \mp \alpha_s P \Big|_{z=0,l} = 0, \quad (2)$$

где $\alpha = \alpha_0(T_C - T)$ и α_s – соответственно коэффициенты разложения свободной и поверхностной энергий в ряд по степеням параметра порядка, T_C – температура ФП идеального сегнетоэлектрика; $\kappa \approx a_0^2$ – корреляционная постоянная, a_0 – параметр кристаллической решетки. Введем в рассмотрение нормированные переменные $z = z/a_0, l = l/a_0, \alpha_s = \alpha_s/a_0, P(z) = P(z)/P_0, h(z) = h(z)/P_0$, где P_0 – поляризация неограниченного кристалла. Опустив в обозначениях тильду, перепишем задачу (1), (2) в новых переменных

$$\frac{d^2 P}{dz^2} + \alpha P = -h(z); \quad (3)$$

$$\left. \frac{dP}{dz} \mp \alpha_s P \right|_{z=0, l} = 0. \quad (4)$$

I. Случай для параэлектрической области: $T > T_f$. Будем искать решение неоднородной задачи (3), (4) методом вариации произвольных постоянных

$$P(z) = C_1(z)P_1(z) + C_2(z)P_2(z), \quad (5)$$

где функции $P_1(z)$ и $P_2(z)$ должны удовлетворять граничным условиям

$$\begin{cases} \left. \frac{dP_1}{dz} \right|_{z=0} = \alpha_s, \\ P_1(0) = 1; \end{cases} \quad (6)$$

$$\begin{cases} \left. \frac{dP_2}{dz} \right|_{z=l} = -\alpha_s, \\ P_2(l) = 1, \end{cases} \quad (7)$$

откуда

$$P_1(z) = \cos\sqrt{\alpha}z + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}}\sin\sqrt{\alpha}z; \quad (8)$$

$$P_2(z) = \left(\cos\sqrt{\alpha}l + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}}\sin\sqrt{\alpha}l \right) \cos\sqrt{\alpha}z + \left(\sin\sqrt{\alpha}l - \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}}\cos\sqrt{\alpha}l \right) \sin\sqrt{\alpha}z.$$

Кроме того, функции (8) должны быть линейно независимы, иначе каждая из них будет удовлетворять граничным условиям (6), (7) одновременно. Следовательно, вронскиан $W(z)$ системы функций (8) должен быть не равен нулю и согласно равенству Лиувилля-Остроградского

$$W(z) = \frac{\alpha - \alpha_s^2}{\sqrt{\alpha}} \sin\sqrt{\alpha}l - 2\alpha_s \cos\sqrt{\alpha}l. \quad (9)$$

1. Рассмотрим случай однородного по толщине пленки электрического поля $h(z) = h = \text{const}$:

а) для высокотемпературной области $T > T_C$ решение (5) принимает вид

$$P(z) = -h \left\{ \operatorname{sh}\sqrt{\alpha}l + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \left(\operatorname{ch}\sqrt{\alpha}z - 2\operatorname{ch}\sqrt{\alpha}l + \operatorname{ch}\sqrt{\alpha}(l-z) \right) + \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \left(\operatorname{sh}\sqrt{\alpha}z - \operatorname{sh}\sqrt{\alpha}l + \operatorname{sh}\sqrt{\alpha}(l-z) \right) \right\} / \left\{ (\alpha + \alpha_s^2) \operatorname{sh}\sqrt{\alpha}l + 2\alpha_s \sqrt{\alpha} \operatorname{ch}\sqrt{\alpha}l \right\}, \quad (10)$$

а усредненная по толщине пленки поляризация запишется в виде

$$\mathbf{P} = h \frac{\operatorname{sh}\sqrt{\alpha}l - \frac{2\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \left(\frac{\operatorname{sh}\sqrt{\alpha}l}{\sqrt{\alpha}} - \operatorname{ch}\sqrt{\alpha}l \right) - 2 \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \left(\frac{\operatorname{ch}\sqrt{\alpha}l}{\sqrt{\alpha}} - \frac{1}{\sqrt{\alpha}} - \frac{\operatorname{sh}\sqrt{\alpha}l}{2} \right)}{(\alpha + \alpha_s^2) \operatorname{sh}\sqrt{\alpha}l + 2\alpha_s \sqrt{\alpha} \operatorname{ch}\sqrt{\alpha}l}.$$

б) для температурного интервала $T_f < T < T_C$ согласно методу вариации произвольных постоянных решение (5) с учетом (8), (9) имеет вид

$$P(z) = -h \left\{ \sin\sqrt{\alpha}l + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \left(\cos\sqrt{\alpha}z - 2\cos\sqrt{\alpha}l + \cos\sqrt{\alpha}(l-z) \right) + \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \left(\sin\sqrt{\alpha}z - \sin\sqrt{\alpha}l + \sin\sqrt{\alpha}(l-z) \right) \right\} / \left\{ (\alpha - \alpha_s^2) \sin\sqrt{\alpha}l - 2\alpha_s \sqrt{\alpha} \cos\sqrt{\alpha}l \right\}. \quad (11)$$

Тогда усредненная по толщине пленки поляризация запишется в виде

$$\mathbf{P} = h \frac{-\sin\sqrt{\alpha}l - \frac{2\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \left(\frac{\sin\sqrt{\alpha}l}{\sqrt{\alpha}} - \cos\sqrt{\alpha}l \right) + 2 \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \left(\frac{\cos\sqrt{\alpha}l}{\sqrt{\alpha}} - \frac{1}{\sqrt{\alpha}} + \frac{\sin\sqrt{\alpha}l}{2} \right)}{(\alpha - \alpha_s^2) \sin\sqrt{\alpha}l - 2\alpha_s \sqrt{\alpha} \cos\sqrt{\alpha}l}.$$

Нижняя граница T_f рассматриваемой температурной области определяется появлением ненулевого решения в отсутствие внешнего поля $h(z)$. Для ее нахождения запишем общее решение уравнения (3) в однородном случае, положив $h(z) = 0$, следовательно

$$P(z) = C_1 \cos\sqrt{\alpha}z + C_2 \sin\sqrt{\alpha}z. \quad (12)$$

Тогда граничные условия (4) образуют систему линейных уравнений для нахождения констант интегрирования C_1, C_2 в решении (12):

$$\begin{cases} \alpha_s C_1 - \sqrt{\alpha} C_2 = 0, \\ (\alpha_s \cos\sqrt{\alpha}l - \sqrt{\alpha} \sin\sqrt{\alpha}l) C_1 + (\alpha_s \sin\sqrt{\alpha}l + \sqrt{\alpha} \cos\sqrt{\alpha}l) C_2 = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Равенство нулю определителя системы (13) образует трансцендентное уравнение

$$\operatorname{tg}\sqrt{\alpha}l = -\frac{2\alpha_s \sqrt{\alpha}}{\alpha_s^2 - \alpha} \quad (14)$$

для численного нахождения температуры T_f ФП, которая расположена между значениями T_f для $\alpha_s \rightarrow \infty$ и $\alpha_s = 0$, т.е. в интервале $\left(T_C - \frac{\pi^2}{\alpha_0 l^2}, T_C \right)$.

Объединяя случаи а) и б), построим температурные зависимости усредненной по толщине пленки поляризации и обратной диэлектрической восприимчивости χ^{-1} для температуры $T > T_f$ (рис. 1, 2).

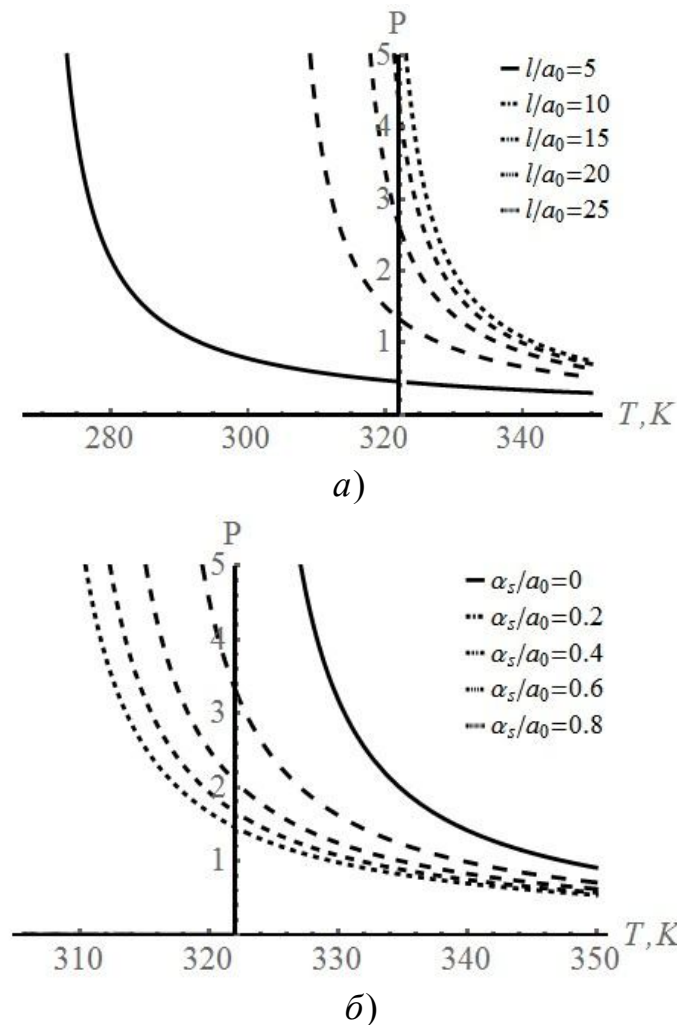


Рис. 1. Зависимость приведенной объемной поляризации P , наведенной внешним электрическим полем $h = 0.1P_0$: а) $\alpha_s/a_0 = 1$; б) $l/a_0 = 10$

Из рис. 1 видно, что объемная поляризация P при охлаждении СЭП растет до значений температуры T_f , зависящих от толщины l пленки и параметра α_s . При этом снижение толщины СЭП наряду с ростом закрепления поляризации на границе СЭП, определяемого параметром α_s , приводит к уменьшению поляризации P , смещая температуру T_f вниз по температурной шкале. Неограниченный рост поляризации в точке T_f объясняется сильной неустойчивостью системы при ФП, когда обратная диэлектрическая восприимчивость χ^{-1} обращается в нуль (рис. 2).

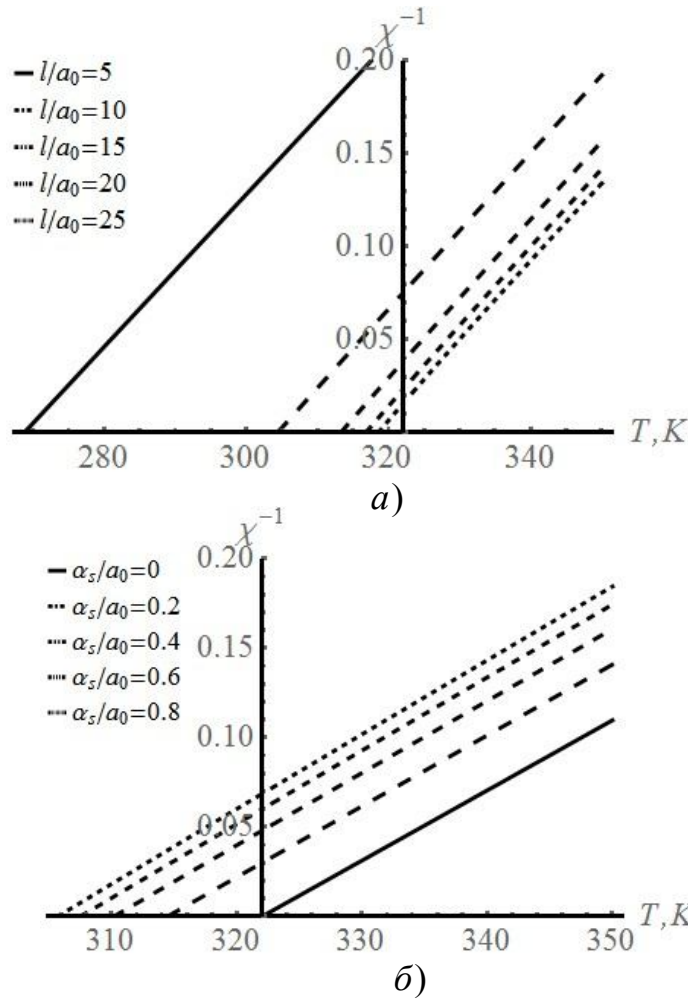


Рис. 2. Зависимость обратной диэлектрической восприимчивости χ^{-1} при однородном электрическом поле: а) $\alpha_s/a_0 = 1$; б) $l/a_0 = 10$

2. Рассмотрим случай неоднородного по толщине пленки электрического поля $h(z) = h_0 z / l$:

а) для высокотемпературной области $T > T_C$ решение (5) принимает вид

$$P(z) = -\frac{h_0}{l} \left\{ -z \operatorname{sh} \sqrt{\alpha} l \left(1 + \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \right) - 2z \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \operatorname{ch} \sqrt{\alpha} l - \left(\frac{\operatorname{ch} \sqrt{\alpha} (l-z)}{\sqrt{\alpha}} + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \frac{\operatorname{sh} \sqrt{\alpha} (l-z)}{\sqrt{\alpha}} \right) + \right. \\ \left. + (1 + l \alpha_s) \left(\frac{\operatorname{ch} \sqrt{\alpha} z}{\sqrt{\alpha}} + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \frac{\operatorname{sh} \sqrt{\alpha} z}{\sqrt{\alpha}} \right) \right\} / \left\{ (\alpha + \alpha_s^2) \sin \sqrt{\alpha} l + 2 \alpha_s \sqrt{\alpha} \cos \sqrt{\alpha} l \right\}, \quad (15)$$

а усредненная по толщине пленки поляризация запишется в виде

$$\mathbf{P} = h_0 \frac{\frac{1}{2} \sin \sqrt{\alpha} l \left(1 + \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \right) + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \left(\operatorname{ch} \sqrt{\alpha} l - \frac{\operatorname{sh} \sqrt{\alpha} l}{\sqrt{\alpha}} - \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \frac{\operatorname{ch} \sqrt{\alpha} l - 1}{\sqrt{\alpha}} \right)}{(\alpha + \alpha_s^2) \sin \sqrt{\alpha} l + 2 \alpha_s \sqrt{\alpha} \cos \sqrt{\alpha} l}.$$

б) для температурного интервала $T_f < T < T_C$ решение (5) с учетом (8), (9) принимает вид

$$P(z) = -\frac{h_0}{l} \left\{ z \sin \sqrt{\alpha} l \left(1 - \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \right) - 2z \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \cos \sqrt{\alpha} l - \left(\frac{\cos \sqrt{\alpha} (l-z)}{\sqrt{\alpha}} + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \frac{\sin \sqrt{\alpha} (l-z)}{\sqrt{\alpha}} \right) + \right. \\ \left. + (1 + l\alpha_s) \left(\frac{\cos \sqrt{\alpha} z}{\sqrt{\alpha}} + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \frac{\sin \sqrt{\alpha} z}{\sqrt{\alpha}} \right) \right\} / \left\{ (\alpha - \alpha_s^2) \sin \sqrt{\alpha} l - 2\alpha_s \sqrt{\alpha} \cos \sqrt{\alpha} l \right\}. \quad (16)$$

Усредненная по толщине пленки поляризация запишется в виде

$$P = h_0 \frac{-\frac{1}{2} \sin \sqrt{\alpha} l \left(1 - \left(\frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \right) + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \left(\cos \sqrt{\alpha} l - \frac{\sin \sqrt{\alpha} l}{\sqrt{\alpha}} + \frac{\alpha_s}{\sqrt{\alpha}} \frac{\cos \sqrt{\alpha} l - 1}{\sqrt{\alpha}} \right)}{(\alpha - \alpha_s^2) \sin \sqrt{\alpha} l - 2\alpha_s \sqrt{\alpha} \cos \sqrt{\alpha} l}.$$

Также объединяя случаи а) и б), построим температурные зависимости усредненной по толщине пленки поляризации и обратной диэлектрической восприимчивости χ^{-1} для температуры $T > T_f$ (рис. 3, 4).

