

ISSN 2077-3110

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXII Международного семинара

Воронеж 2021

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 XXII Международного семинара
(г. Воронеж, 27-28 ноября 2020 г.)

Воронеж 2021

УДК 53.072:519.673(06)
ББК 22.1я4
Ф503

Физико-математическое моделирование систем: материалы XXII Ф503 Междунар. семинара; ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет». - Воронеж: Изд-во ВГТУ, 2021. – 193 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*
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 (ВУНЦ ВВС «ВВА», г. Воронеж, Россия) – *сопредседатель*
Е. Г. Андреева (ОмГТУ, г. Омск, Россия)
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», 2021

УПРАВЛЕНИЕ ЯЧЕЙКОЙ ПАМЯТИ В МОДЕЛЬНОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ СВЯЗАННОЙ СТРУКТУРЕ

О. П. Абрамова, С. В. Абрамов

Донецкий национальный университет
oabramova@ua.fm

Показано, что характерной особенностью поведения поля деформации модельных фрактальных связанных структур является наличие суперпозиционных кубитных состояний, где отсутствует затухание. Такие состояния могут быть ячейками памяти. Установлена возможность внутреннего и внешнего управления структурой ячейки памяти, возможность выполнения операции стирания информации. Показано, что изменения полей деформации в ячейке памяти носят анизотропный характер.

Ключевые слова: связанные фрактальные структуры, суперпозиция кубитных состояний, поле деформации, управление структурой ячейки памяти.

Введение

В работе [1] описание комплексного поля деформации модельных фрактальных связанных структур было выполнено на основе различных кубитных состояний отдельных структур типа кругового и эллиптического цилиндров. Отличительной особенностью поведения поля деформации таких связанных структур является наличие кубитных состояний, для которых отсутствует затухание (мнимая часть поля деформации равна нулю). Такие состояния могут быть ячейками памяти.

Актуальность работы связана с проблемой создания квантовых компьютеров [2, 3], которые кодируют информацию в кубитах; с квантовой криптографией, где запись информации в ячейке памяти осуществляется ниже уровня шума. Физическими системами, реализующими кубиты, могут быть любые объекты, имеющие два квантовых состояния. В качестве активных объектов могут выступать различные наноструктуры, метаматериалы [4-6], сверхпроводники [7]. Эти активные объекты могут находиться в суперпозиционных кубитных состояниях, проявлять стохастические свойства, квантовую запутанность, что является основой для квантовых компьютеров. Контролируемое управление, хранение квантовой информации, возможность ее извлечения являются важными этапами для квантовых коммуникаций.

Для описания квантового хаоса используются случайные матрицы [8]. Элементы случайных матриц могут формироваться в результате итерационного процесса. При этом возникает необходимость описания и учета упорядочения отдельных операторов полей деформаций в связанной структуре [9, 10] на основе различных кубитных состояний.

Целью данной работы является описание поля деформации ячейки памяти во фрактальной связанной структуре с элементами цилиндрического типа, внутреннее и внешнее управление ее структурой.

Ячейка памяти модельной фрактальной связанной структуры

Для описания поля деформации ячеек памяти рассмотрим модельную связанную структуру, которая состоит из двух фрактальных цилиндров эллиптического типа ($i=1,2$), находящихся в объемной дискретной решетке $N_1 \times N_2 \times N_3$, узлы которой задаются целыми числами n, m, j . Нелинейные уравнения для безразмерной комплексной функции смещения u узла решетки имеют вид [1, 9, 10]

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

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

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

Здесь α_i – фрактальная размерность поля деформации u вдоль оси Oz ($\alpha_i \in [0, 1]$); u_{0i} – постоянное (критическое) смещение; модули k_{ui} являются функциями от индексов n, m, j узлов решетки. Различные фрактальные структуры характеризуются параметрами: $p_{0i}, p_{1i}, p_{2i}, p_{3i}, b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}, n_{0i}, n_{ci}, m_{0i}, m_{ci}, j_{0i}, j_{ci}, R_i$. В нашей модели выбор различных состояний кубитов в плоскости nOm определяется ненулевыми коэффициентами при линейных слагаемых в функциях p_{0i}, Q_i из (2), (3). Начальное состояние $(0, 0)$ отдельной структуры определяется нулевыми коэффициентами $p_{1i} = 0, p_{2i} = 0$. Базисные состояния кубитов определены как: $(1, 0) - p_{1i} = 0.00423, p_{2i} = 0$; $(0, 1) - p_{1i} = 0, p_{2i} = 0.00572$; $(-1, 0) - p_{1i} = -0.00423, p_{2i} = 0$; $(0, -1) - p_{1i} = 0, p_{2i} = -0.00572$. Суперпозиционные состояния кубитов: $(1, 1) - p_{1i} = 0.00423, p_{2i} = 0.00572$; $(1, -1) - p_{1i} = 0.00423, p_{2i} = -0.00572$; $(-1, 1) - p_{1i} = -0.00423, p_{2i} = 0.00572$; $(-1, -1) - p_{1i} = -0.00423, p_{2i} = -0.00572$.

Рассмотрим суперпозиционные состояния кубитов [1] фрактальных связанных структур (V), (VI). В структуре (V) реализована операция скалярного умножения комплексных полей деформации отдельных структур (I) и (II), при этом поле деформации этой структуры описывается функцией $u_5 = u_{R1} f_5(u_{R2})$ с соответствующей матрицей M_5 . Элементы матрицы M_5 получены при решении уравнений (1) – (3) методом итераций по индексу n . Такая процедура моделирует связанные (зависимые) стохастические процессы исходных независимых стохастических процессов для структур (I) и (II), которые описываются функциями $u = u_{R1}$ и $u = u_{R2}$. Структура (I) представляет собой круговой цилиндр с постоянными полуосями $n_{c1} = m_{c1}$, а структура (II) – эллиптический цилиндр с переменными полуосями n_{c2}, m_{c2} .

Для учета упорядочения отдельных операторов полей деформаций в связанной структуре рассматривается структура (VI), где реализована операция скалярного умножения комплексных полей деформации отдельных структур

(II) и (I), поле деформации этой структуры описывается функцией $u_6 = u_{R2}f_6(u_{R1})$ с соответствующей матрицей \mathbf{M}_6 .

При численном моделировании полагалось, что $N_1=240$, $N_2=240$, $u_0=29.537$, $p_0=1.0423$, $b_{1i}=b_{2i}=1$, $n_{0i}=121.1471$, $m_{0i}=120.3267$, $j_{0i}=31.5279$, $j_{ci}=11.8247$, $b_{3i}=0$. Значения полуосей кругового цилиндра (I) $n_{c1}=m_{c1}=57.4327$ с $R_1=1$. Для эллиптического цилиндра (II) с $R_2=1$, имеем: вариант 1 – $n_{c2}=43.0746$, $m_{c2}=19.1443$; вариант 2 – $n_{c2}=55.2537$, $m_{c2}=14.9245$; вариант 3 – $n_{c2}=119.9327$, $m_{c2}=6.8758$.

Далее рассмотрим только связанные структуры (V), (VI), в которых отдельные структуры (I) и (II), (II) и (I) имеют одинаковые суперпозиционные кубитные состояния $(-1,-1)$, но отличаются порядком следования операторов полей деформации.