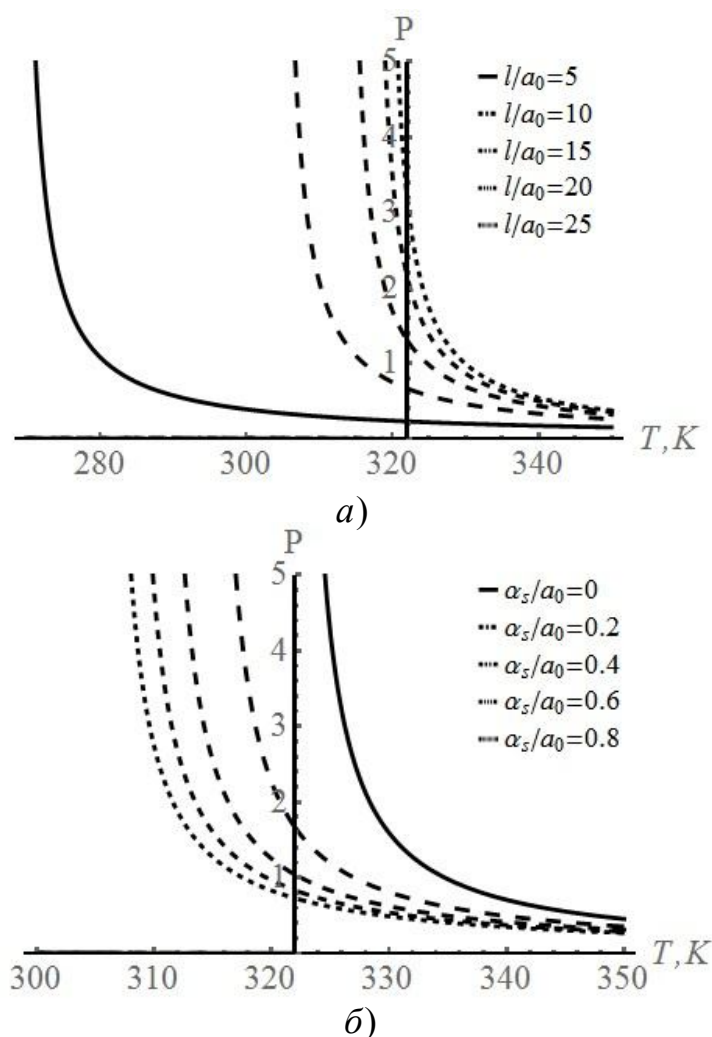


Рис. 3. Зависимость приведенной объемной поляризации P , наведенной электрическим полем $h = 0.1zP_0/l$: а) $\alpha_s/a_0 = 1$; б) $l/a_0 = 10$

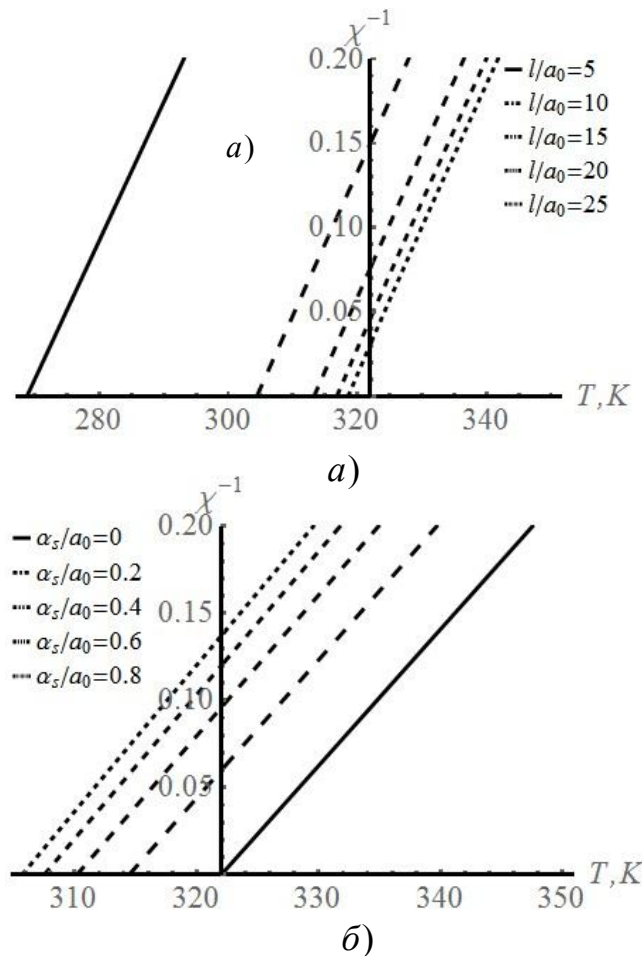


Рис. 4. Зависимость обратной диэлектрической восприимчивости χ^{-1} при неоднородном электрическом поле $h=0.1zP_0/l$: а) $\alpha_s/a_0 = 1$; б) $l/a_0 = 10$

Заметим, что рассматриваемые физические величины в данном случае (рис. 3, 4) с температурой изменяются сильнее, чем в случае однородного по толщине пленки электрического поля (рис. 1, 2).

II. Случай температуры ФП: $T = T_f$. Температура ФП является решением уравнения (14), тогда вронскиан (9) обращается в нуль и решения (10), (11), (15), (16) теряют смысл. Для нахождения условия существования функции $P(z)$ будем искать решение неоднородной задачи (3), (4) методом вариации произвольных постоянных на основе однородного решения (12), откуда

$$P(z) = C_1 \cos \sqrt{\alpha} z + C_2 \sin \sqrt{\alpha} z + \frac{\cos \sqrt{\alpha} z}{\sqrt{\alpha}} \int h(z) \sin \sqrt{\alpha} z dz - \frac{\sin \sqrt{\alpha} z}{\sqrt{\alpha}} \int h(z) \cos \sqrt{\alpha} z dz. \quad (17)$$

1. В случае однородного электрического поля $h(z) = h = \text{const}$ выражение (17) принимает вид

$$P(z) = C_1 \cos \sqrt{\alpha} z + C_2 \sin \sqrt{\alpha} z - \frac{h}{\alpha}. \quad (18)$$

Аналогично предыдущему случаю, граничные условия (4) образуют систему линейных уравнений для нахождения констант интегрирования:

$$\begin{cases} \alpha_s C_1 - \sqrt{\alpha} C_2 = \frac{\alpha_s h}{\alpha}, \\ (\sqrt{\alpha} \sin \sqrt{\alpha} l - \alpha_s \cos \sqrt{\alpha} l) C_1 - (\sqrt{\alpha} \cos \sqrt{\alpha} l + \alpha_s \sin \sqrt{\alpha} l) C_2 = -\frac{\alpha_s h}{\alpha}. \end{cases} \quad (19)$$

Детерминант основной матрицы системы (19) совпадает с правой частью уравнения (14) для нахождения температуры T_f , поэтому ранг матрицы равен единице. Согласно теореме Кронекера-Капелли, чтобы система (19) имела решение, необходимо, чтобы ранг расширенной матрицы системы тоже был равен единице. Это возможно, когда все определители расширенной матрицы равны нулю:

$$\begin{cases} \sin \sqrt{\alpha} l = -\frac{2\alpha_s \sqrt{\alpha}}{\alpha_s^2 + \alpha}, \\ \cos \sqrt{\alpha} l = \frac{\alpha_s^2 - \alpha}{\alpha_s^2 + \alpha}. \end{cases} \quad (20)$$

Можно заметить, что уравнение (14) удовлетворяет системе (20) автоматически. Численно решая систему уравнений (20), получим температуру T_f^h ФП в поле (рис. 5).

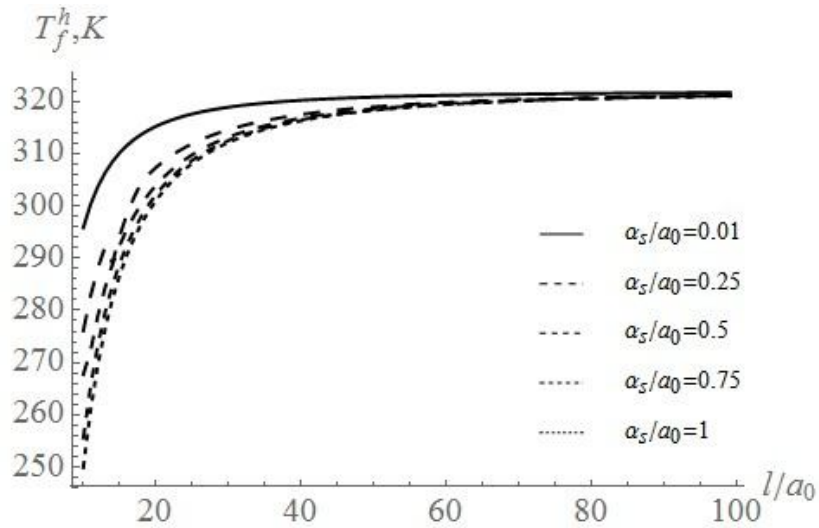


Рис. 5. Зависимость температуры T_f^h от толщины СЭП под действием однородного электрического поля h

В предельном случае отсутствия закрепления поляризации на границе СЭП ($\alpha_s = 0$) получим уравнение

$$\alpha \sin \sqrt{\alpha} l = 0, \quad (21)$$

имеющее минимальный положительный корень $\alpha = 0$ или $T_f^h = T_c$ и смещение температуры ФП отсутствует. В другом предельном случае ($\alpha_s \rightarrow \infty$) система уравнений (20) принимает вид

$$\begin{cases} \sin\sqrt{\alpha}l = 0, \\ \cos\sqrt{\alpha}l = 1, \end{cases}$$

решение которого соответствует $T_f^h = T_c - \frac{4\pi^2}{\alpha_0 l^2}$.

На рис. 6 приведена зависимость смещения $\Delta T = T_f - T_f^h$ температуры ФП под действием однородного электрического поля от толщины СЭП.

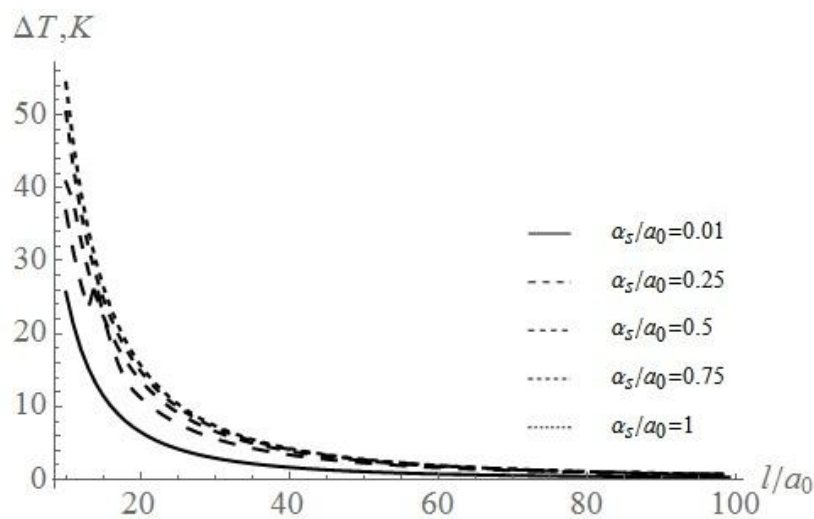


Рис. 6. Смещение ΔT температуры ФП от толщины СЭП под действием однородного электрического поля h

2. В случае неоднородного электрического поля $h(z) = h_0 z / l$ выражение (17) принимает вид

$$P(z) = C_1 \cos\sqrt{\alpha}z + C_2 \sin\sqrt{\alpha}z - \frac{h_0 z}{\alpha l}. \quad (22)$$

Аналогично предыдущему случаю, граничные условия (4) образуют систему линейных уравнений для нахождения констант интегрирования:

$$\begin{cases} \alpha_s C_1 - \sqrt{\alpha} C_2 = -\frac{h_0}{\alpha l}, \\ (\sqrt{\alpha} \sin\sqrt{\alpha}l - \alpha_s \cos\sqrt{\alpha}l) C_1 - (\sqrt{\alpha} \cos\sqrt{\alpha}l + \alpha_s \sin\sqrt{\alpha}l) C_2 = -\frac{h_0}{\alpha l} (1 + l\alpha_s), \end{cases}$$

ранг которой равен единице, и по теореме Кронекера-Капелли все определители расширенной матрицы должны также быть равны нулю:

$$\begin{cases} \sin\sqrt{\alpha}l = \frac{2\alpha_s\sqrt{\alpha}}{\alpha_s^2 + \alpha}(1 + l\alpha_s), \\ \cos\sqrt{\alpha}l = -\frac{\alpha_s^2 - \alpha}{\alpha_s^2 + \alpha}(1 + l\alpha_s). \end{cases} \quad (23)$$

Видно, что система уравнений (23), (14) будет иметь решение только в предельном случае отсутствия закрепления поляризации на границе СЭП ($\alpha_s = 0$), поэтому смещения температуры ФП в данном случае не наблюдается.

Заключение

Рассмотренная в статье ситуация представляет еще один пример аномальных физических явлений, когда сколь угодно слабое внешнее воздействие порождает конечный отклик системы. В данной ситуации причина конечного смещения температуры ФП в малом внешнем электрическом поле состоит в том, что поле меняет симметрию среды, в которой находится СЭП, – в ней появляется выделенное направление. Существуют и другие примеры подобных явлений. Малая вязкость качественно меняет течение жидкости, как в пограничном слое, так и во всем окружающем пространстве, создавая завихренность [2]. В результате появляется конечная сила сопротивления, подъемная сила при движении тела в жидкости. Связано это с тем, что вязкость, во-первых, является сингулярным возмущением, поскольку в уравнения гидродинамики добавляются пространственные производные более высокого порядка и меняются граничные условия; во-вторых, вязкость нарушает симметрию – исчезает операция обращения во времени, что и приводит к конечным эффектам даже при исчезающе малой вязкости. В квантовой механике известен эффект образования связанного состояния в неглубокой потенциальной яме, неспособной к локализации частицы без поля, при включении сколь угодно слабого магнитного поля [3]. При его включении меняется симметрия среды, в которой происходит движение частицы, и задача становится похожей на движение в одномерной потенциальной яме, где связанные состояния образуются всегда [4].

Известно влияние магнитного поля на пластичность диа- и парамагнетиков. Несмотря на то, что прямое силовое воздействие магнитного поля на магнитные примеси – стопоры для движения дислокаций – несущественно даже в максимально достижимых экспериментально магнитных полях, эффект имеет заметную величину [5, 6]. Это связывается с тем, что в присутствии магнитного поля открываются новые пути спин-зависимых реакций образования и разрыва ковалентных связей.