В качестве примера на рис. 1 показано поведение поля деформации $u_5 = \text{Re}u_5$ структуры (V) с одинаковой фрактальной размерностью $\alpha_i = 0.5$ отдельных структур (I) и (II). Переменные полуоси эллиптического цилиндра структуры (II) соответствуют вариантам 1, 2, 3. Изменение полуосей эллиптического цилиндра структуры (II) (внутреннее управление параметрами структуры) не приводит к появлению мнимой части функции смещения, что является характерной особенностью поведения поля деформации. Для $u_5 = \text{Re}u_5$ характерно наличие стохастического пика, структура и область локализации в плоскости nOm которого изменяется при изменении полуосей эллиптического цилиндра (II) (рис. 1 а, б, в). Эти изменения носят анизотропный характер. При этом вдоль оси On происходит уширение пика из-за увеличения полуоси n_{c2} эллиптического цилиндра (II), амплитуда пиков порядка 10 (рис. 1 г), 12 (рис. 1 д), 11 (рис. 1 е) безразмерных единиц. Вдоль оси Om происходит сужение пика из-за уменьшения полуоси m_{c2} эллиптического цилиндра (II) (рис. 1 ж, з, и). Сечения $\text{Re}u_5$ (рис. 1 к, л, м) подтверждают анизотропный характер перестройки структуры внутренней области стохастического пика: наблюдается изменение формы и структуры отдельных эллиптических колец, эффект перемешивания отдельных траекторий.

Как и для структуры (V) особенностью поведения поля деформации связанной структуры (VI) с одинаковыми суперпозиционными состояниями $(-1, -1)$ отдельных структур является отсутствие эффективного затухания во всей области ($\text{Im}u_6 = 0$). Для $\text{Re}u_6$ также характерно наличие уширенного стохастического пика со структурой близкой к пику $\text{Re}u_5$ (рис. 1), но $\text{Re}u_6 - \text{Re}u_5 \neq 0$. При этом выполняются условия

$$u_6 - u_5 = u_{R2}f_6(u_{R1}) - u_{R1}f_5(u_{R2}) \neq 0, \quad \mathbf{M}_6 - \mathbf{M}_5 \neq 0, \quad (4)$$

что связано с зависимостью рассматриваемых стохастических процессов. Это свидетельствует о том, что операторы полей смещений отдельных структур (II), (I) и (I), (II) не коммутируют в связанных структурах (VI) и (V). Результаты численного моделирования для структуры (VI) в данной работе не приводим.

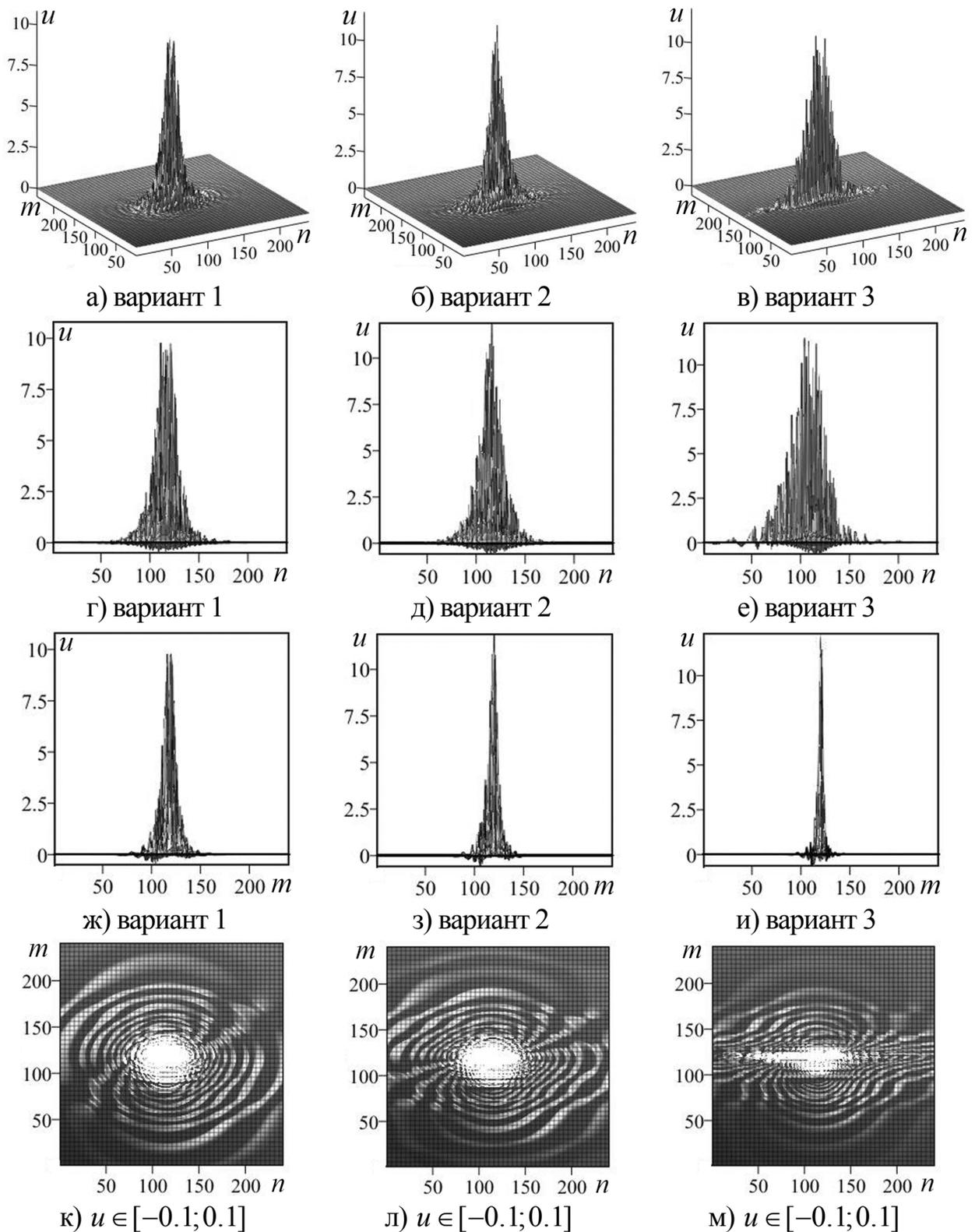


Рис. 1. Зависимости поля деформации структуры (V) при $\alpha_i = 0.5$ от переменных полуосей структуры (II): $u = u_5$ (а, б, в) – общий вид; проекции на плоскости nOu (г, д, е), mOu (ж, з, и); (к, л, м) – сечения (вид сверху)

Внешнее управление структурой ячейки памяти можно выполнить за счет изменения фрактальных размерностей α_i отдельных структур (I), (II). На рис. 2

представлено поведение полей деформации $u_5 = \text{Re} u_5$ структуры (V) для одинаковых фрактальных размерностей структур (I), (II): $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.0$ (рис. 2 а, г), $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.9$ (рис. 2 б, д), $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.99$ (рис. 2 в, е); полуоси структуры (II) соответствуют варианту 1. При увеличении фрактальных размерностей структур (I), (II) наблюдается изменение формы и структуры стохастических пиков, которое сопровождается резким уменьшением амплитуд с 46 (рис. 2 а), 0.33 (рис. 2 б) до 0.0036 (рис. 2 в) безразмерных единиц. Сечения (рис. 2 г, д, е) подтверждают существенную перестройку структуры внутренней области от волнообразного состояния (рис. 2 г) к практически регулярному поведению (рис. 2 е). При $\alpha_1 = \alpha_2 = 1.0$ поле деформации становится нулевым $u_5 = \text{Re} u_5 = 0$. Это допускает возможность интерпретации такого изменения фрактальных размерностей как операции стирания информации в ячейке памяти.