Отметим, что обнаруженный в статье эффект есть один из возможных путей объяснения размытия ФП в сегнеторелаксорах, вследствие наличия в них неоднородных внутренних электрических полей, обусловленных дефектной структурой [7].

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1.– М.: Физматлит, 2002. – 616 с.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. Ч. 1.– М.: Физматлит, 2001. – 736 с.
3. Демков Ю. Н., Друкарев Г. Ф. Частица с малой энергией связи в магнитном поле // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. № 1(7). С. 257-264.
4. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Монография. Изд. 2-е перераб. Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1971.
5. Головин Ю. И., Моргунов Р. Б. Влияние слабого магнитного поля на состояние неравновесных дефектов и пластичность ионных кристаллов // ЖЭТФ. 1999. Т. 115. №2. С. 605-621.
6. Головин Ю. И., Моргунов Р. Б., Иванов В. Е., Дмитриевский А. А. Эффекты разупорядочения ионных кристаллов, вызванные изменением спиновых состояний структурных дефектов в условиях парамагнитного резонанса // ЖЭТФ. 2000. Т. 116. № 2. С. 1080-1093.
7. Вахрушев С. Б., Жуков С. Г., Чернышев В. В. Особенности кристаллической структуры твердого раствора $(\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3)_{0.6}-(\text{PbTiO}_3)_{0.4}$ // ФТТ. 1999. Т.41. №7. С.1282-1285.

BOUNDARY-VALUE PROBLEMS OF MATHEMATICAL PHYSICS AND SECOND-ORDER PHASE TRANSITIONS IN EXTERNAL FIELDS IN THIN FILMS

V. N. Nechaev, A. V. Shuba

Military Educational and Scientific Center of the Air Force
“N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

Within the framework of the Landau phenomenological theory, the features of the phase transition in a thin ferroelectric film in an external electric field are investigated depending on the film thickness and the type of polarization fixed on its surface. It was found that in an electric field the phase transition is not only blurred, but also shifted in temperature, and the magnitude of the shift depends on the film thickness, the properties of its surface and does not depend on the field strength.

Keywords: polarization, dielectric susceptibility, phase transition, paraelectric phase.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ
СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО ЦЕНТРА ВОРОНЕЖСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА И РАЗРАБОТКА
НОВОЙ МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С РЕСУРСАМИ ЦЕНТРА

Н. В. Пауков, С. В. Борзунов, С. Д. Кургалин

Воронежский государственный университет
nic.paukov@yandex.ru

Смоделировано поведение пользователя Суперкомпьютерного центра Воронежского государственного университета, на основе полученных результатов создан новый Web-интерфейс центра, показано его использование для осуществления наиболее часто выполняемых действий.

Ключевые слова: моделирование поведения пользователя, суперкомпьютер, Web-интерфейс.

В 2017 г. в Суперкомпьютерном центре Воронежского государственного университета (ВГУ) был установлен новый кластер, имеющий производительность 28 Тфлопс по Linpack и имеющий десять вычислительных узлов, содержащих по два двенадцатиядерных процессора с 128 Гбайт оперативной памяти. Предоставляется возможность удаленного доступа к кластеру из сети Интернет при помощи протокола SSH. Управление порядком выполнения вычислительных задач и распределением свободных ресурсов осуществляет программа Slurm Workload Manager.

В настоящее время более чем пятьдесят пользователей имеют доступ к новому кластеру, и их число постоянно растет. Они занимаются вычислениями, имеющими научное значение, или изучают современные суперкомпьютерные технологии и алгоритмы параллельной обработки данных. В процессе использования кластера администраторами было выявлено, что большинство пользователей часто выполняют повторяющиеся действия, а также сталкиваются с долгой процедурой загрузки, компиляции и добавления в очередь исполнения новой вычислительной программы, что является серьезным фактором, снижающим скорость работы с кластером, а также стартовым барьером для начинающих пользователей.

Принимая во внимание выявленные особенности взаимодействия пользователей с суперкомпьютерной системой, было принято решение проанализировать сценарии её использования, смоделировать поведение среднестатистического пользователя, выявить наиболее сложные, но при этом часто встречающиеся и периодически повторяющиеся операции, а затем разработать новую модель взаимодействия с кластером, которая позволит упростить и ускорить их осуществление [1].

В ходе выполнения анализа рассматривались журналы действий на кластере, проводились опросы среди пользователей суперкомпьютерного центра. В результате была получена информация о том, что наиболее востребованными и частыми операциями являются проверка текущего состояния очереди исполне-

ния, оценка загруженности вычислительных узлов, регистрация новой задачи в очереди, а также просмотр статуса выполнения поставленной ранее задачи и получение результатов её работы. При этом многие из пользователей отмечают, что эти операции занимают большое количество времени, а также требуют предварительной настройки клиентского устройства, с которого осуществляется удаленный доступ к кластеру. Необходимость использования протокола SSH часто приводит к невозможности проверки очереди задач с мобильных устройств, а использование терминала для выполнения команд предполагает наличие навыков работы в семействе операционных систем Linux.

В большинстве случаев выполняемые наборы таких консольных команд являются схожими и повторяются раз за разом каждым из пользователей с незначительными корректировками, из чего следует возможность автоматизации или, по крайней мере, значительного ускорения и упрощения данных действий. Для таких этапов работы с кластером как просмотр общего списка активных вычислительных задач можно использовать не терминал, а более привычный для многих работающих с компьютерами людей графический интерфейс, имеющий настраиваемый внешний вид, и доступный как с настольных, так и с мобильных устройств [2].

Выяснилось также, что пользователи имеют ряд ожиданий и представлений о том, каким должен быть интерфейс, предоставляющий доступ к системам суперкомпьютера, среди которых наиболее востребованными являются следующие возможности:

- возможность использования интерфейса без необходимости настройки специальных программ на клиентских устройствах;
- возможность быстрого просмотра списка программ, которые находятся в стадиях исполнения или ожидания, а также информации о предположительном времени ожидания новой поставленной в очередь программы перед тем, как она начнет свое исполнение;
- возможность добавлять новую программу в очередь исполнения путем загрузки файла с исходным кодом и опционального заполнения формы, содержащей поля для указания параметров запуска и ограничений количества выделяемых ресурсов (объем требуемой программой памяти, необходимое время работы, запрашиваемое число процессорных ядер);
- возможность получать уведомления об изменении статуса исполнения программы после постановки её в очередь.

Выявление и систематизация данных ожиданий среди пользователей приводит к построению новой системы их взаимодействия с Суперкомпьютерным центром университета, попытка разработки которой была предпринята в рамках данной работы. Эта система представляет собой специальный графический Web-интерфейс, который для большинства стандартных сценариев использования кластера позволяет обойтись без необходимости явного соединения по протоколу SSH, дает возможность быстро выполнять названные выше часто встречающиеся операции, а также настраивать их параметры. Кроме того, особенностью созданного Web-интерфейса является доступность с любых, в том числе и мобильных устройств, имеющих выход в сеть Интернет.

Так как к настоящему моменту в мире был накоплен достаточно большой опыт создания подобных пользовательских интерфейсов, следует принимать во внимание архитектуру существующих решений, их особенности, а также сильные стороны и недостатки [3-4].

После анализа рассмотренных ожиданий пользователей от интерфейса было принято решение использовать для его разработки клиент-серверную модель, где на серверной части в качестве основного языка программирования был выбран язык программирования PHP в сочетании с системой управления базами данных MySQL. На стороне клиента, то есть конечного пользователя, используются языки разметки HTML, CSS, а также скриптовый язык JavaScript в сочетании с технологией AJAX, служащей для выполнения запросов без необходимости полной перезагрузки страницы. Доступ к интерфейсу может осуществляться через любой из современных браузеров.

На стороне сервера для взаимодействия с кластером устанавливается соединение с использованием протокола SSH, причем для операций, которые работают с общими для всех пользователей наборами данных, используется специальный сервисный аккаунт, а для осуществления действий от имени конкретного пользователя последнему предлагается ввести собственные данные для выполнения авторизации.

Наиболее важной и часто выполняемой командой является команда просмотра очереди программ, которые в данный момент исполняются, либо находятся в режиме ожидания свободного процессорного времени (рис. 1). Для получения информации о них по протоколу SSH выполняется команда `queue`, затем полученные данные форматируются на стороне сервера и отправляются на устройство клиента, где они отображаются в форме таблицы, содержащей наиболее существенные информационные поля, такие как название и автор поставленной задачи, текущий статус, объем используемых ресурсов, время ожидания. При выборе какой-либо ячейки таблицы можно посмотреть более подробную информацию о характеристиках данной задачи. Также присутствует возможность сортировки списка задач по статусу, автору, предположительному времени завершения.

Также одной из самых важных и необходимых команд является команда добавления новой вычислительной задачи в очередь исполнения. Данную операцию можно проделать в панели управления пользователя (рис. 2), для доступа к которой необходимо ввести логин и пароль, которые будут использоваться сервером для установки соединения по протоколу SSH.

Для добавления новой задачи требуется выбрать соответствующий пункт в панели управления, затем загрузить исходный код программы и опционально указать необходимые объемы ресурсов (в случае пропуска соответствующих полей будут использованы значения по умолчанию). Также если в данный момент все вычислительные узлы кластера являются загруженными, то система предлагает либо поставить программу в режим ожидания, тогда она начнёт выполняться в ближайшее освободившееся время, либо самостоятельно указать время начала исполнения.

После заполнения полей формы происходит проверка указанных пользователем данных на корректность, в случае успешности которой выполняется команда sbatch, которая регистрирует задачу пользователя в системе управления ресурсами Slurm, иначе пользователю предлагается исправить неправильно заполненные поля.

ID	Задача	Время	Ресурсы
30399	Test Computing Task #2 paukov_nv	В ожидании	Узлы: 1 CPUs: 1 ОЗУ: 1G
30400	Test Computing Task #0 paukov_nv	В ожидании	Узлы: 1 CPUs: 1 ОЗУ: 1G
32478	p1T_8192.sh sviridov_av	Осталось: 14д 01:59:43	Узлы: 1 CPUs: 1 ОЗУ: 1G
33235	gaussian_run_script.sh trunaeva_es	Осталось: 11д 18:03:27	Узлы: 1 CPUs: 1 ОЗУ: 62000M
33300	v111_z_2-4.sh romanov_av	Осталось: 2д 05:50:05	Узлы: 1 CPUs: 1 ОЗУ: 5G
33301	v111_z_4-6.sh romanov_av	Осталось: 2д 05:51:36	Узлы: 1 CPUs: 1 ОЗУ: 5G
33303	v111_z_8-10.sh romanov_av	Осталось: 2д 06:02:28	Узлы: 1 CPUs: 1 ОЗУ: 5G

Продлится до:
21.11.2018 17:49:14

Дата начала:
05.11.2018 12:07:36

Рис. 1. Просмотр информации о состоянии очереди

Добро пожаловать в панель управления!

Задача "Test Computing Task #4" завершилась с ошибкой. [Отчёт](#)

Задача "Test Computing Task #5" успешно завершила выполнение. [Результаты](#)

Выберите раздел:

[Добавить задачу](#)

[Мои задачи](#)

[Настройки](#)

[Выход](#)

Рис. 2. Панель управления пользователя

Как только статус задачи изменится, то есть задача переходит из режима ожидания в режим исполнения, либо происходит сбой (к примеру, ошибка времени исполнения или выход за рамки выделенных ресурсов), пользователь получит соответствующее уведомление. На странице настроек в панели управления можно указать адрес электронной почты, который будет использоваться для получения подобных уведомлений. В том случае, когда задача успешно завершит исполнение, появится возможность скачать файл, в котором будут храниться результаты её работы, а также посмотреть отчет, включающий общее затраченное время и дополнительную информацию.

В ближайшее время основное внимание будет уделяться повышению отзывчивости и удобства созданного интерфейса с учетом обратной связи и пожеланий пользователей. В дальнейшем будет проводиться разработка и внедрение новых функций, таких как накопление и анализ статистики, подсчет и отображение свободных промежутков времени для выполнения задач. Планируется создать простую, удобную и понятную среду, которая даст возможность использовать ресурсы Суперкомпьютерного центра без необходимости изучать команды терминала и иметь опыт администрирования систем Linux.

Таким образом, в настоящей работе был произведен анализ поведения пользователей Суперкомпьютерного центра ВГУ, на основе результатов которого разработан графический пользовательский интерфейс для управления исполнением задач на вычислительных узлах. Данный интерфейс позволяет выполнять наиболее частые операции по просмотру загрузки кластера и управлению задачами, и проектируется с учетом возможности дальнейшего расширения и разработки новых функциональных возможностей с учетом пожеланий пользователей.

Литература

1. Скакун С. В. Математическое моделирование поведения пользователей компьютерных систем // Математические машины и системы. - 2005. - № 2. - С. 122-129.
2. Дегтяренко И. А., Бурмистров И. В., Леонова А. Б. Методика оценки удовлетворенности пользователей интерфейсом интернет-сайта // Вестник Московского университета. Серия 14. Психология - 2010. - №1. - С. 94-109.
3. Антонов А. С. и др. Обеспечение оперативного контроля и эффективной автономной работы Суперкомпьютерного комплекса МГУ // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия Вычислительная математика и информатика. - 2015. - Т. 4. - № 2. - С. 33-43.
4. Головинский А. Л., Маленко А. Л., Белоус Л. Ф. Веб-портал системы управления суперкомпьютером // Вычислительные методы и программирование. - 2010. - Т. 11. - № 4. - С. 130-136.

MODELING THE BEHAVIOR OF A USER OF VORONEZH STATE UNIVERSITY SUPERCOMPUTER CENTER AND DEVELOPMENT OF A NEW MODEL OF INTERACTION WITH ITS RESOURCES

N. V. Paukov, S. V. Borzunov, S. D. Kurgalin

Voronezh State University

Behavior of a user of Supercomputer Center of Voronezh State University is modeled. The new web-interface for the Center was created based on collected data for performing the most frequently actions.

Keywords: user behavior modeling, supercomputer, web interface.

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОДСИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ СЛУЖБЫ СКОРОЙ МЕДИЦИНСКОЙ ПОМОЩИ В СРЕДЕ GPSS

И. М. Пашуева, А. В. Бондарев

Воронежский государственный технический университет
vapushka@ya.ru

В статье описано функционирование подсистемы управления центром скорой медицинской помощи, рассмотрены особенности реализации имитационной модели в среде GPSS, описаны этапы имитационного моделирования, объяснена необходимость разделения процесса построения модели на этапы, приведены результаты имитационного моделирования.

Ключевые слова: имитационное моделирование, система управления, GPSS

Подсистема управления центром скорой медицинской помощи обеспечивает эффективную работу районных подстанций. Подробно модель подсистемы управления центром скорой медицинской помощи описана в ранее опубликованных работах [1, 2, 3].

В качестве среды моделирования выбрана среда GPSS. Особенность моделирования в среде GPSS обусловлена ограничением на количество оператором модели. При построении подробной модели функционирования подсистемы управления центром скорой медицинской помощи количество операторов превышает допустимое значение и модель не запускается. Поэтому, чтобы разрешить данную ситуацию предложено провести моделирование в два этапа.

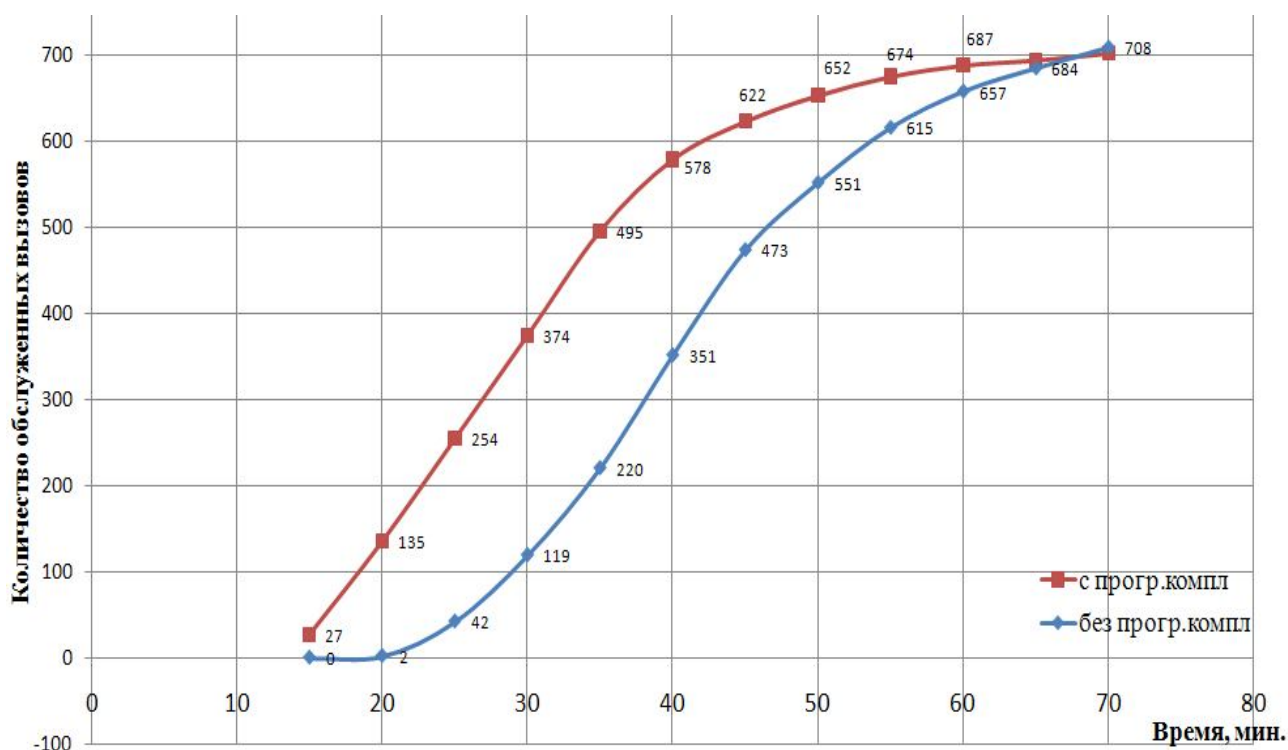
На первом этапе выбирается и подробно рассматривается работа районной подстанции отдельно от центра службы скорой медицинской помощи. В результате моделирования можно получить статистические данные по эффективности работы центра за рабочие сутки. Проводится несколько запусков модели с различной интенсивностью поступления вызовов на диспетчерский пункт. В ряде запусков модели можно зафиксировать переход в чрезвычайный режим работы районной подстанции, когда среднее время обслуживания вызовов превышает допустимое значение. Подробно об особенностях возникновения чрезвычайного режима работы описано в ранее опубликованных работах [4, 5, 6].

На втором этапе рассматривается функционирование подсистемы управления центрами скорой медицинской помощи. В этом имитационной модели районные подстанции описываются более сжато, опираясь на ранее проведенное имитационное моделирование и данные статистики. Основным интерес к данной модели обусловлен функционированием при условии возникновения чрезвычайного режима работы одной из районных подстанций. При этом запускается алгоритм выбора оптимального варианта перераспределения бригад скорой медицинской помощи между районными подстанциями. Алгоритмы

выбора оптимального управленческого решения описаны в ранее опубликованных работах [7, 8, 9].

В результате имитационного моделирования были получены статистические данные. Полученные данные сравнивались с данными, собранными в результате работы центра скорой медицинской помощи без применения подсистемы управления. Результаты сравнения представлены в виде двух графиков зависимости количества обслуженных вызовов от скорости обслуживания, представленных на рисунке.

В результате сравнения можно наглядно проследить, что использование алгоритмов помощи в принятии управленческих решений помогает сократить время обслуживания вызовов. Время обслуживания вызовов считается основным показателем эффективности работы центра скорой медицинской помощи.



Сравнение скорости обслуживания вызовов с применения подсистемы управления центром скорой медицинской помощи (верхняя кривая) и по данным статистики (нижняя кривая)

В результате имитационного моделирования данной подсистемы, несмотря на ограничение в количестве оператором используемых в одной имитационной модели, возможно сделать вывод, что использование подсистемы управления центром скорой медицинской помощи, упрощает работу диспетчеров, принимающих вызовы, повышает эффективность работы службы в целом, что является в свою очередь важной социально значимым аспектом, повышающим качество жизни населения города.

Литература

1. Пашуева И. М. Практическое применение сетей Петри в процессе моделирования распределенной сети районных центров службы скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева // Оптимизация и моделирование в автоматизированных системах: межвуз. сб. науч. тр. Воронеж, 2016. С. 61-68.
2. Пашуева И. М. Особенности разработки программного комплекса управления центром догоспитальной медицинской помощи / И. М. Пашуева // Математическое и компьютерное моделирование, информационные технологии управления: сб. тр. Школы для студентов, аспирантов и молодых ученых «МКМИТУ-2016», 2016. С. 144-147.
3. Пасмурнов С. М. Описание системы управления центром службы спасения с применением сетей Петри / С. М. Пасмурнов, Е. Н. Королев, А. В. Бондарев, И. М. Пашуева // Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика. Воронеж, 2018. № 6 (42). С. 266-269.
4. Пашуева И. М. Описание и оценка эффективности подсистемы поддержки принятия управленческих решений в условиях неопределенности с применением математической модели на основе оценки рисков на примере работы центра скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов, А. В. Бондарев // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2017. Т. 13. Вып. 6. С. 7-12.
5. Пашуева И. М. Моделирование экстренного режима работы центра скорой медицинской помощи в условиях ограниченности транспортных ресурсов / И. М. Пашуева // Виртуальное моделирование, прототипирование и промышленный дизайн. Материалы IV Международной научно-практической конференции. 2017. С. 29-34.
6. Пашуева И. М. Имитационное моделирование функционирования подстанции скорой медицинской помощи в условиях ограниченности транспортного ресурса / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов, А. В. Бондарев // Оптимизация и моделирование в автоматизированных системах: труды Всерос. молодежной научной школы. Воронеж, 2018. С. 82-85.
7. Пашуева И. М. Моделирование процессов принятия оперативных управленческих решений в системе управления центрами служб скорой медицинской помощи / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 69-73.
8. Пашуева И. М. Моделирование и анализ подсистемы управления центрами быстрого реагирования с помощью сетей Петри / И. М. Пашуева, С. М. Пасмурнов // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2011. Т. 7. № 9. С. 106-109.
9. Пашуева И. М. Моделирование работы распределенной сети служб скорой помощи с использованием функции агрегирования / И. М. Пашуева // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII междунар. семинара. Воронеж, 2015. Ч. 2. С. 65-68.

THE MODELING OF A SUBSYSTEM OF MANAGEMENT OF AMBULANCE SERVICES IN THE ENVIRONMENT OF GPSS

I. M. Pashueva, A. V. Bondarev

Voronezh State Technical University

The article describes the functioning of the control subsystem of the emergency medical center, describes the features of the simulation model in the GPSS environment, describes the stages of simulation, explains the need to divide the process of building the model into stages, presents the results of simulation.

Keywords: simulation, control system, GPSS.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРОЦЕССОВ В КОМПОЗИТНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ НА ОСНОВЕ InP, АКТУАЛЬНЫХ ДЛЯ ЭЛЕМЕНТОВ ЭЛЕКТРОНИКИ

Т. В. Прокопова¹, Е. А. Михайлюк², А. А. Михайлюк¹

¹Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж

²Старооскольский технологический институт имени А. А. Угарова (филиал) Национального исследовательского технологического университета «МИСиС»
kop1965@mail.ru

В данной работе проведено исследование электрофизическими методами структур со слоями $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ на основе InP. Данные материалы являются перспективными для использования в создании компонентов систем безопасности и связи. Определены тип проводимости, концентрация носителей заряда и тип энергетической ловушки и сечение ее захвата.

Ключевые слова: электронные процессы, композитные соединения, ширина запрещенной зоны, дифференциальная проводимость, концентрация носителей, сечение захвата.

Модулировано-легированные гетероструктуры InGaAs/InAlAs широко применяются в микроэлектронике в качестве базового материала для сверхвысокочастотных полевых транзисторов для приема и передачи электромагнитных волн (50 – 1000 ГГц) в приложениях широкополосной беспроводной связи (спутниковой, мобильной, специальной), радиолокации, а также в вычислительных логических схемах.

Целью настоящей работы является изучение электронных процессов на границе раздела в структурах с тонкими слоями полупроводников со стехиометрическими вакансиями, к которым можно отнести композитные соединения $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$. Исследуемая в работе структура представляет собой одиночный слой $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ толщиной около 80 нм, выращенный методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке InP. Средний состав коэффициента стехиометрии x по данным рентгеновской дифракции порядка 0.490, что обеспечивает хорошее соответствие постоянных кристаллических решеток в гетероструктуре $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ и возможность формирования гетероперехода с качественной границей раздела [1].

InAs и AlAs относятся к полупроводникам с кристаллической структурой типа сфалерит, с помощью модельного расчета методом интерполяционных схем рассчитана ширина запрещенной зоны твердого раствора $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ (табл. 1) [2].

Известная методика по наклону линейного участка зависимостей $1/C^2(V)$ позволяет оценить значение концентрации примеси на границе области объемного заряда (табл. 2). Электрофизическими измерениями методами вольт-

фарадных характеристик и Холла показано, что слои имеют n – тип проводимости, при комнатной температуре концентрация носителей порядка $6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, подвижность – $885 \text{ см}^2/\text{В с}$ [2].

Таблица 1

Параметры зонной структуры

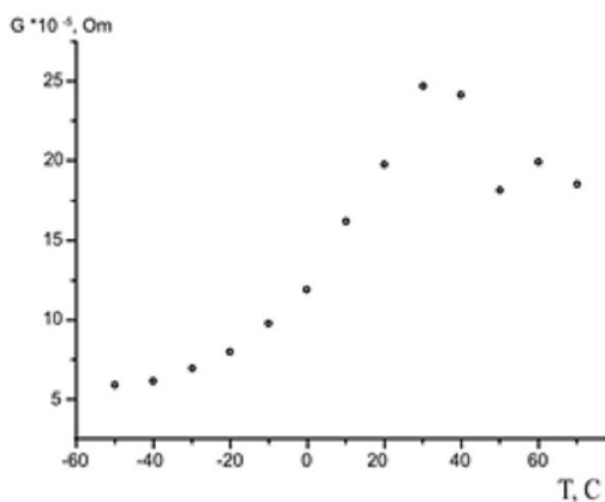
	InAs	AlAs	In _x Al _{1-x} As		InP
			$x \approx 0.5235$	$x \approx 0.490$	
$\alpha_0, \cdot 10^{-10} \text{ м}$	6.0583	5.6614	5.8610		5.8690
$E_g(T = 0 \text{ K}), \text{ эВ}$	0.417	3.010	1.535		1.424
$E_g(T = 300 \text{ K}), \text{ эВ}$	0.360	2.914	1.395	1.452	1.353

Таблица 2

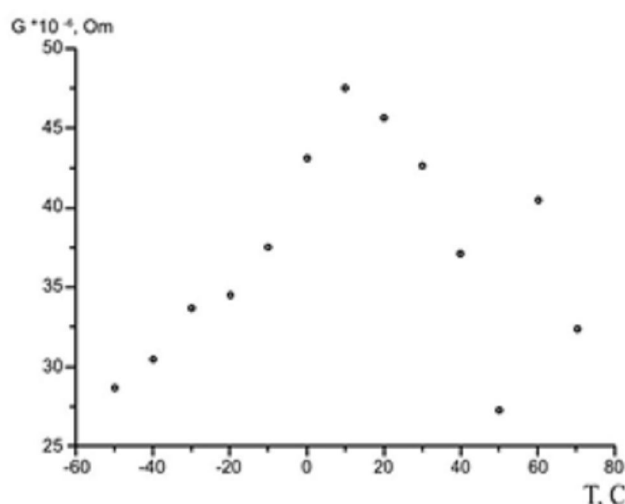
Оценка концентрации примеси исследуемых образцов

In _x Al _{1-x} As	$N, \text{ см}^{-3}$		проводимость
	ВФХ	метод Холла	
образец $x \approx 0.5$			n – тип
0.5235	$1.85 \cdot 10^{15}$	$5.20 \cdot 10^{16}$	
0.490	$8.21 \cdot 10^{15}$	$6.01 \cdot 10^{15}$	

Методом анализа частотных зависимостей дифференциальной проводимости $G(f, T)$ [2] произведена оценка энергии E ловушечного центра. Установлено, что пик дифференциальной проводимости ($E \sim 0,49 \text{ эВ}$) отчетливо проявляется в процессе варьирования частоты тестового сигнала в диапазоне от 1000 Гц до 10 кГц. Дальнейшее увеличение частоты приводит к смещению максимума в область высоких температур и последующему исчезновению при 1 мкГц (рисунок, а, б).



а



б

Температурные зависимости дифференциальной проводимости $G(T)$ при частотах (f): (а) $2.47 \cdot 10^4 \text{ Гц}$, (б) $4.59 \cdot 10^3 \text{ Гц}$

Дальнейшее понимание кинетических процессов в гетероструктуре $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ требует определения величины сечения захвата глубокого центра, оценка которого произведена с использованием значений частот и температур, соответствующих максимумам экспериментальных температурных зависимостей дифференциальной проводимости $G(T)$, согласно выражению:

$$\omega = \sigma \cdot v \cdot N_c \cdot \exp\left(-\frac{E}{k \cdot T}\right),$$

где $v = 10^7$ см/с – тепловая скорость свободных носителей заряда, $N_c = 10^{19}$ см⁻³ – эффективная плотность состояний, $k = 8.6 \cdot 10^{-5}$ эВ/К – постоянная Больцмана, E – энергия центра, $\omega = 2 \cdot \pi \cdot f$, круговая частота при различных значениях линейной частоты тестового сигнала (f).

Таким образом, проведенные электрофизические исследования показывают, что в исследованной гетероструктуре $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ наблюдается модуляция пространственного заряда, а процессы токопрохождения связаны с наличием в середине запрещенной зоны твердого раствора $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ глубокого центра нейтрального типа ($\sigma \sim (10 \div 14) \cdot 10^{-14}$ см²) [3], эффективная энергия которого ~ 0.49 эВ.

Авторы выражают искреннюю благодарность всему коллективу Новосибирского Института физики полупроводников СО РАН и лично Гилинскому Александру Михайловичу за предоставленные образцы и плодотворное обсуждение результатов.