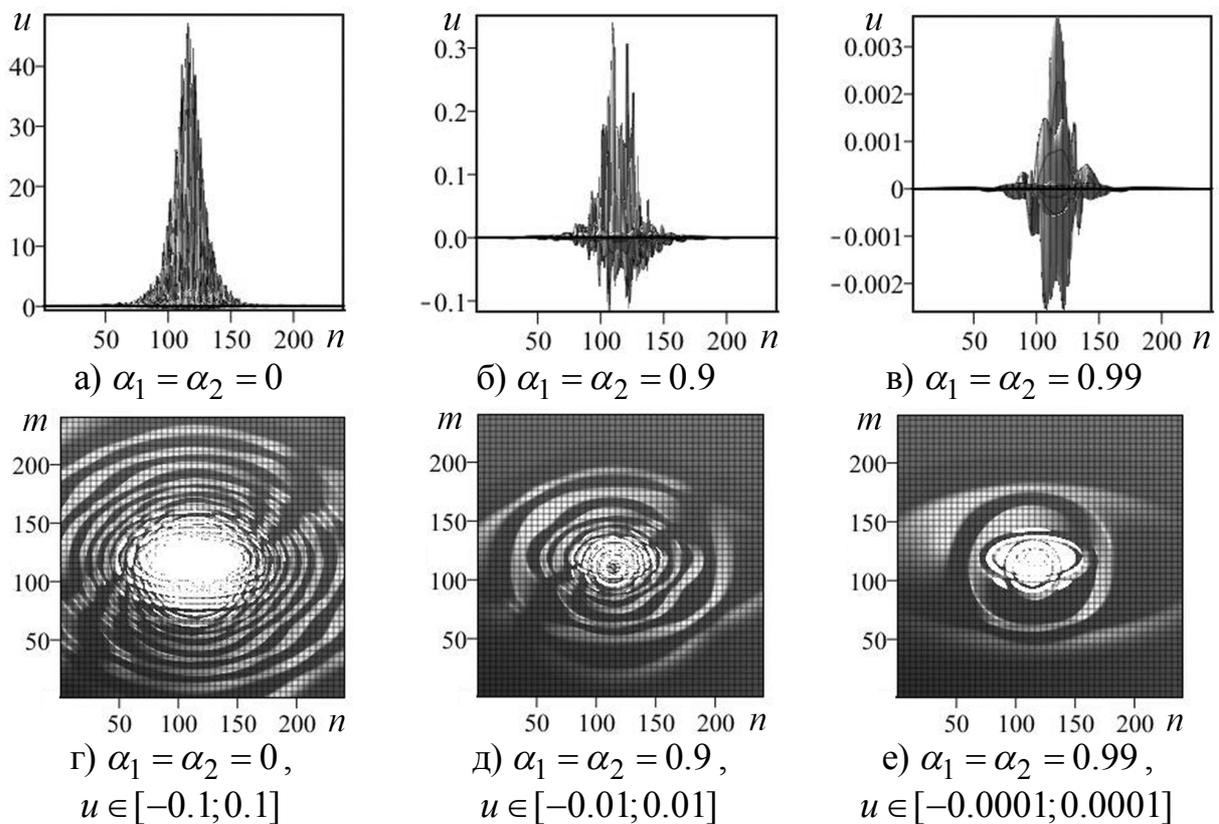


Рис. 2. Зависимости поля деформации структуры (V) от фрактальных размерностей структур (I), (II): $u = u_5 = \text{Re} u_5$ (а, б, в) – проекции на плоскость nOu , (г, д, е) – сечения (вид сверху)

Выводы

Показано, что ярко выраженной особенностью поведения поля деформации связанных структур (V), (VI) с одинаковыми суперпозиционными кубитными состояниями $(-1, -1)$ отдельных структур является отсутствие мнимой части функции смещения во всей области ($\text{Im} u_5 = \text{Im} u_6 = 0$), что свидетельствует об отсутствии эффективного затухания. Это дает возможность интерпре-

тировать связанные структуры (V), (VI) с одинаковыми суперпозиционными состояниями $(-1, -1)$ отдельных структур (I), (II) как ячейки памяти

Установлена возможность внутреннего и внешнего управления параметрами структуры ячейки памяти за счет изменения полуосей эллиптического цилиндра структуры (II) и фрактальных размерностей α_i отдельных структур (I), (II); выполнения операции стирания информации в ячейке памяти. Изменения полей деформации связанных структур носят анизотропный характер.

Литература

1. Абрамова О. П. Поле деформации и кубитные состояния фрактальных структур с элементами цилиндрического типа // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. 2020. № 1. С. 3-15.
2. Nielsen M. and Chuang I. Quantum Computation and Quantum Information // Cambridge University Press, New York, 2010. – 698 p.
3. Boumeister D., Eckert A., Zeilinger A. Physics of Quantum Information // Springer, New York, 2001. – 325 p.
4. Нелинейности в периодических структурах и метаматериалах / под ред. Ю. С. Кившаря и Н. Н. Розанова. М.: Физматлит, 2014. 384 с.
5. Abramov V. S. Active Nanoobjects, Neutrinos and Higgs Fields in Anisotropic Models of Fractal Cosmology // Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics. 2019. V. 83, No 12. P. 1516-1520.
6. Abramov V. S. Active Nanoobjects, Neutrino and Higgs Boson in a Fractal Models of the Universe // C. H. Skiadas and Y. Dimotikalis (eds.), 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2020. P. 1-14.
7. Омелянчук А. Н., Ильичев Е. В., Шевченко С. Н. Квантовые когерентные явления в джозефсоновских кубитах. К.: Наукова думка, 2013. 168 с.
8. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос: введение / под ред. В. Я. Демиховского. М.: Физматлит, 2004. 376 с.
9. 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 / C. H. Skiadas and I. Lubashevsky (eds.), 11th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2019. P. 15-27.
10. O. P. Abramova, A. V. Abramov. Coupled Fractal Structures with Elements of Cylindrical Type / C. H. Skiadas and Y. Dimotikalis (eds.), 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2020. P. 15-26.

MEMORY CELL CONTROL IN MODEL FRACTAL COUPLED STRUCTURE

O. P. Abramova, S. V. Abramov

Donetsk National University

It is shown that a characteristic feature of the behavior of the deformation field of model fractal coupled structures is the presence of superposition qubit states, where there is no damping. Such states can be memory cell. The possibility of internal and external control of the structure of the memory cell, the possibility of performing the operation of delete information has been established. It is shown that changes in deformation fields in a memory cell are anisotropic.

Keywords: coupled fractal structures, superposition of qubit states, deformation field, control of the structure of a memory cell.

СВЕРХМАССИВНЫЕ ЧЕРНЫЕ ДЫРЫ И БОЗОН ХИГГСА В МОДЕЛЯХ ФРАКТАЛЬНОЙ КОСМОЛОГИИ

В. С. Абрамов

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

Для описания масс черных дыр, их связей с параметрами бозона Хиггса предложены модели на основе функций плотности распределения числа квантов в основном и возбужденном состояниях для реликтовых фотонов и на основе функций плотности распределения интенсивности излучения. Вблизи верхней границы масс предложено центральную область сверхмассивной черной дыры представлять как Бозе конденсат из черных дыр. Введены различные состояния для черной дыры с промежуточной массой. Полученные оценки для черных дыр с легкими массами, бинарных и сверхмассивных черных дыр согласуются с экспериментом.

Ключевые слова: черные дыры с легкими массами, сверхмассивные черные дыры, Бозе конденсат из черных дыр, бозон Хиггса, реликтовые фотоны, интенсивность излучения, фрактальная космология.

Введение

Лауреатами Нобелевской премии по физике за 2020 год стали Роджер Пенроуз, Райнхард Генцель, Андреа Гез. Используя общую теорию относительности, Р. Пенроуз теоретически предсказал гравитационный коллапс массивных звезд, пространственно-временные сингулярности, рождение черных дыр [1, 2]. Р. Генцель, А. Гез открыли и описали сверхмассивную черную дыру в центре нашей Галактики Млечный Путь [3, 4]. Ранее К. С. Торн [5] показал, что у звезды под действием ее собственной гравитации может начаться коллапс: пространство вокруг нее становится искривленным, звезда исчезает и возникает черная дыра. Экспериментально установлено, что слияние двух черных дыр [6], двух нейтронных звезд [7] сопровождается излучением гравитационных волн. В работах [8, 9] было выполнено описание параметров гравитационных волн, реликтовых фотонов и их связей с параметрами бозона Хиггса в рамках модели сверхизлучения Дикке. При этом возможны сверхбезызлучательные состояния гравитационных полей [10, 11]. Однако, механизмы переходов от черных дыр с легкими массами (порядка $29 \div 32 M_{\odot}$ [6, 7], где M_{\odot} – масса Солнца) к сверхмассивным (порядка $4 \div 5 \cdot 10^6 M_{\odot}$ [3, 4]) и релятивистским (порядка $10^{11} M_{\odot}$ [12]) черным дырам в настоящее время не описаны. Создание таких теоретических моделей требует учета стохастических процессов, функций распределения масс черных дыр во Вселенной, эффекта упорядочения операторов и наличие кубитных состояний [13, 14] для бинарных черных дыр и нейтронных звезд.