Литература

1. Глубокие центры на границе раздела в гетероструктуре $\text{In}_{2x}\text{Ga}_{2(1-x)}\text{Te}_3/\text{InAs}$ и $\text{In}_2\text{Te}_3/\text{InAs}$ / Э. П. Домашевская, Е. А. Михайлюк, Т. В. Прокопова, Н. Н. Безрядин // Физика и техника полупроводников. – 2016. – Т. 50. – № 3. – С. 313-317.
2. Михайлюк Е. А. Электрофизические измерения твердых растворов $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ / Е. А. Михайлюк, Т. В. Прокопова, Д. А. Жукалин // Конденсированные среды и межфазные границы. 2019. – Т. 21(1). – С. 93-98.
3. Милнс А. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках / А. Милнс; пер. с англ. – М.: Мир, 1977. – 562 с.

FEATURES OF ELECTRONIC PROCESSES IN COMPOSITE COMPOUNDS BASED ON InP ACTUAL FOR ELECTRONIC ELEMENTS

T. V. Prokopova¹, E. A. Mikhailyuk², A. A. Mikhailyuk¹

¹Military Training and Research Center Air Force “Air Force Academy n. a. prof. N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin”, Voronezh

²Sary Oskol Technological Institute n. a. A. A. Ugarov (branch) of National research technological University “MISIS”

In this work, we studied the structures with the $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ layers based on InP by the electrophysical methods. These materials are promising for use in creating components of security and communication systems. The type of conductivity, carrier concentration, and type of energy trap are determined.

Keywords: electronic processes, composite compounds, band gap, differential conductivity, carrier concentration, capture cross section.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ ОТЛИВКИ ПРИ ЛИТЬЕ В КОКИЛЬ С ДОЖДЕВЫМ ПОДВОДОМ МЕТАЛЛА И ЧУГУННЫМ ХОЛОДИЛЬНИКОМ

Т. И. Сушко, И. И. Чернышев, Р. Ш. Караев, Т. В. Пашнева

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
tat120675@yandex.ru

Объект исследования – деталь «Вкладыш». Она относится к опорной конструкции коленчатых валов. Используется в сельскохозяйственном машиностроении, горной промышленности и предназначена для удержания коленчатого вала в оправке и компенсации колебаний при вращении. К детали предъявляется ряд требований по эксплуатации: работа в условиях знакопеременных вращательных нагрузок и трения, в диапазоне температур от 100° С до 250 °С, длительная устойчивость к истиранию.

Ключевые слова: отливка «Вкладыш», ручной кокиль, отливка.

Данная деталь имеет массу 255 кг, масса отливки 394 кг. Габаритные размеры данной детали составляют 740 × 690. 3D-модель детали и её эскиз приведены на рис. 1 (а, б). Изготовление мелкосерийное, ручной кокиль.

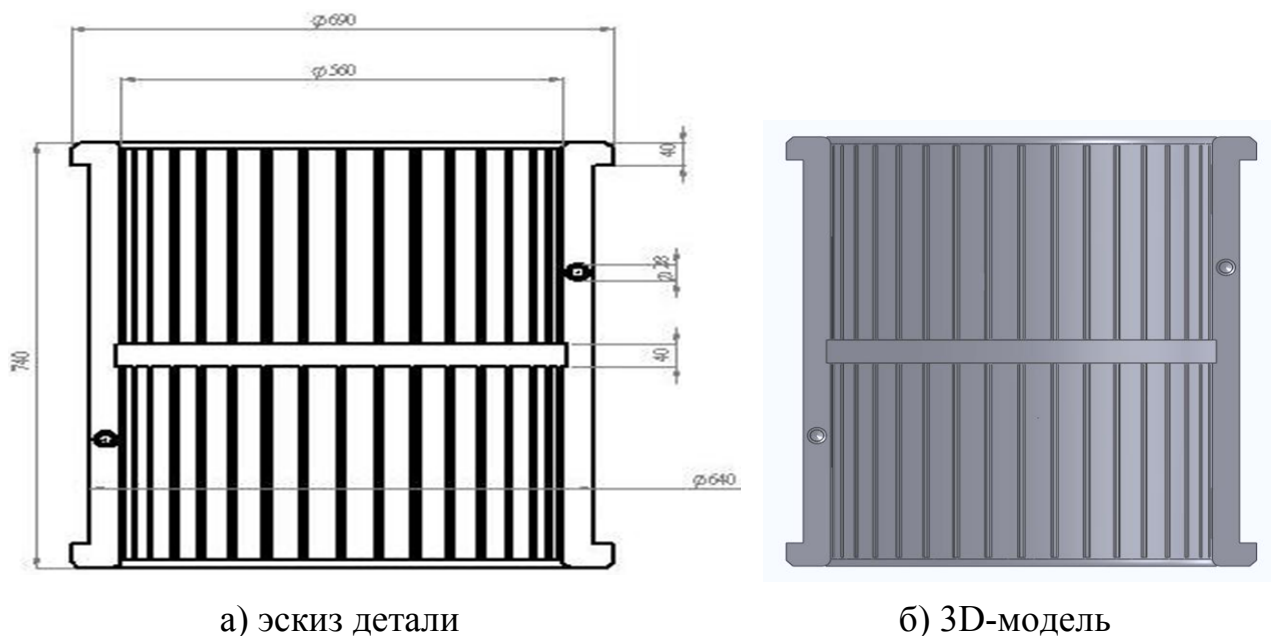


Рис. 1. 3D модель и эскиз детали «вкладыш»

Отливки такого типа востребованы в сельскохозяйственной и перерабатывающей промышленности, и, в связи с этим, необходимо повышать её конкурентоспособность на отечественном рынке путём снижения себестоимости её изготовления с учётом специфики частного предприятия.

Деталь работает в условиях знакопеременных вращательных нагрузок и трения, в диапазоне температур от 150 °С до 250 °С. В связи с условиями работы, оловянная бронза марки Бр05Ц5С5 ГОСТ 613 – 79 выбрана как оптимальный материал в плане технологических и эксплуатационных свойств и как основное требование заказчика. Поэтому рассматриваем процесс изготовления отливки только для оловянных бронз литьём в кокиль. Центробежное литьё данной отливки на ООО «АвтоЛитМаш» затруднено в связи с отсутствием центробежных машин для отливок данных размеров.

Для получения качественной плотной отливки в кокиле необходимо стремиться к созданию условий, обеспечивающих встречу фронтов затвердевания металла со стороны формы и стержня на тепловой оси стенки отливки. Такие условия возможны при использовании металлических стержней, как наиболее теплоёмких.

Для того чтобы отливка не подвергалась воздействию напряжений при охлаждении, металлические стержни делают составными. Материал для стержня СЧ 30 ГОСТ 1412 – 85. Так как оловянная бронза имеет широкий интервал затвердевания, то необходимо применять холодильники. Их рекомендуют изготавливать как из чугуна, так и из меди.

Для моделирования изменяли материал и толщину холодильника.

Высоту холодильника принимаем равной половине высоты нижней массивной части отливки: $h_{хол} = 23,15$ см. Анализ полученных данных в СКМ LVM Flow показал полное отсутствие усадочных дефектов, интенсивное равномерное охлаждение отливки в форме благодаря металлическому стержню и положительные значения по микропористости в пределах от 0,85 и выше (рис. 2, 3).

При использовании металлического стержня с уменьшением толщины стенок кокиля отливка затвердевает более равномерно, так как он обладает большей теплопроводящей способностью. Локальное время затвердевания идёт снизу вверх (рис. 4).

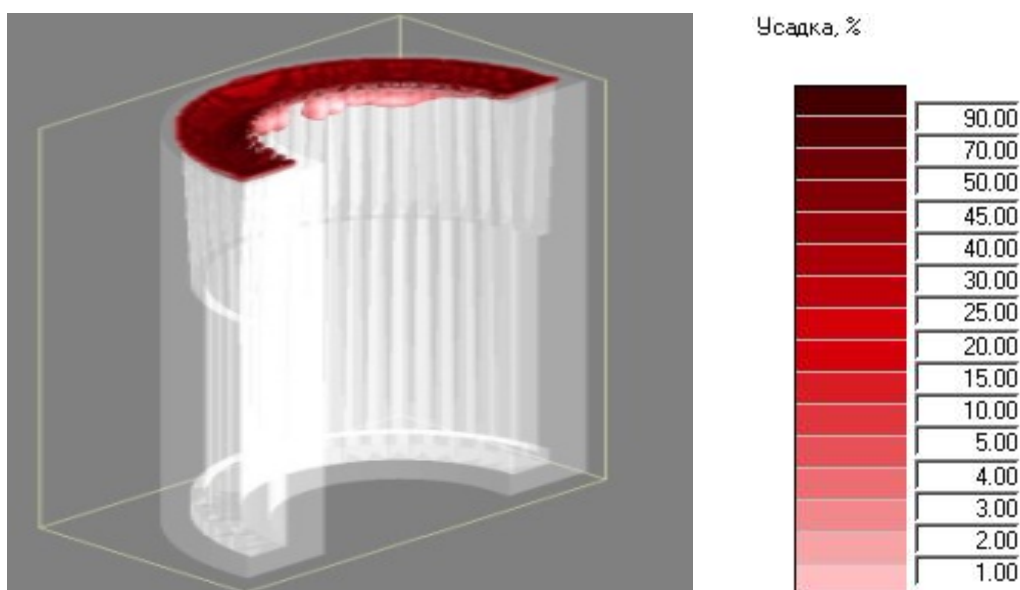


Рис. 2. Усадочные дефекты с чугунным холодильником

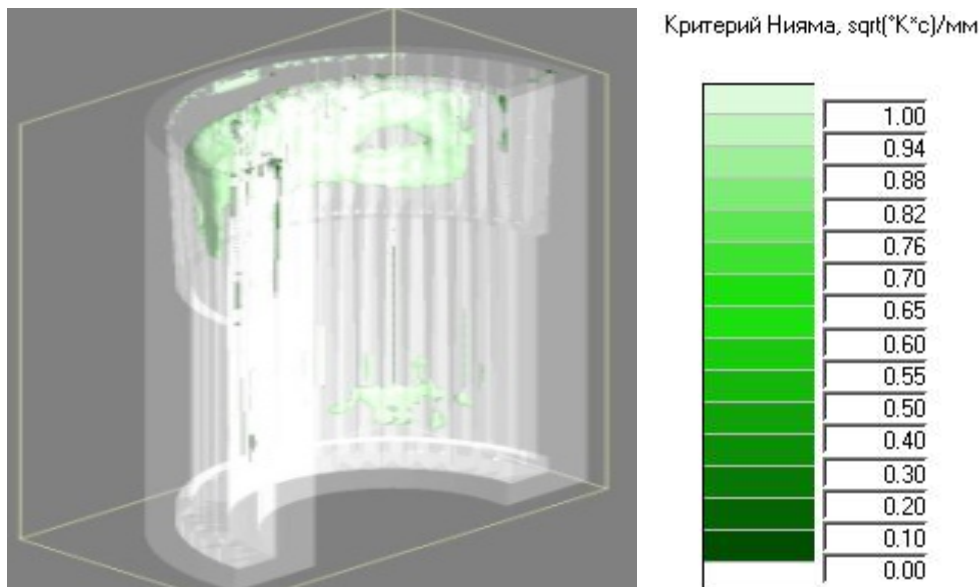


Рис. 3. Микропористость

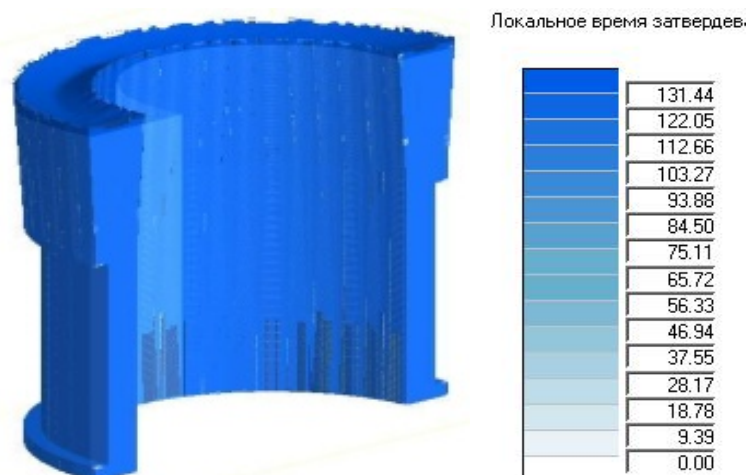


Рис. 4. Локальное время затвердевания отливки в форме

Равномерное охлаждение нижней части отливки можно также пронаблюдать из рассчитанных температурно-временных полей, представленных на рис. 5.

Затвердевание начинается практически сразу после заполнения расплавом всей формы не перекрывая доступ питания остальных частей отливки, ввиду чего она и получается без усадочных дефектов.

Для установления оптимального теплового режима для формирования отливки провели сравнительный анализ различных температурных режимов нагрева кокиля и температуры заливки. Для нас важно, чтобы сохранялся градиент температур в форме, таким образом, можно получить бездефектную отливку. Температура кокиля менялась от 150 до 250⁰ С, а температура заливки от 1110 до 1170⁰ С. Количественная оценка температур, с точки зрения процесса затвердевания показала, что наиболее оптимальным тепловым режимом заливки формы будет следующий – температура заливки 1150⁰ С и температура кокиля – 320⁰ С. Именно при таком режиме сохраняется равномерность затвердевания по всему объёму, позволяющая избежать большинства дефектов на

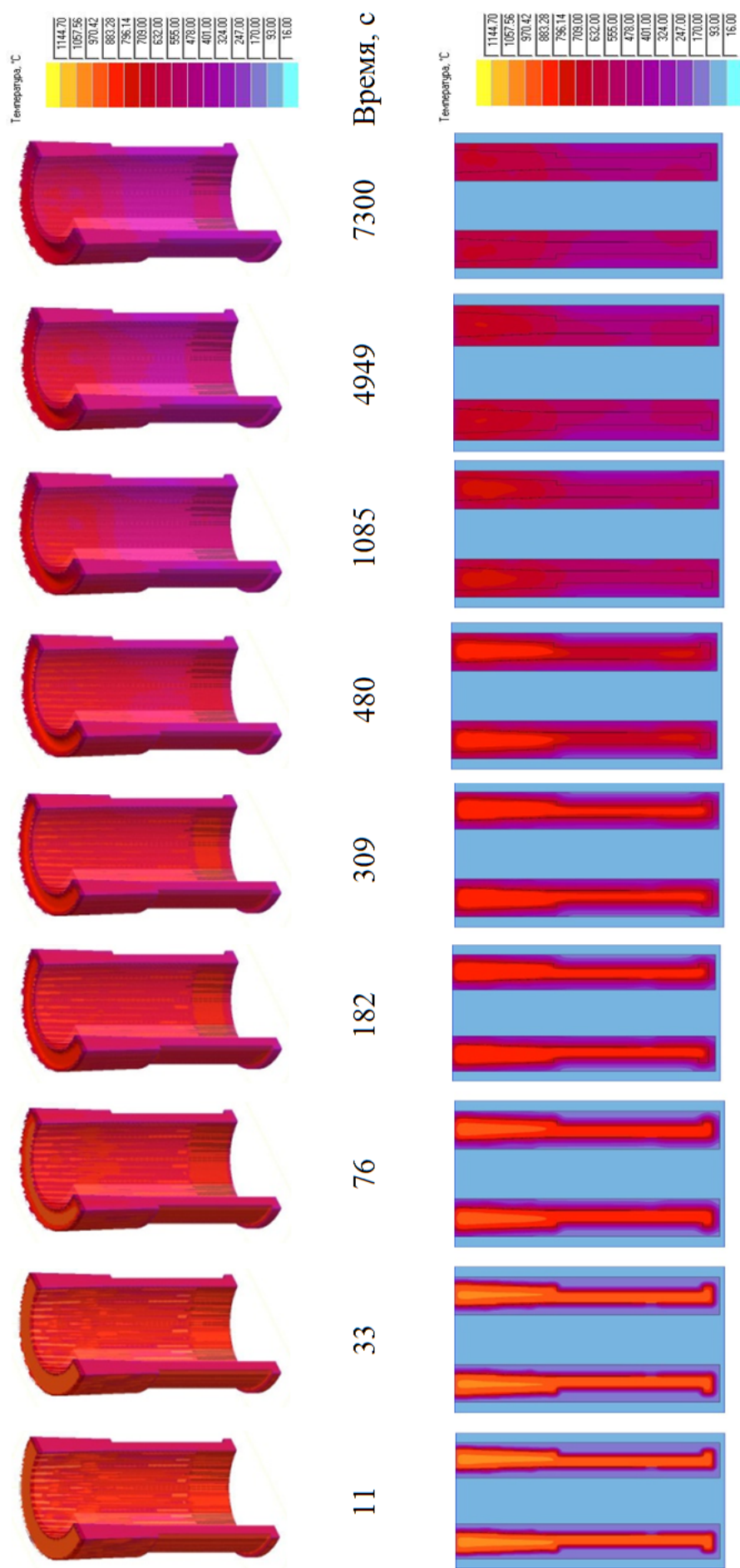


Рис. 5. Температурно-временные поля для литья в кокиль с дождевым подводом металла при использовании металлического стержня и холодильника из чугуна

стадии затвердевания. Кроме того можно было использовать нагрев кокиля до 350 °С, однако тогда кокиль бы подвергался излишнему тепловому удару, который снижает его срок службы. При температуре кокиля ниже 350 °С наблюдается более сильный перепад температур в объеме отливки, что может привести к короблению.

Литература

1. Гини Э. Ч. Технология литейного производства. Специальные способы литья: учеб. пособие / Э. Ч. Гини, А. М. Зарубин, В. А. Рыбкин. – М: Издательский центр «Академия», 2005. – 352 с.
2. Галдин М. Н. Цветное литьё: Справочник / М. Н. Галдин, Д. Ф. Чернега, Д. Ф. Иванчук. – М: Машиностроение, 1989. – 528 с.
3. Дубинин Н. П. Кокильное литьё: Справочник / Н. П. Дубинин, О. А. Беликов, А. Ф. Вязов. – М: Машиностроение, 1967. – 460 с.
4. Сушко Т. И. Компьютерное моделирование физического питания отливок СВС в литье по выплавляемым моделям / Т. И. Сушко, В. В. Туришев, Т. В. Пашнева, С. В. Попов // Вестник Магнитогорского техн. университета им. Г. И. Носова. 2018. – Т.16. – № 1. – С. 45-53.
5. Сушко Т. И. Некоторые аспекты технологии дифференцированного обучения курсантов дисциплине «Физика» с моделированием междисциплинарного / Т. И. Сушко, Р. Ш. Караев, С. В. Попов, Т.В. Пашнева // Вестник науки и образования. – 2019. – № 4(58). Ч. 2. – С. 60-63.

MODELING OF HARDENING PROCESSES OF CASTING WHEN CASTING IN COGIL WITH RAIN METAL SUPPLY AND CAST IRON REFRIGERATOR

T.I. Sushko, I.I. Ghernyshev, R.Sh. Karaev, T.V. Pashneva

Military Educational and Scientific Center of the Air Force
“N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

The object of studying is “insert” detail. It relates to the support structure of crankshafts. It is used in agricultural engineering, mining and is designed to hold the crankshaft in the mandrel and compensate for fluctuations during rotation. A number of operational requirements are presented to the part: work in conditions of alternating rotational loads and friction, in the temperature range from 100 °C to 250 °C, long-term abrasion resistance.

Keywords: casting “Insert”, manual chill mold, casting.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ИСПОЛЬЗУЕМОЕ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ ПРИЧИН БРАКА, ВОЗНИКАЮЩЕГО В СТАЛЬНЫХ ОТЛИВКАХ

Т. И. Сушко, И. И. Чернышев, Р. Ш. Караев, Т. В. Пашнева

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия
им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
tat120675@yandex.ru

Цель работы – исследовать влияние скорости заливки низколегированной стали 35ХМЛ в условиях литья в песчано-глинистые формы на возникновение дефектов усадочного характера в отливке «Корпус» в определенных согласно техническим требованиям местах сопряжений отливки.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, литейное производство, отливка «Корпус».

Компьютерное моделирование в литейном производстве помогает не только скорректировать технологию изготовления деталей, но и в онлайн режиме менять технологические параметры, быстро реагируя, сужая круг причин стимулирующих их рост. [1]. Произвести анализ свойств материалов, получить сведения и карты нахождения их в масштабе детали, помогают численные методы и математическое прогнозирование. Рассмотрим отливку запорной арматуры «Корпус» (рис. 1), входящую в состав газо- или нефтепровода, следовательно она испытывает переменные динамические нагрузки, давления, разброс сезонных температур. Отливка со строгими требованиями в эксплуатационном режиме. Марка сплава, из которого она отливается – 35ХМЛ ГОСТ 977-88. Ее масса с литниками порядка 38 кг.

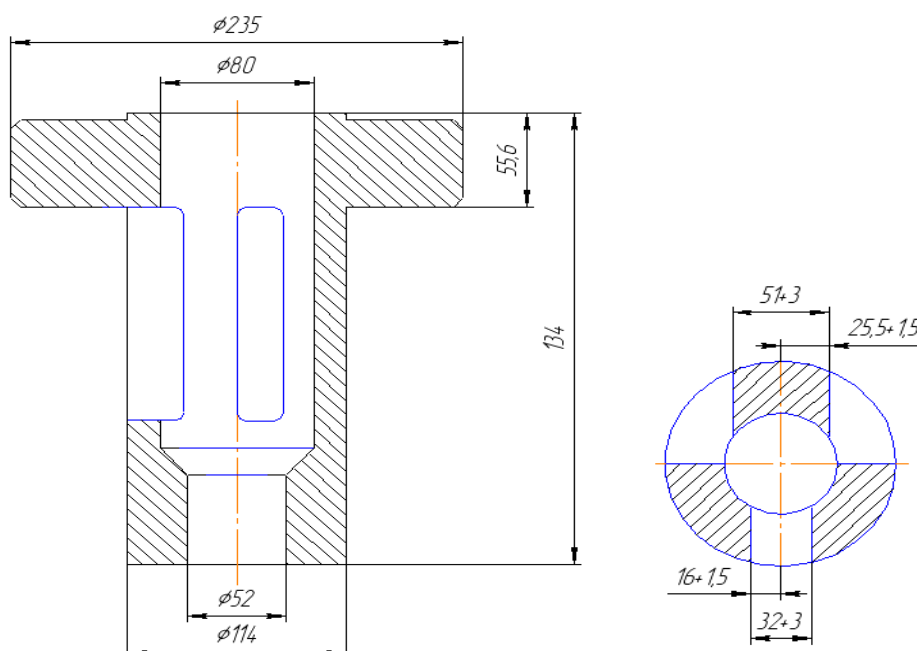


Рис. 1. Деталь «Корпус»

Во время механической обработки проявляется брак в виде усадочной пористости в местах сопряжений фланцев. Этот факт является критичным и приведет к поломке нефтеоборудования, выходу трубопровода из строя. Такие дефекты часто возникают из-за нарушения питания термического узла отливки жидким металлом во время затвердевания, приводит к неравномерному затвердеванию и усадке.

Авторы в [2] привели классификацию технологических параметров, влияющих на возникновение дефектов усадочного характера, опираясь на дерево компонентов и сочетания количественных и качественных методов моделирования. Они учли многочисленные производственные опыты, математическую модель и программу СКМ LVM Flow. В табл. 1 приведены наиболее важные технологические параметры, влияющие на возможность образования усадочных дефектов для стальных отливок в литье в песчано-глинистые формы.

Таблица 1

№ п/п	Наименование возможных причин возникновения усадочных дефектов
1	Питание затвердевающей отливки
2	Направленности затвердевания
3	Температура заливки
4	Скорость заливки расплава в форму

Посредством CAD-программы SolidWorks 2016 построена 3D-модель отливки (рис. 2) и 3D-модели литниковой системы, прибыли и стержня. Затем они были конвертированы в необходимый формат LVM Flow, при этом установлены виртуальные температурные датчики, позволившие проследить зависимость изменения температуры от времени в интересующих нас точках. Известно [3, 4], что, если корректировать скорость заливки расплава, то можно пробовать устанавливать критические значения пористости и усадочной раковины в отливке, т.е. управлять процессом образования дефекта. При большой скорости заливки, отливка значительно меньше рассеивает тепло в форму и отдает его большую часть прибыли, при этом сосредоточенная раковина становится больше, а рыхлость отливки становится меньше. Следовательно, необходимо ее регулировать, стремясь выдерживать ее равномерность и ламинарность течения сплава в сечениях разной формы.

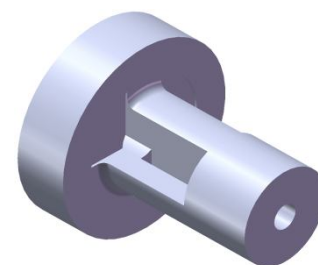


Рис. 2. 3D-модель отливки «корпус»

Места установки виртуальных датчиков показаны на рис. 3.

Расчетное время заливки отливки составляет 12 секунд, что сопоставимо с базовой технологией. Рассмотрено пять вариантов с изменением времени заливки расплава в форму в интервале от 6 до 12 секунд с шагом в 2 секунды. Графики зависимости изменения температуры от времени и количества жидкой фазы расплава в интервале до 6 с, показаны на рис. 5. Аналогичные результаты дали все другие опыты.

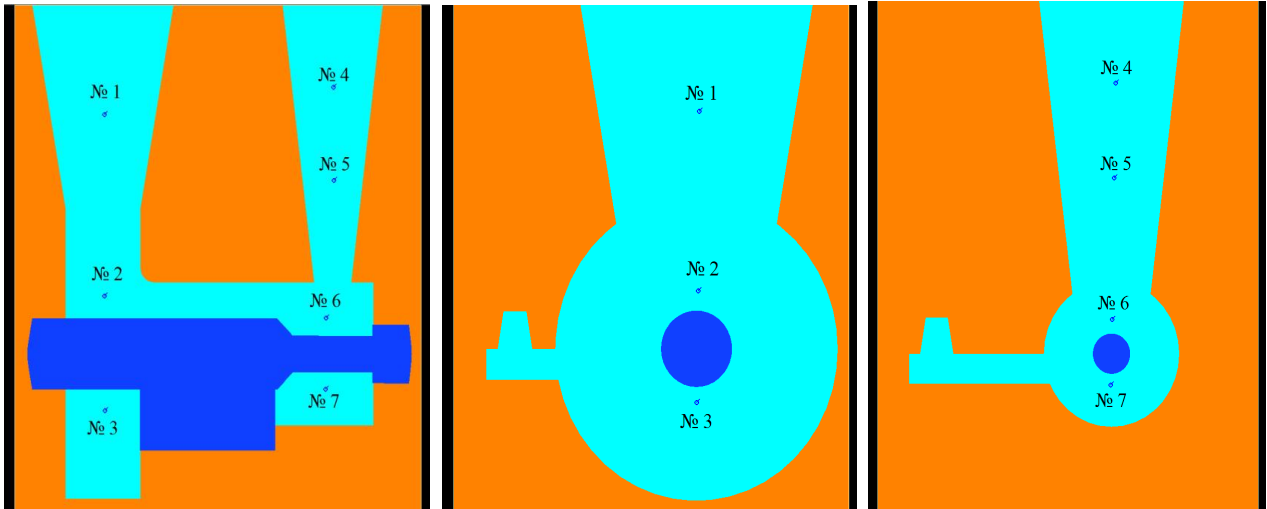
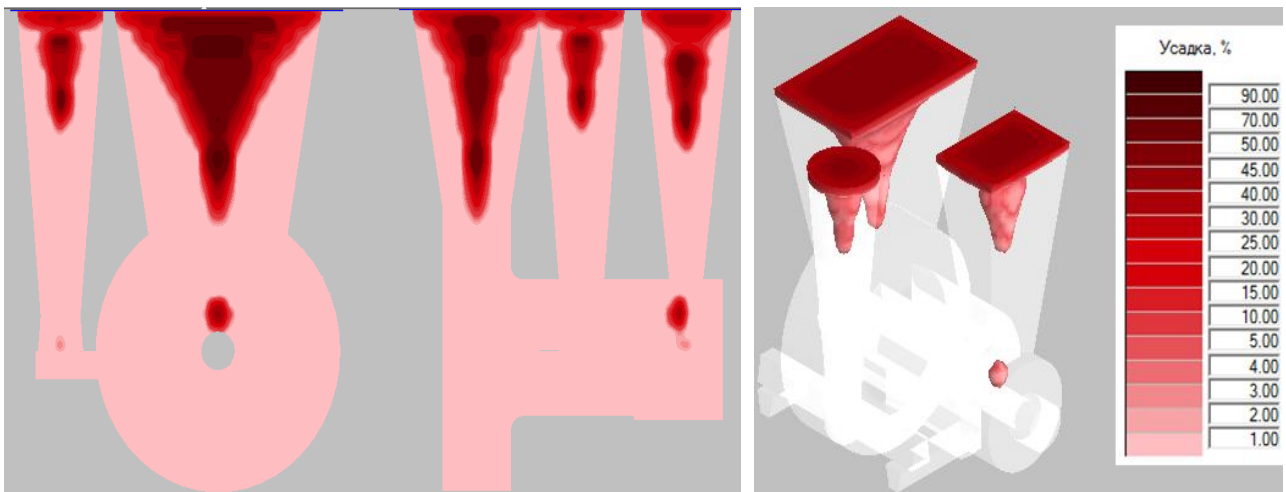
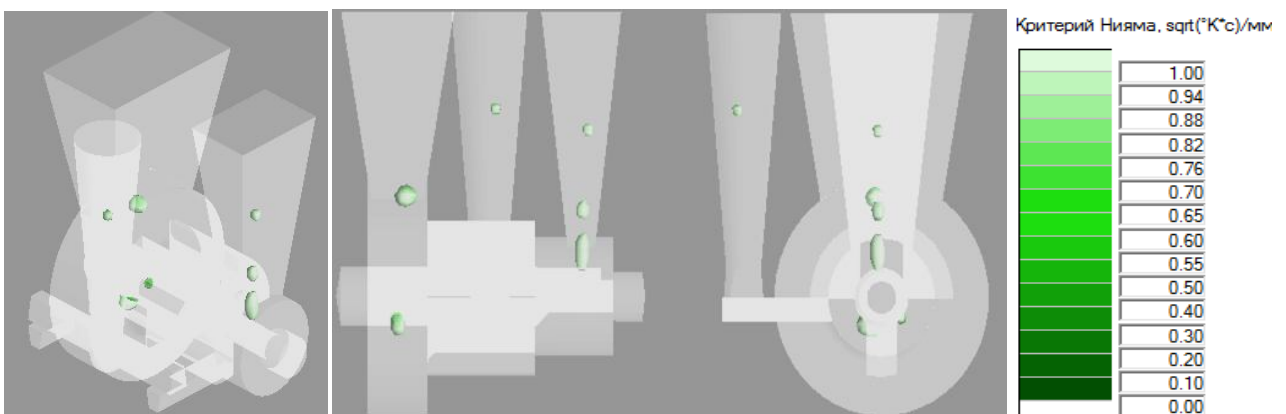