Целью данной работы является описание масс черных дыр и их связей с параметрами бозона Хиггса в рамках ряда моделей фрактальной космологии.

Модели для описания масс черных дыр

В работах [8, 9] для описания гравитационных волн и реликтовых фотонов от бинарных черных дыр и нейтронных звезд использовалась модель сверхизлучения Дикке. Для отношения интенсивностей излучения (максимальной I_m к начальной $I(0)$) было получено выражение

$$I_m/I(0)=(a_0+a_m)(a_0-a_m+1); \quad a_0^2=a_m^2+z'_\mu(z'_\mu+2)/4; \quad a_m^2=z'_{A2}; \quad N_{ra}=z'_{A2}+z'_\mu. \quad (1)$$

Здесь $z'_{A2}=1034.109294$ и $z'_\mu=7.18418108$ – обычное и космологическое красные смещения; число реликтовых фотонов $N_{ra}=1041.293475$; отношение интенсивностей $I_m/I(0)=81.06580421$. Сверхбезызлучательные состояния (из которых интенсивность излучения равна нулю) были рассмотрены в рамках моделей A_0 , A_1 [8, 9]. В модели A_0 было получено характерное значение числа бозонов в равновесном состоянии $N_{0A}=3.557716045 \cdot 10^5$. Это позволило определить характерную энергию $E_{0A}=N_{0A}E_G=4.311073329$ эВ, где энергия покоя гравитона $E_G=12.11753067$ мкэВ. В модели A_1 получена характерная функция плотности распределения $n'_{zg}=0.114317037$, где $n'_{zg}+|n_{zg}|=1$ для частиц Ферми типа. Эта функция позволяет определить характерные частоты ν'_{zg} , ν_{zg}^* , ν_{D0}

$$\nu'_{zg}=n'_{zg}\nu_{G0}; \quad \nu_{zg}^*=\nu'_{zg}/\psi_{01}; \quad \psi_{01}=\varepsilon_{01}/E_{H0}; \quad \nu_{G0}=N_{0A} \cdot \nu_{D0}. \quad (2)$$

Здесь $E_{H0}=125.03238$ ГэВ и $\varepsilon_{01}=126.9414849$ ГэВ – энергии бозона Хиггса, полученные без и с учетом поля Хиггса; частота $\nu_{G0}=2.9304515$ ГГц, $\psi_{01}=1.015268884$ [8, 9]. На основе (2) находим численные значения $\nu'_{zg}=335.0005326$ МГц, $\nu_{zg}^*=329.9623754$ ГГц, $\nu_{D0}=8.236889799$ кГц. Наше расчетное значение частоты ν_{zg}^* практически совпадает с частотой 330 МГц, на которой доминирует темная материя из наблюдений радиофиламентов [15].

Модель B_0 . Черные дыры с легкими массами M_{bh} описываются на основе спектров для чисел заполнения $n_{Ax}=n_{A0}S'_{0x}$ и $n_{Ax}^*=n_{A0}S_{xu}$ ($x=1,2,3,4$; спектральные параметры S'_{0x} и S_{xu} определены в [8, 9]) в рамках анизотропной модели, где основной параметр $n_{A0}=58.04663887$ определен на основе выражений

$$\begin{aligned} n_{A0} &= (z'_{\mu\lambda})^2 - 1 = (z'_\mu + 3/2)(z'_\mu - 1/2); \quad z'_{\mu\lambda} = z'_\mu + 1/2; \quad 1/z'_{\mu\lambda} = \sin \varphi'_{\mu\lambda}; \\ n'_{A0} &= (z'_{\mu\lambda})^2; \quad n'_{A0} - n_{A0} = 1; \quad \varphi'_{\mu\lambda} = \varphi_a Q_{H2}; \quad (n_{h1} + n_{h2}) - 2n_{A4} = n_G. \end{aligned} \quad (3)$$

На примере бинарных черных дыр в [8, 9] и выражений (3) получено число квантов второй черной дыры $n_{h2}=M_{h2}/M_s=n_{A0}/2=29.02331944$, первой черной дыры $n_{h1}=M_{h1}/M_s=35.98093926$ до их слияния. После слияния образуется черная дыра с числом квантов $2n_{A4}=M_{bh}/M_s=62.0042587$ и уносится гравита-

ционными волнами число квантов $n_G=1/Q_{H2}=3$. В общем случае числа квантов n_{A0} , n_G и космологическое красное смещение z'_μ определяют число квантов глюонного поля $n_g=2n_G/[z'_\mu(z'_\mu+1)-n_{A0}]$. При $n_G=3$, постоянных параметрах z'_μ из (1), n_{A0} из (3) получим $n_g=8$. Если n_G , z'_μ , n_{A0} являются переменными, то число квантов глюонного поля n_g становится функцией от этих трех аргументов, что характерно для объемных фрактальных структур Вселенной.

Модель В₁. Для оценки масс сверхмассивных черных дыр запишем основные соотношения для энергий

$$E_{H0}/E_G = v_{H0}^*/v_{G0} = N_{HG}; \quad E_G/v_{G0} = E_{H0}/v_{H0}^* = 2\pi\hbar;$$

$$E_{H0}/E_{0A} = N_{0n}; \quad E_{H0}/\varepsilon_{0n} = N_{0n}^*; \quad N_{0n}^* = (1+n'_{zg})N_{0n}. \quad (4)$$

Здесь \hbar – постоянная Планка. С учетом (4) находим параметры $N_{HG}=1.031830522 \cdot 10^{16}$, $N_{0n}=2.900261036 \cdot 10^{10}$, $N_{0n}^*=3.231810284 \cdot 10^{10}$, энергию $\varepsilon_{0n}=3.86880321 \text{ эВ}$. Параметр N_{HG} является функцией от основных параметров N_{ra} , N_{0A} , N_{0n} вида

$$N_{HG} = N_{ra}N_{cv} = N_{0A}N_{0n} = N_{Dv}n_{ra} = N_{ra}N_{0A}n_{ra};$$

$$N_{cv} = N_{0A}n_{ra}; \quad N_{0n} = N_{ra}n_{ra}; \quad N_{Dv} = N_{ra}N_{0A}, \quad (5)$$

где дополнительные параметры $n_{ra}=2.785248449 \cdot 10^7$, $N_{Dv}=3.704626502 \cdot 10^8$, $N_{cv}=9.909123093 \cdot 10^{12}$. Для объемных фрактальных структур Вселенной основные и дополнительные параметры из (5) могут быть операторами. В общем случае эти операторы не коммутируют, при описании легких и сверхмассивных черных дыр, возможно, появление стохастических свойств.

Вводим функции плотности распределения в основном f_{ra} и возбужденном f'_{ra} состояниях для реликтовых фотонов

$$f'_{ra} - f_{ra} = 1; \quad f'_{ra} = \langle \hat{c}_{ra}^+ \hat{c}_{ra} \rangle = N_{ra}/(N_{ra} - z'_\mu); \quad f_{ra} = \langle \hat{c}_{ra}^+ \hat{c}_{ra} \rangle = z'_\mu/(N_{ra} - z'_\mu), \quad (6)$$

где \hat{c}_{ra}^+ , \hat{c}_{ra} – операторы рождения, уничтожения реликтовых фотонов; $\langle \dots \rangle$ – символ операции усреднения. На основе (6), (1) находим численные значения $f_{ra}=0.006947216$, $f'_{ra}=1.006947216$. Выражения (1) – (6) дают возможность выполнить оценку масс M_{0B} , M_{b0} , M'_{b0} черных дыр по формулам

$$M_{0B} = f'_{ra}M_{b0}; \quad M_{b0}/M_s = n_g(1+n'_{zg})n_{ra}/n_{A0}; \quad M'_{b0} = M_{0B} - M_{b0} = f_{ra}M_{b0}. \quad (7)$$

Численные значения: $M_{0B}/M_s=4.307173111 \cdot 10^6$, $M_{b0}/M_s=4.277456693 \cdot 10^6$, $M'_{b0}/M_s=0.029716418 \cdot 10^6$. Наша оценка массы M_{0B}/M_s практически совпадает с массой центрального тела $4.31 \cdot 10^6$ сверхмассивной черной дыры в центре галактики Млечный Путь [3, 4]. Значение $2M'_{b0}/M_s=0.059432836 \cdot 10^6$ определяет

ошибку $0.06 \cdot 10^6$, связанную с погрешностью измерения параметров орбиты звезды S2, вращающейся вокруг центрального тела [3, 4].

Модель В₂. Для фрактальной структуры Вселенной характерно распределение масс черных дыр, которые обнаружены в центре различных галактик. Так для сверхмассивной черной дыры в ядре галактики M87, получено изображение тени в радиодиапазоне с помощью Event Horizon Telescope. Для бинарной черной дыры MAXI J1820+070 обнаружены релятивистские джеты с помощью четырех Chandra X-ray observations [12]. Для оценки верхней границы массы $M_{J0}=N_{0A}M_{b0}$ будем представлять центральное тело сверхмассивной черной дыры как Бозе конденсат из черных дыр с массами M_{b0} . При этом допустимо представление для параметра $N_{0A}=\psi_{1A}N_{GE}^*$, где $\psi_{1A}^2=1+\Omega_m^*$, $N_{GE}^*=M_s/M_E=R_{Gs}/R_{GE}$. Здесь M_E – масса Земли; R_{Gs} и R_{GE} – гравитационные радиусы Шварцшильда Солнца и Земли; $N_{GE}^*=3.32958 \cdot 10^5$. В этой модели плотность материи вблизи сверхмассивных черных дыр $\Omega_m^*=0.141730642$ практически совпадает с нашим расчетным значением $\Omega_m=0.141145722$ из [16] и значением 0.141, полученным обсерваторией Planck на основе новой постоянной Хаббла H_0^* по затуханию γ -лучей на межгалактическом фоне. В результате находим $M_{J0}/M_s=15.21797631 \cdot 10^{11}$. Для экспериментального поиска сверхмассивных черных дыр вблизи верхней границы масс используют распределения яркости, изменения интенсивности излучения звезд при фотографировании с большим разрешением галактик, адаптивную оптическую спектроскопию для компенсации флуктуаций в атмосфере и спекл-спектроскопию [4]. Для максимальной интенсивности излучения I_m из (1) вблизи верхней границы масс допустимо представление

$$I_m=I_1^*+I_2^*; \quad I_1^*=n'_{zg}I_m=v_{1J}^2I_m \sin^2(\theta_W^*); \quad I_2^*=n_{zg}I_m=(u_{1J}^2+v_{1J}^2 \cos^2(\theta_W^*))I_m;$$

$$v_{1J}^2=k_{1J}^2=0.5(1-I(0)/I_m); \quad u_{1J}^2=(k'_{1J})^2=0.5(1+I(0)/I_m); \quad u_{1J}^2+v_{1J}^2=1; \quad (8)$$

$$I_1^*/I_m=k_{1J}^2 \operatorname{sn}^2(u_{1W}; k_{1J})=n'_{zg}; \quad I_2^*/I_m=\operatorname{dn}^2(u_{1W}; k_{1J})=n_{zg}.$$

Здесь k_{1J} , k'_{1J} и u_{1W} – модули и эффективное смещение для эллиптических функций $\operatorname{sn}(u_{1W}; k_{1J})$, $\operatorname{cn}(u_{1W}; k_{1J})$, $\operatorname{dn}(u_{1W}; k_{1J})$; угол θ_W^* выполняет роль эффективного угла Кабибо для сверхмассивных черных дыр; параметры u_{1J} , v_{1J} зависят от начальной и максимальной интенсивности излучения и являются аналогами параметров преобразования Н. Н. Боголюбова в теории сверхпроводимости. Численные значения равны: $k_{1J}^2=0.493832171$, $(k'_{1J})^2=0.506167829$, $\sin^2(\theta_W^*)=0.231489651$, $\cos^2(\theta_W^*)=0.768510349$, функции плотности распределения интенсивностей $f_{J1}=I_1^*/I_2^*=0.129072187$, $f'_{J1}=I_m/I_2^*=1.129072187$. Вы-

ражения (8) позволяют выполнить оценку масс черных дыр M'_{J1} , M_{J1} вблизи верхней границы масс по формулам

$$M'_{J1}-M_{J1}=M_{J0}; \quad M'_{J1}=f'_{J1}M_{J0}; \quad M_{J1}=f_{J1}M_{J0}; \quad f'_{J1}-f_{J1}=1. \quad (9)$$

На основе (9) получим численное значение $M_{J1}/M_s=1.964217483 \cdot 10^{11}$, которое находится вблизи экспериментального значения $1.96 \cdot 10^{11} M_s$ для сверхмассивной черной дыры SDSS J140821.67+025733.2.

Для промежуточных масс черных дыр максимальная интенсивность излучения I_m^* может изменяться на отрезке $I(0) \leq I_m^* \leq I_m$. Эти изменения описываются переменными числом квантов n_m^* и параметром инверсии B_{Jm}

$$\begin{aligned} n_m^* &= I_m^*/I_m = u_{1J}^2 + v_{1J}^2 B_{Jm}; \quad B_1^* = B_{Jm}(n'_{zg}) = -u_{1J}^2/v_{1J}^2 + \sin^2(\theta_W^*); \quad -1 \leq B_{Jm} \leq 1; \\ B_2^* &= B_{Jm}(n_{zg}) = \cos^2(\theta_W^*); \quad n_{1J} = v_{1J}^2 + n'_{zg}; \quad n'_{1J} = u_{1J}^2 - n'_{zg}; \quad n_{1J} + n'_{zg} = 1. \end{aligned} \quad (10)$$

Из (10) следует, что черная дыра с промежуточной массой может находиться в различных состояниях, которые определяются парой параметров n_m^* и B_{Jm} . Введем эти состояния: основное $J1$ ($n_m^*=1$, $B_{Jm}=1$), сверхбезызлучательное $J2$ ($n_m^*=u_{1J}^2$, $B_{Jm}=0$), полностью инверсное состояние $J3$ ($n_m^*=u_{1J}^2 - v_{1J}^2$, $B_{Jm}=-1$), частично инверсное состояние $J4$ ($n_m^*=n'_{zg}$, $B_{Jm}=B_1^*$), отклоненное от основного $J5$ ($n_m^*=n_{zg}$, $B_{Jm}=B_2^*$). Параметры $B_1^*=-0.793489803$, $1+B_1^*=0.206510197$, B_2^* , $n_{1J}=0.391850792$, $n'_{1J}=0.608149208$ несут информацию о характерных параметрах (скоростях, энергиях) релятивистского джета (выброса материи из сверхмассивной черной дыры) [12], что является предметом дальнейшего исследования.