Рис. 3. Расположение виртуальных датчиков в отливке



а)



б)

Рис. 4. Изменение времени заливки до 6 с: распределение усадки (а); распределение микропористости (б)

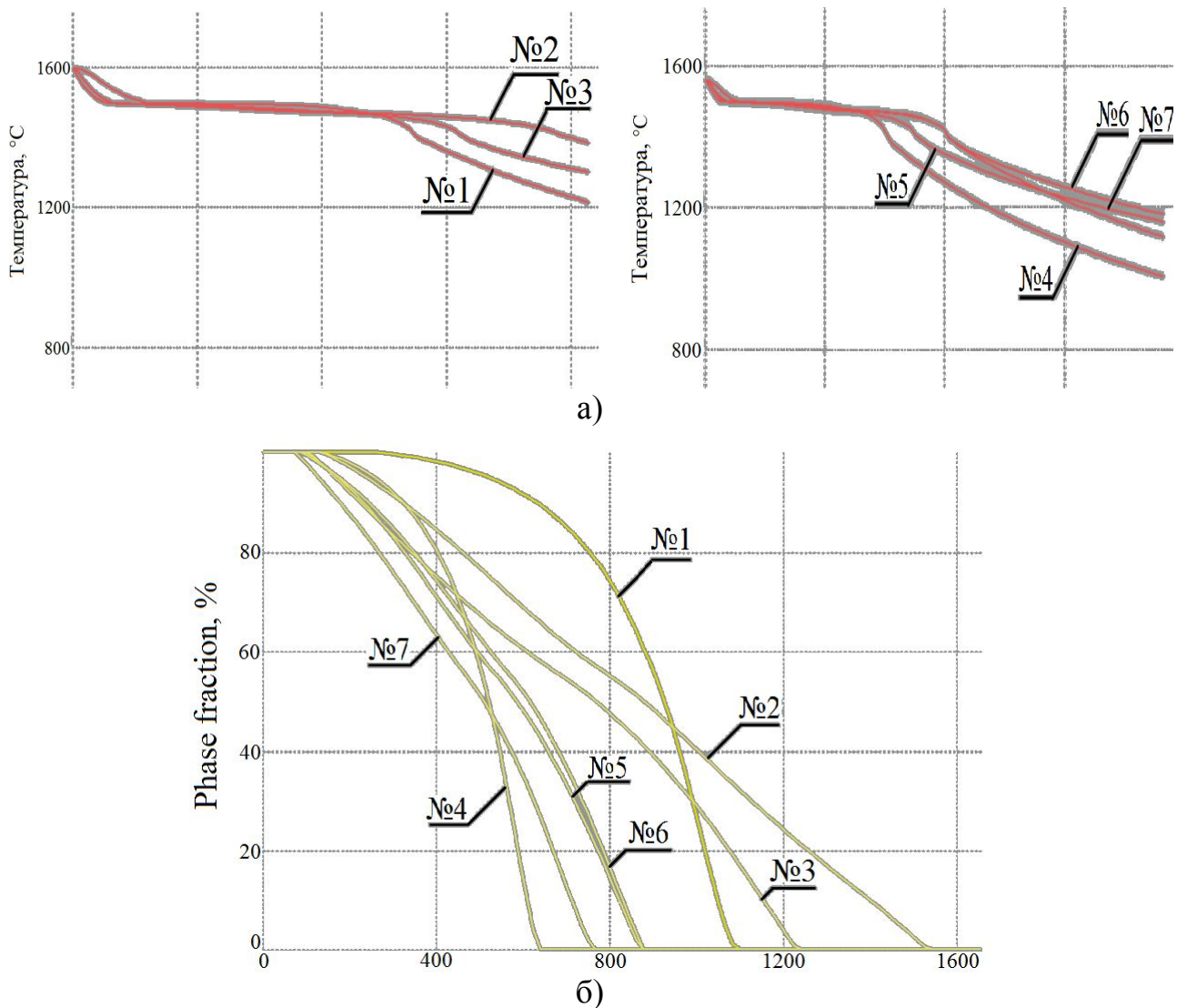


Рис. 5. Графики зависимости изменения температуры от времени (а); графики зависимости количества жидкой фазы от времени (б)

Разрыв и нарушение питания в подприбыльной области во время затвердевания расплава приводит к тому, что в нижней части прибыли затвердевание протекает быстрее, чем под прибылью и в ее верхней части. На одном из этапов затвердевания образуется закрытая усадочная раковина, что подтверждают кривые охлаждения 4, 5, 6 и 7, расплав в кривой 5 охлаждается существенно интенсивнее, чем во всем остальных точках сложного термоузла (4, 6 и 7). Следовательно, регулирование скорости заливки расплава в форму для данной отливки не дало каких-либо положительных результатов по снижению, расположению и объему усадочных дефектов. Прекращение питания массивного узла в подприбыльной области визуализирует усадочные дефекты, но не дает возможности их управления и не отражает причины.

Итак, выявлена наиболее вероятная причина образования дефектов в данном случае – прекращение питания отливки прибылью, следовательно, во избежание ее проявления в дальнейшем, согласно табл. 1, необходимо регулировать данный процесс.

Как правило, для этого используют различные технологические приемы, связанные с конструктивными изменениями литниково-питающей системы отливки, что позволяет расплаву прибыли находиться в жидком состоянии гораздо дольше по времени, например, устанавливая на нее обогревающую термическую оболочку (мелкая керамическая крошка, песок, гематит), которая не увеличивает дополнительный расход расплава и для стальных отливок снижает основной показатель уровня литейной технологии – технологический выход годного, так как толщина ее обмазки 3-5 мм [5]. Она принимает расплав и подогревает прибыль, тем самым препятствуя ее преждевременному охлаждению за счет протекания в течение 2-3 минут экзотермических реакций, выделяющих около 8 МДж/кг энергии, обеспечивая направленное затвердевание. При этом зеркало металла в прибыли в течение питания отливки опускается равномерно по всему сечению прибыли, что приводит к оптимизации объема расплава и отсутствия вытянутой в вертикальном направлении усадочной раковины. Проведен расчет необходимых размеров экзотермических вставок на прибыли (табл. 2).

Таблица 2

Размеры экзотермических оболочек

	Ширина А, мм	Высота В, мм	Длина С, мм	Диаметр отверстия D, мм	Уклон $f, ^\circ$
Прибыль № 1	15,0	135,0	190	20	2
Прибыль № 2	15,0	196,5	110	15	1,5

Согласно представленным размерам отливки и литниково-питающей системы с экзотермическим обогревом, построена ее 3D-модель (рис. 6).

Ход затвердевания отливки с такой разогревающей формой питания и количество жидкой фазы (в %) приведены на рис. 7а. Расплав с преимущественным процентным содержанием жидкой фазы в прибыли находится достаточное время для того, чтобы избежать усадки в теле отливки, как было показано на рис. 4. Разрыв питания отливкой из прибылей отсутствует, и прибыли затвердевают в последнюю очередь, тем самым соблюдая принцип затвердевания тела отливки снизу вверх.

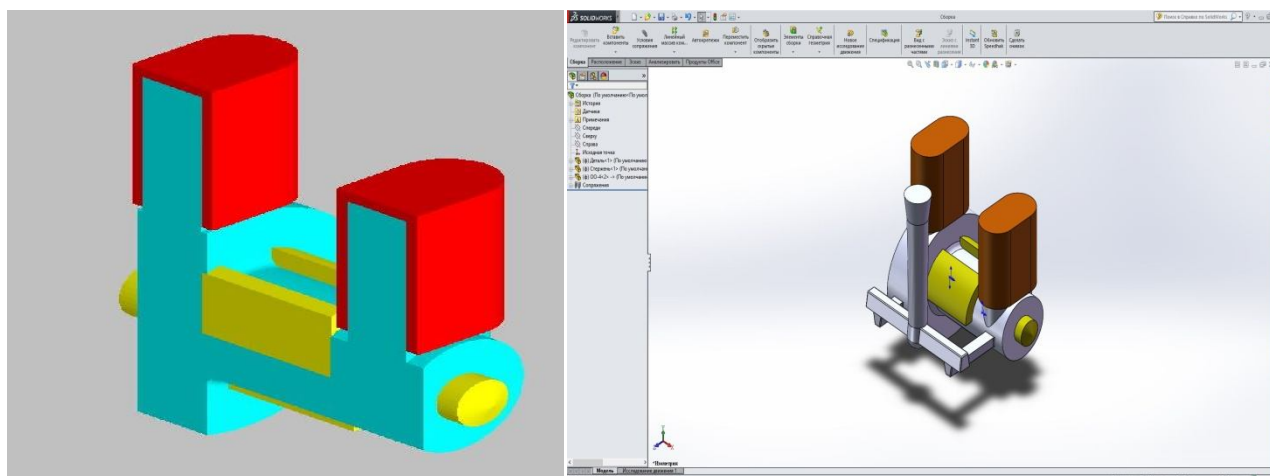
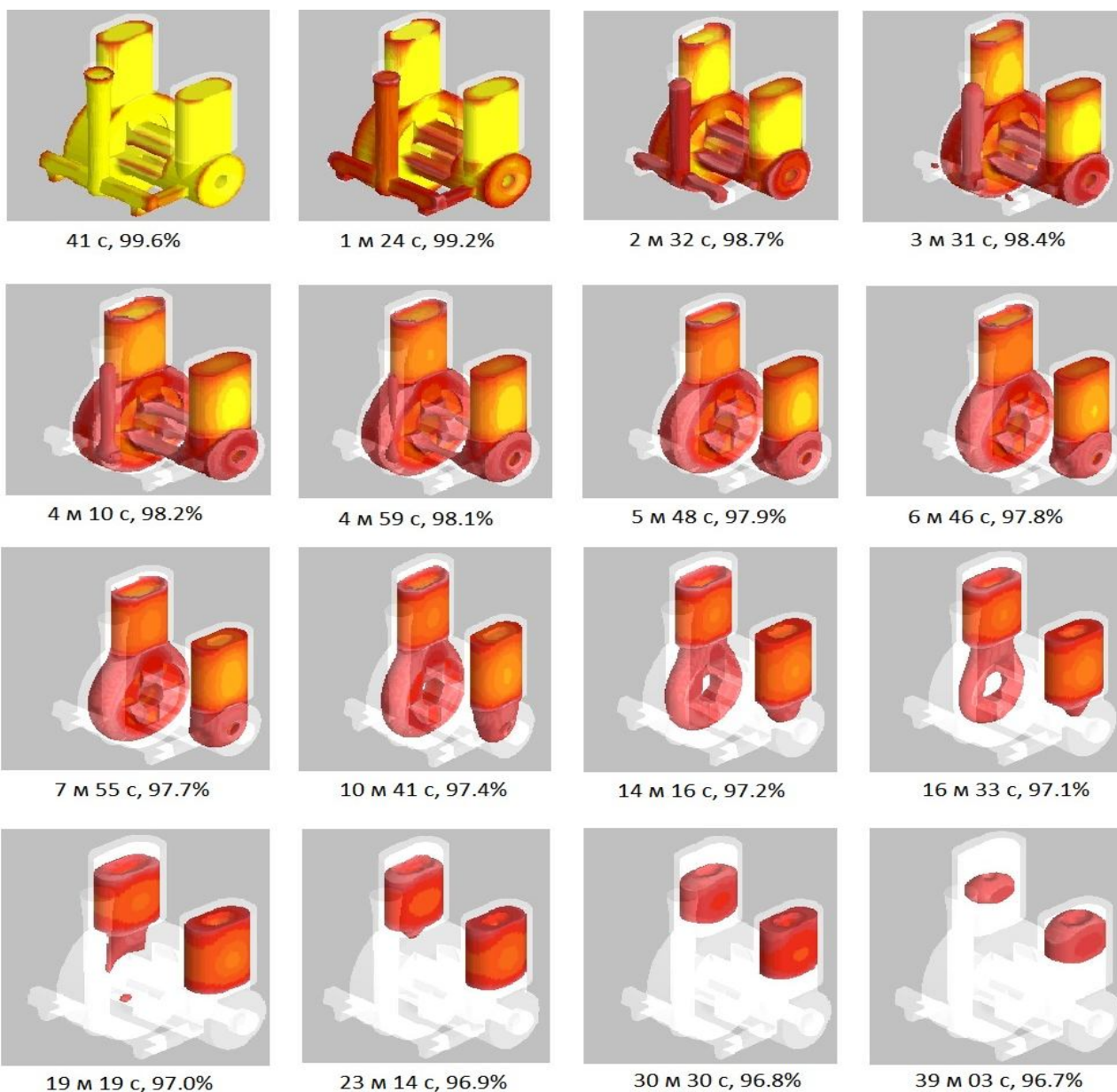
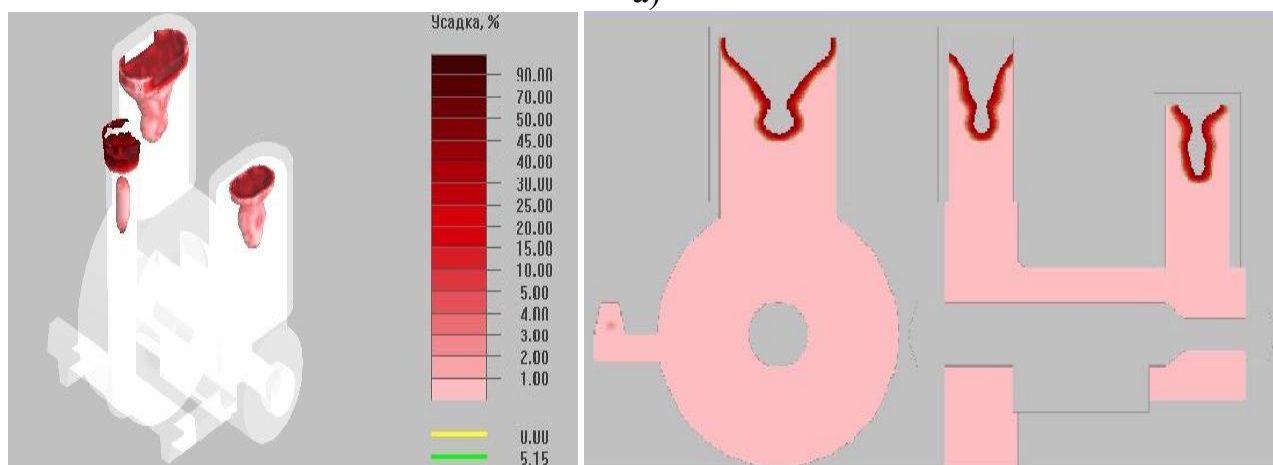


Рис. 6. 3D-модель отливки с экзотермическими вставками на прибыли



а)



б)

Рис. 7. Компьютерное моделирование процесса затвердевания отливки с экзотермическими оболочками: ход затвердевания и количество жидкой фазы (а), усадка в трех- и двухмерном пространстве (б)

Результаты компьютерного моделирования процесса затвердевания отливки с регулированием ее питания расплавом иллюстрационно показывают полное отсутствие дефектов усадочного происхождения в теле отливки (рис. 76), и позволяют сделать вывод о наиболее важном из факторов, представленных в табл. 1 для данной отливки – принципе направленного затвердевания. При этом изменение конструктивных элементов питания отливки с экзотермическим обогревом прибылей увеличивает технологический выход годного с 55,6 до 73,6 %, что является актуальным с точки зрения ресурсосбережения.