Выводы

Установлены связи основных параметров бозона Хиггса с параметрами черных дыр с легкими массами, бинарных и сверхмассивных черных дыр. На основе функций плотности распределения числа квантов в основном и возбужденном состояниях для реликтовых фотонов получена нижняя оценка массы для сверхмассивной черной дыры. На основе функций плотности распределения интенсивности излучения получена оценка массы вблизи верхней границы. При этом описание центральной области сверхмассивной черной дыры выполнено в терминах Бозе конденсата из черных дыр с массами M_{b0} . На основе пары параметров n_m^* и B_{Jm} введены различные состояния для черной дыры с промежуточной массой. Показано, что полученные оценки масс согласуются с экспериментальными данными.

Литература

1. Penrose R. Gravitational collapse and space-time singularities // Phys. Rev. Lett. 1965. V. 14. No 3. P. 3-18.

2. Hawking S. W., Penrose R. The singularities of gravitational collapse and cosmology // Proc. Roy. Soc. Lond. A. 1970. 314. P. 529-548.
3. Eckart A., Genzel R. Observations of stellar proper motions near the Galactic Centre // Nature. 1996. V. 383. P. 415-417.
4. Ghez A. M., Salim S., Weinberg N. N. et. al. Measuring distance and properties of the Milky Way's central supermassive black hole with stellar orbits // arXiv: 0808.2870v1. 2008.
5. Торн К. С. Черные дыры и складки времени: Дерзкое наследие Эйнштейна. М.: Физматлит, 2007. 616 с.
6. Abbott B. P., Abbott R., Abbott T. D. et al. Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 116, Art. no 061102. 16 p.
7. Abbott B. P., Abbott R., Abbott T. D. et al. Observation of Gravitational Waves from a Binary Neutron Star Inspiral // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 119, Art. no 161101. 18 p.
8. Abramov V. S. Gravitational Waves, Relic Photons and Higgs Boson in a Fractal Models of the Universe / C. H. Skiadas, I. Lubashevsky (eds.), 11th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2019. P. 1-14.
9. Abramov V. S. Superradiance of Gravitational Waves and Relic Photons from Binary Black Holes and Neutron Stars // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2019. V. 83, no. 3. P. 364–369.
10. Valeriy Abramov. Super-nonradiative states in fractal quantum systems // XIII International Workshop on Quantum Optics (IWQO-2019). EPJ Web of Conferences. V. 220 (2019). 2 p.
11. Abramov V. S. Supernonradiative States, Neutrinos, and Higgs Bosons in Fractal Quantum Systems // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84, no 3. P. 284-288.
12. Espinasse M., Corbel S., Kaare Ph. et.al. Relativistic X-ray jets from the black hole X-ray binary MAXI J1820+070 // arXiv:2004.06416v1 [astro-ph.HE]. 10 p.
13. 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 / C. H. Skiadas, I. Lubashevsky (eds.), 11th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2019. P. 15-27.
14. Abramova O. P., Abramov A. V. Coupled Fractal Structures with Elements of Cylindrical Type / C. H. Skiadas, Y. Dimotikalis (eds.), 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference, Springer Proceedings in Complexity. Springer Nature Switzerland AG 2020. P. 15-26.
15. Hooper D. The empirical case for 10-GeV dark matter // arXiv:1201.1303v1 [astro-ph.CO]. 18 p.
16. Абрамов В. С. Активные фемтообъекты и бозон Хиггса в анизотропных фрактальных моделях Вселенной // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. 2020. № 1. С. 35-47.

SUPERMASSIVE BLACK HOLES AND HIGGS BOSON IN THE MODELS OF FRACTAL COSMOLOGY

V. S. Abramov

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

To describe the masses of black holes, their relationships with the parameters of the Higgs boson, models based on the distribution density functions of the number of quanta in the ground and excited states for relic photons, and on the basis of the density distribution functions of the radiation intensity are proposed. It is proposed to represent the central region of a supermassive black hole near the upper mass boundary as a Bose condensate from black holes. Various states for a black hole with an intermediate mass are introduced. The estimates obtained for black holes with light masses, binary and supermassive black holes are in agreement with experiment.

Keywords: light-mass black holes, supermassive black holes, Bose condensate from black holes, Higgs boson, relict photons, radiation intensity, fractal cosmology.

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

Г. Э. Абдурагимов

Дагестанский государственный университет
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

$$x''(t) + a(t) \left(\int_0^1 x(t) dt \right)^{\frac{p}{q}} = 0, \quad 0 < t < 1, \quad (1)$$

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

где $1 < q < p < \infty$, $a(t)$ – положительная, ограниченная и суммируемая со степенью $p' = \frac{p}{p-1}$ функция.

При выполнении условия $\|a\|_{L_{p'}} < 4 \frac{q}{p}$ существование и единственность положительного решения задачи (1)-(2) следует из результатов работы [1].

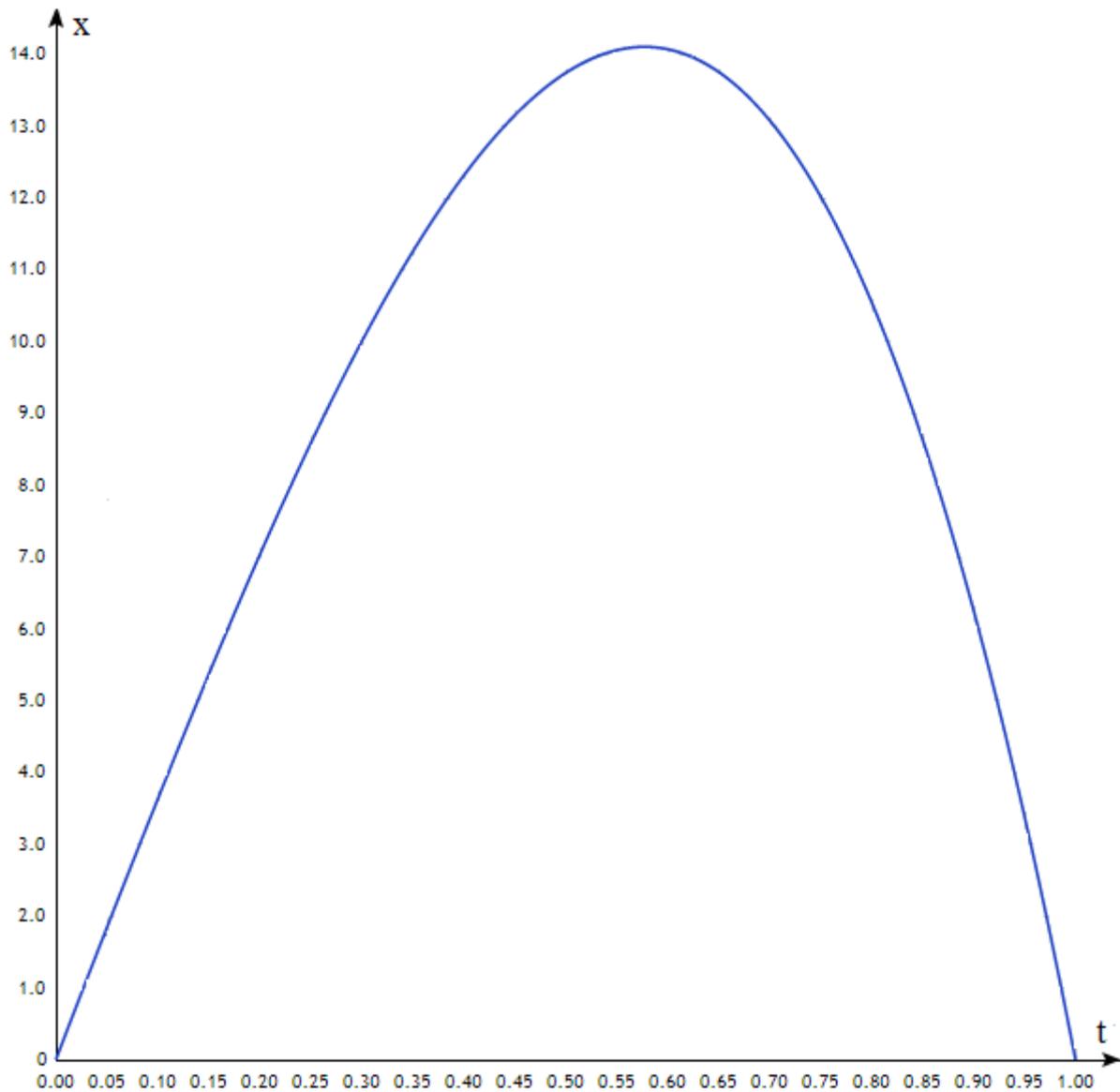
В таблице приведено приближенное положительное решение данной задачи, полученное итерационным методом, при $p = 4$, $q = 2$ и $a(t) = t$.

t	0,00	0,10	0,20	0,30	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00
x	0,00	3,63	7,03	10,00	12,31	13,74	14,07	13,08	10,55	6,26	0,00

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

Литература

1. Абдурагимов Г. Э. О существовании и единственности положительного решения краевой задачи типа Штурма-Лиувилля 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

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.

ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ В МЕТОДЕ ТОЧЕЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ

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

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

Рассматривается бессеточный метод точечных источников. Отличительной особенностью метода является малая размерность систем уравнений и относительно высокая точность. Предложено при реализации метода вместо диполей использовать точечные моменты. Рассмотрены примеры реализации метода. Применение моментов в методе точечных источников позволяет повысить точность расчета потенциалов и их градиентов, а также исключить численную неустойчивость, вызванную погрешностью разности близких величин.

Ключевые слова: метод точечных источников, метод конечных элементов, магнитный момент, скалярный потенциал, электрическое поле, магнитное поле.

Введение

В настоящее время широкое применение для решения задач анализа и синтеза электротехнических устройств наряду с методом конечных элементов (МКЭ) получает бессеточный метод точечных источников (МТИ), включая один из его вариантов – метод фундаментальных решений [1–4]. Важным преимуществом МТИ является малая размерность систем уравнений и относительно высокая точность. Находит применение также комбинированный метод точечных источников и конечных элементов [5–7].

1. Электрические и магнитные моменты в МТИ

В МТИ в настоящее время используют два вида точечных источников полей: точечные заряды и диполи (два одинаковых по величине и противоположных по знаку точечных заряда).

Для скалярного потенциала диполя (рис. 1) К. Шимони предложил следующую приближенную формулу [8]

$$\varphi(P) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|\vec{r}_- + \vec{l}|} - \frac{1}{|\vec{r}_-|} \right) \approx \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(q\vec{l}, \vec{e}_r)}{r_{DP}^2}, \quad (1)$$

где q – точечный заряд; ϵ_0 – электрическая постоянная; \vec{l} – расстояние между зарядами диполя (вектор, направленный от $-q$ к $+q$); r_{DP} – расстояние между средней точкой диполя D и точкой P , в которой определяется потенциал; \vec{e}_r – единичный вектор.

Если устремить $\vec{l} \rightarrow 0$, увеличивая заряд q , то в пределе получим конечную величину [8] $\lim_{l \downarrow q \uparrow} (q\vec{l}) = \vec{p}'$.

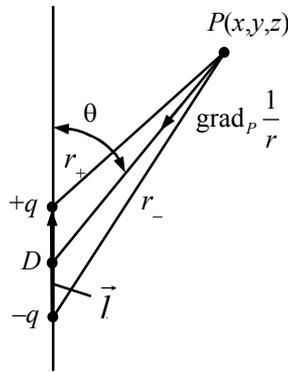


Рис. 1. К определению скалярного электрического потенциала

В результате для скалярного потенциала будем иметь формулу

$$\varphi(P) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\vec{p}', \vec{e}_r)}{r_{DP}^2} = \frac{p \cos \theta}{r_{DP}^2}, \quad (2)$$

где $p = p'/(4\pi\epsilon_0)$. Считаем, что положительное направление вектора \vec{p}' совпадает с направлением напряженности магнитного поля в точке D . Назовем \vec{p} точечным электрическим моментом. Располагаем точечный момент \vec{p} в точке D .

Будем далее использовать более простой способ построения формулы для скалярного потенциала поля, созданного электрическим моментом [9].

Используя фиктивные магнитные заряды, введено понятие точечный магнитный момент [10–12] $\vec{m} = \vec{m}'/(4\pi\mu_0)$.

Применение моментов в МТИ вместо диполей позволяет повысить точность расчета потенциалов и их градиентов, а также исключить численную неустойчивость, вызванную погрешностью разности близких величин [13]. Отсутствие сеток позволяет сократить общее число искомых переменных в решаемых задачах.

В МТИ операции интегрирования по объемам и поверхностям заменяется суммированием вкладов отдельных точечных источников. Рассмотрим применение моментов в МТИ на примерах.

2. Проводящий шар в однородном электрическом поле

Пусть в однородное электрическое поле внесен проводящий шар радиуса R . Требуется рассчитать возмущенное электрическое поле в окружающем шар пространстве.

Возмущенное поле – это сумма двух полей: однородного φ_0 и искажающего φ_2 . Однородное поле в сферической системе координат описывается соотношением

$$\varphi_0(r, \theta) = -E_0 r \cos \theta. \quad (3)$$

Дифференциальное уравнение, описывающее поле в сферической системе координат с учетом осевой симметрии, имеет решение [14]

$$\varphi_2(r, \theta) = \frac{c \cos \theta}{r^2},$$

где c – произвольная постоянная.

Используя способ, описанный в [9], получим

$$\varphi_2(r, \theta) = \frac{p_2 \cos \theta}{r^2}, \quad (4)$$

где p_2 – электрический момент.

С учетом (3) и (4) потенциал возмущенного поля описывается соотношением

$$\varphi_{ext}(r, \theta) = \varphi_0(r, \theta) + \varphi_2(r, \theta) = -E_0 r \cos \theta + \frac{p_2 \cos \theta}{r^2}. \quad (5)$$

Учитывая симметрию задачи, точечный момент разместим в начале координат – в центре шара (рис. 2). Из симметрии поля относительно плоскости AA следует, что эта плоскость является эквипотенциальной. Положим ее потенциал равным нулю. Потенциал поверхности проводящего шара ($r = R$) совпадает с потенциалом точек плоскости AA, а, следовательно, потенциал поверхности и всего шара $\varphi_1 = 0$ [15].

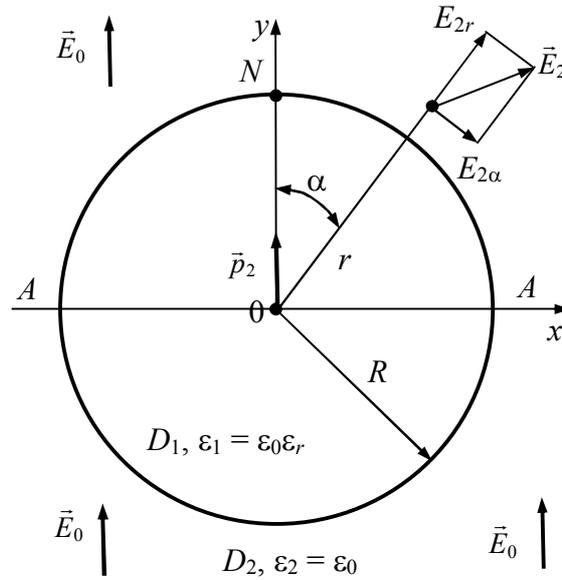


Рис. 2. Поле точечного источника с моментом p_2 , размещенным в начале координат

Для определения момента p_2 воспользуемся граничным условием на поверхности шара: непрерывность скалярного потенциала. Для точки коллокации N (рис. 2) получим

$$-E_0 R + \frac{p_2}{R^2} = 0. \quad (6)$$

Из (6) следует

$$p_2 = E_0 R^3. \quad (7)$$

Скалярный потенциал электрического поля в окружающем шар пространстве описывается соотношением

$$\varphi_{ext}(r, \theta) = -E_0 r \cos \theta + E_0 \frac{R^3}{r^2} \cos \theta, \quad (8)$$

а напряженность поля определяется по формулам

$$E_{extr} = -\frac{\partial \varphi_{ext}}{\partial r} = -E_0 \cos \theta + 2E_0 \frac{R^3}{r^3} \cos \theta,$$

$$E_{ext\theta} = -\frac{1}{r} \frac{\partial \varphi_{ext}}{\partial \theta} = -E_0 \sin \theta + E_0 \frac{R^3}{r^3} \sin \theta,$$

$$E_{ext} = \sqrt{E_{extr}^2 + E_{ext\theta}^2}.$$

На поверхности шара имеем $E_{ext} = E_{extr} = 3E_0 \cos \theta$.