Литература

1. Мартыненко С. В. Использование компьютерных методов для повышения качества крупногабаритных тонкостенных стальных отливок / С. В. Мартыненко, О. М. Огородникова, В. М. Грузман // Литейное производство. – 2009. – № 11. – С. 21-24.
2. Воронин Ю. Ф. Атлас литейных дефектов. Черные сплавы / Ю. Ф. Воронин, В. А. Камаев. – М.: Машиностроение – 1, – 2005. – 328 с.
3. Воронин Ю. Ф. Моделирование влияния причин возникновения дефектов на качество отливок / Ю. Ф. Воронин, А. В. Матохина // Литейщик России. – 2005. – № 8. – С. 33-37.
4. Апробация результатов компьютерного моделирования для выбора рациональной технологии изготовления отливки / Т. И. Сушко, Хоанг Ван Хау, Р. А. Караев, И. И. Чернышев, Т. В. Пашнева // Третий международный молодежный симпозиум «Современные проблемы математики. Методы, модели, приложения». 21-24 ноября 2017, г. Воронеж [Текст]: [сб. научных трудов по материалам] Воронеж: ВГБВО «ВГЛУ им. Г. Ф. Морозова», 2017 г. – № 7. – Ч. 2. – С. 290-293.
5. Сушко Т. И. Исследование влияния технологических факторов на получение качественных отливок с экзотермическим обогревом посредством СКМ LVM Flow // Т. И. Сушко, И. Н. Петров, И. Г. Руднева, Т. В. Пашнева // Материалы IX Международной конференции “Achievement of high school - 2013” 17-25 November 2013, том 44, “Технологии”, София, “Бял Град-БГ”, ООД 2013, с. 12-17.

COMPUTER SIMULATION USED TO IDENTIFY THE CAUSES OF MARRIAGE ARISING IN STEEL CASTINGS

T. I. Sushko, I. I. Ghernyshev, R. Sh. Karaev, T. V. Pashneva

Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N.E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

Objective: to investigate the influence of the pouring speed of low-alloy steel 35KHML in the conditions of casting in sand-clay molds on the occurrence of shrinkage defects in the “Housing” casting in the joints of the casting determined according to the technical requirements.

Keywords: computer modeling, foundry, casting “Housing”.

ИНТЕГРИРОВАННАЯ СИСТЕМА КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОГО АНАЛИЗА СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ПОДВЕСОВ

Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков, В. В. Пешков, В. А. Шунина, А. А. Кудряш

Воронежский государственный технический университет
vmfmm@mail.ru

Рассмотрены структура и функциональные возможности интегрированной системы компьютерного моделирования физических процессов в сверхпроводящих подвесах. Дается краткий обзор работ по вычислительным экспериментам со сверхпроводящими подвесами, выполненных с её помощью.

Ключевые слова: метод конечных элементов, комплексы программ, компьютерное моделирование, гравиинерциальный датчик, сверхпроводящие подвесы.

В начале 2000-х годов на кафедре высшей математики и физико-математического моделирования Воронежского государственного технического университета был разработан конечно-элементный пакет программ FEMPDESolver 2.0 [1, 2], предназначенный для численного решения краевых задач для дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка эллиптического и параболического типов. Его отличием от других конечно-элементных комплексов программ (см. обзор [3]) была возможность решать краевые задачи для уравнения Лапласа с учётом скачка зависимой переменной на внутренних разрезах областей сложной формы. К решению такой краевой задачи сводится расчёт распределения скалярного магнитного потенциала, создаваемого токонесущими сверхпроводниками в мейснеровском состоянии в приближении идеального диамагнетизма. Использование скалярного магнитного потенциала существенно уменьшает число степеней свободы по сравнению с необходимым при использовании векторного магнитного потенциала и улучшает сходимость численного решения краевой задачи. С помощью FEMPDESolver был выполнен конечно-элементный анализ распределения индукции магнитного поля в цилиндрических и сферических сверхпроводящих подвесах пробных тел криогенных гравиинерциальных датчиков и определены их силовые характеристики [1, 4]. Установлены критерии устойчивой левитации толстого токонесущего сверхпроводящего кольца над другим аналогичным кольцом [5]. В дальнейшем математические модели FEMPDESolver были дополнены уравнениями Лондонов [6, 7]. Это позволило рассчитать подъёмную силу, действующую на сверхпроводящий шарик микронных размеров в осесимметричном магнитном поле токонесущего сверхпроводящего кольца, с учётом лондоновской глубины проникновения магнитного поля в сверхпроводник [6]. Определена область устойчивой левитации сверхпроводящего шарика вблизи сверхпроводящего кольца и вблизи сверхпроводящего шара больших размеров во внешнем постоянном

магнитном поле. Рассчитаны силовые характеристики этих левитационных систем [8, 9].

В настоящее время разрабатывается интегрированная система конечно-элементного анализа (ИСКЭА) физических процессов в сверхпроводящих электромагнитных подвесах на основе базового и электромагнитного модулей мультифизической системы конечно-элементного анализа Comsol Multiphysics и комплекса программ FEMPDESolver.

В состав ИСКЭА входит постоянно обновляемая база данных по разработкам и исследованиям сверхпроводящих подвесов. Она также включает информацию о физико-математических моделях и комплексах программ, которые используются при компьютерном моделировании физических процессов в сверхпроводниках.

Программными средствами базового и электромагнитного модулей мультифизической системы конечно-элементного анализа Comsol Multiphysics 4.2 осуществлена конечно-элементная формулировка уравнений Максвелла-Лондонов и связанной системы нестационарных уравнений Гинзбурга-Ландау и уравнения теплопередачи.

Разрабатываемая система конечно-элементного анализа позволяет проводить расчёт и оптимизацию параметров сверхпроводящих подвесов пробных тел криогенных гравиинерциальных датчиков.

Литература

1. Моделирование магнитомеханических процессов в сверхпроводниковых гравиинерциальных датчиках / С. А. Кострюков, М. В. Матвеева, В. В. Пешков, Г. Е. Шунин // Известия Академии наук. Серия Физическая. – 2000. – Т. 64. – № 9. – С. 1705-1711.
2. Пакет программ FEMPDESolver 2.0 для конечно-элементного анализа сверхпроводящих токонесущих систем / Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков, В. В. Пешков и др. // Известия Академии наук. Серия физическая. – 2004. – Т. 68. – № 7. – С. 1038-1044.
3. Шунин Г. Е. Компьютерные системы конечно-элементного анализа электромагнитных процессов / Г. Е. Шунин // Известия Академии наук. Серия физическая. – 2004. – Т. 68. – № 7. – С. 1012-1018.
4. Компьютерное моделирование сферического сверхпроводящего подвеса / Л. И. Батаронов, С. А. Кострюков, В. В. Пешков, Г. Е. Шунин // Известия Академии наук. Серия Физическая. – 2006. – Т. 70. – № 8. – С. 1138-1140.
5. Компьютерное моделирование двух сверхпроводящих колец с постоянными магнитными потоками / М. И. Батаронова, С. А. Кострюков, В. В. Пешков, Г. Е. Шунин // Известия Академии наук. Серия Физическая. – 2008. – Т. 72. – № 9. – С. 1271-1274.
6. Батаронова М. И. Компьютерное моделирование левитации мезоскопической сверхпроводящей сферы в неоднородном магнитном поле / М. И. Батаронова, С. А. Кострюков, Г. Е. Шунин // Системы управления и информационные технологии. – 2009. – № 4(38). – С. 52-53.
7. 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.
8. Кудряш А. А. Конечно-элементный анализ распределения магнитного поля вблизи сверхпроводящего тора / А. А. Кудряш, Г. Е. Шунин // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2015. – Т. 11. – № 6. – С. 4-9.

9. Кудряш А. А. Конечно-элементный анализ взаимодействия сверхпроводящих шаров в однородном магнитном поле / А. А. Кудряш, Г. Е. Шунин // Системы управления и информационные технологии. – 2015. – № 4.1 (62) – С. 131-138.

INTEGRATED SYSTEM OF FINITE ELEMENT ANALYSIS OF SUPERCONDUCTING SUSPENSIONS

G. E. Shunin, S. A. Kostyukov, V. V. Peshkov, V. A. Shunina, A. A. Kudryash

Voronezh State Technical University

The structure and functionality of an integrated system for computer modeling of physical processes in superconducting suspensions are considered. A brief review of articles on computational experiments with superconducting suspensions made with its help is given.

Keywords: finite element method, software complexes, computer simulation, gravi-inertial sensor, superconducting suspensions.

СОДЕРЖАНИЕ

Абрамова О. П., Абрамов С. В. Влияние стохастических процессов на поле деформации модельной фрактальной связанной структуры.....	3
Абрамов В. С. Связи параметров модельного фемтообъекта и бозона Хиггса во фрактальных квантовых системах.....	9
Абдурагимов Г. Э. Численная реализация краевой задачи для одного нелинейного интегро-дифференциального уравнения второго порядка.....	15
Белов А. Н., Туровцев В. В. Вариационный предел как показатель эффективности численного решения торсионного уравнения Шрёдингера.....	17
Белов А. Н., Туровцев В. В. Использование функций Матье с большим параметром при решении торсионного уравнения Шрёдингера.....	19
Букалов Г. К., Бурьгин А. О., Панин И. Г. Моделирование и распознавание дефектов текстильных строп.....	22
Буховец А. Г., Горностаев А. К. Моделирование состояний замкнутых систем посредством рандомизированных систем итерированных функций.....	27
Гетманова Е. Е. Обмен энергией в цепочке маятников с кратными частотами.....	31
Глазов С. Ю., Сыродоев Г. А. Эволюция ультракоротких электромагнитных импульсов в двумерной графеновой сверхрешетке.....	36
Плотников А. С., Гольцев В. Ю., Григорьев Е. Г., Осинцев А. В. Моделирование в среде ANSYS электротепловых процессов спарк-плазменного спекания.....	42
Зюбин А. С., Зюбина Т. С., Кравченко О. В., Соловьев М. В., Цветков М. В., Зайцев А. А., Добровольский Ю. А. Квантово-химическое моделирование отщепления водорода от аммиакатов борогидрида магния.....	50
Зюбина Т. С., Зюбин А. С., Сангинов Е. А., Добровольский Ю. А. Квантово-химическое моделирование нафионоподобных литийзамещенных иономеров, пластифицированных диметилсульфоксидом.....	57
Котомкин А. В., Русакова Н. П., Туровцев В. В., Орлов Ю. Д. Распределение спиновой плотности во фтораллильных радикалах.....	61
Алмалиев А. Н., Баткин И. С., Лукин П. В. Моделирование черенковского излучения электронов, движущихся в ткани человека.....	64
Алмалиев А. Н., Копытин И. В., Лукин П. В., Чуракова Т. А. Сравнительный анализ электромагнитных излучений, сопровождающих распространение тяжелых заряженных частиц в диэлектрике.....	69
Наумова А. О., Шамсиев Р. С., Мельников П. В., Флид В. Р., Зайцев Н. К. Моделирование образования комплексов в электронно-возбужденном состоянии для систем с кислотно-основным взаимодействием по Льюису.....	75

Павловский М. В. Проблемы физико-математического моделирования конфликтного взаимодействия сложных эргатических систем специального назначения.....	79
Пашковский А. В., Мерзлова Н. Н. Моделирование трансформирующихся магнитных систем из постоянных магнитов для управления микрочастицами.....	85
Рябков Е. Д., Кирин И. В., Зайцев Н. К., Антропов А. П. Моделирование образования наноразмерных отверстий на поверхности алюминия в процессах электрохимического анодирования.....	91
Янькова Т. В., Мельников П. В., Шишкин В. И., Зайцев Н. К. Моделирование кинетических зависимостей хемилюминесцентной реакции окисления N-октиллюминола гипохлорит-ионом.....	95
Смирнов Ю. Г., Ивенина И. В. Моделирование процесса омагничивания водонефтяной эмульсии наночастицами магнетита.....	101
Серкова В. И. Нейронные сети в системе Delphor.....	106
Кунцев В. Е., Дорогобед А. Н., Кожевникова П. В. Распределение фильтрационного сопротивления проницаемого пласта нефтяного месторождения на основе нечеткой геологической модели.....	112
Бондарев А. В., Батаронов И. Л., Пашуева И. М. Исследование композиционного ближнего порядка в аморфных сплавах системы Re-Tb.....	117
Борзунов С. В., Кургалин С. Д., Туровский Я. А. Моделирование участков поверхностей сложной формы на основе их фотоизображений.....	122
Павлов С. В., Дубровский О. И. Теоретическое исследование электронной структуры моноклинной модификации триоксида молибдена.....	129
Журавлева Е. В., Салита Д. С., Седашкин Г. Р. Разработка алгоритма верификации по рукописной подписи.....	133
Иминова В. Р., Лихачев Е. Р. Компьютерное моделирование электронной структуры соединения Al_3Si	138
Катрахова А. А., Купцов В. С., Рыбалко Д. О. Анализ электрической схемы усилителя с отрицательной обратной связью по напряжению методом графов.....	143
Дудкин О. С., Коряпаева Ю. В., Красова Н. Е., Лебедев Е. В. Задача управления движением материальной точки при непрерывном управляющем воздействии.....	146
Косырева-Фурсова Л. Г., Козенков О. Д., Климов А. Ю. Безопасность передачи информации в сетях сотовой связи стандарта GSM.....	152
Козенков О. Д., Косырева-Фурсова Л. Г., Обозный И. С. Формирование зоны «питания» нитевидного кристалла, в модели роста лимитируемого гетерогенной химической реакцией.....	155
Нечаев В. Н., Шуба А. В. Краевые задачи математической физики и фазовые переходы второго рода во внешних полях в тонких пленках.....	161

Пауков Н. В., Борзунов С. В., Кургалин С. Д. Моделирование поведения пользователя Суперкомпьютерного центра Воронежского государственного университета и разработка новой модели взаимодействия с ресурсами центра.....	172
Пашуева И. М., Бондарев А. В. Особенности моделирования подсистемы управления службы скорой медицинской помощи в среде GPSS.....	177
Проконова Т. В., Михайлюк Е. А., Михайлюк А. А. Особенности электронных процессов в композитных соединениях на основе InP, актуальных для элементов электроники.....	180
Сушко Т. И., Чернышев И. И., Караев Р. Ш., Пашнева Т. В. Моделирование процессов затвердевания отливки при литье в кокиль с дождевым подводом металла и чугуном холодильником.....	183
Сушко Т. И., Чернышев И. И., Караев Р. Ш., Пашнева Т. В. Компьютерное моделирование, используемое для установления причин брака, возникающего в стальных отливках.....	188
Шунин Г. Е., Кострюков С. А., Пешков В. В., Шунина В. А., Кудряш А. А. Интегрированная система конечно-элементного анализа сверхпроводящих подвесов.....	195

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXI Международного семинара
(г. Воронеж, 30 ноября 2019 г.)

В авторской редакции

Подписано в печать 20.03.2020.

Формат 60×84/16. Бумага для множительных аппаратов.

Усл. печ. л. 11,7. 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