Наибольшее значение E_{ext} будет на поверхности шара при $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi$. Оно равно утроенной величине внешнего поля E_0 в отсутствии проводящего шара.

3. Проводящий параллелепипед в однородном электрическом поле

Рассмотрим расчет МТИ с моментами электрического поля, возмущение которого вызвано внесением в однородное поле проводящего параллелепипеда (рис. 3). Скалярный потенциал на поверхности и в объеме параллелепипеда считаем $\varphi_1 = 0$. На рис. 3 для примера показано размещение на среднем сечении параллелепипеда четырех равных в силу симметрии системы моментов.

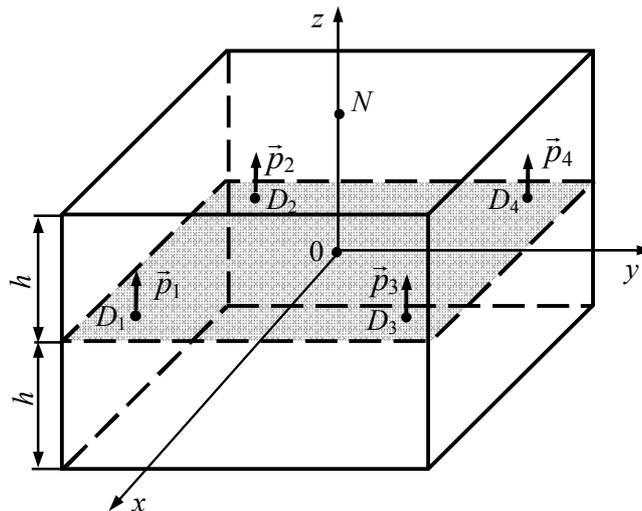


Рис. 3. Пример размещения точечных моментов

Для определения одного неизвестного момента p необходимо составить одно уравнение в точке N на основе граничного условия – непрерывность скалярного потенциала

$$\varphi_0 + \varphi_2 = 0,$$

где $\varphi_0 = -E_0 h$; $\varphi_2 = \sum_{j=1}^4 \frac{p_j \cos \theta_j}{r_{DN}^2} = 4p \frac{\cos \theta}{r_{DN}^2}$.

В общем случае необходимо составить n уравнений с n неизвестными моментами вида

$$\varphi_0(N_i) + \varphi_2(N_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Скалярный потенциал φ_2 , определяемый по формуле

$$\varphi_2(N_i) = \sum_{j=1}^n \frac{p_j \cos \theta_{ij}}{r_{D_j N_i}^2} = 4p \frac{\cos \theta}{r_{DN}^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

При наличии симметрии в устройстве число неизвестных моментов и число точек коллокации N_i сокращается в четыре раза.

Решение подобной задачи расчета магнитного поля показало, что для получения результата с погрешностью менее 2 % необходимо не менее 24 момента [7]. Учитывая при этом симметрию, имеем задачу с $n = 6$ неизвестными. Сравнение проводилось с результатами, полученными МКЭ. При этом число неизвестных всей задачи сократилось в десятки раз.

Выводы

Применение точечных электрических и магнитных моментов вместо диполей в бессеточном МТИ позволяет повысить точность вычисления скалярных потенциалов и исключить численную неустойчивость, вызванную ростом погрешности при вычитании близких величин. Количество неизвестных при этом существенно сокращается.

Литература

1. Kupradze V. D, Alexidze M. A. The method of functional equations for the approximate solution of certain boundary value problems, USSR. Comput Math Math Phys., 1964. Vol 4. P. 82-126.
2. Mathon R., Johnston R. L. The approximate solution of elliptic boundary-value problems by fundamental solutions. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1977. Vol.14. Iss. 4. P. 638-650.
3. Chen W., Karageorghis A., Smyrlis Y. S. The Method of Fundamental Solutions – A Meshless Method. Atlanta: Dynamic, 2008. P. 165-179.
4. Моделирование потенциальных полей с применением метода точечных источников: монография / Ю. А. Бахвалов, С. Ю. Князев, Е. Е. Щербакова, А. А. Щербаков. Новочеркасск: ЮРГТУ (НПИ), 2012. 158 с.
5. Бахвалов Ю. А. Расчет магнитного поля актуатора с эффектом памяти формы комбинированным методом фундаментальных решений и конечных элементов / Ю. А. Бахвалов, В. В. Гречихин, А. Л. Юфанова // Фундаментальные исследования. 2015. № 11. Ч. 1. С. 21-26.
6. Бахвалов Ю. А. Математическое моделирование магнитных полей комбинированным методом фундаментальных решений и конечных элементов в задачах диагностики исполнительных систем с эффектом памяти формы / Ю. А. Бахвалов, В. В. Гречихин, А. Л. Юфанова // Изв. вузов. Электромеханика, 2015. №6. С. 22-31.
7. Cao S., Qin Q. H. Hybrid Fundamental Solution Based Finite Element Method: Theory and Applications, Advances in Mathematical Physics. Vol. 2015, ArticleID 916029.
8. Шимони К. Теоретическая электротехника. М.: Мир, 1964. 775 с.

9. Басан С. Н. Метод точечных электрических моментов в задачах расчета возмущенных электрических полей / С. Н. Басан, Ю. А. Бахвалов, Ю. В. Юфанова // Изв. вузов. Электромеханика. 2020. Т. 63. № 5. С. 17-22.
10. Балабан А. Л. Математическое моделирование трехмерных магнитных полей комбинированным методом конечных элементов и фундаментальных решений с точечными магнитными моментами / А. Л. Балабан, Ю. А. Бахвалов, В. В. Гречихин // Изв. вузов. Электромеханика. 2019. № 1. С. 5-14.
11. Balaban A. L., Bakhvalov Y. A., Grechikhin V. V. Calculation of three-dimensional stationary magnetic fields of actuators with shape memory effect using point magnetic moments. AIP Conference Proceedings, 2019. Vol. 2188. Iss. 1 : № 050015. DOI: 10.1063/1.5138442. DOI: 10.1063/1.5138442.
12. Гречихин В. В. Анализ и синтез плоскопараллельных магнитных полей актуаторов с эффектом памяти формы комбинированным методом конечных элементов и точечных магнитных моментов / В. В. Гречихин, И. С. Краевский, О. С. Матвеева // Изв. вузов. Электромеханика. 2020. № 4. С. 5-12.
13. Mohareb S. W., Rashed Y. F., Akl A. Y. Dipole Plate Bending Formulation for the Method of Fundamental Solutions, Chapter 13, in The Method of Fundamental Solutions – A Meshless Method C. S. Chen, A. Karageorghis, Y. S. Smyrlis, Eds, 2008. P. 261-281.
14. Штафль М. Электродинамические задачи в электрических машинах. М.-Л.: Энергия, 1966. 200 с.
15. Говорков В. А. Электрические и магнитные поля. М.: Энергия, 1968. 488 с.

APPLICATION OF ELECTRIC AND MAGNETIC MOMENTS IN THE METHOD OF POINT SOURCES

Yu. A. Bakhvalov, A. L. Balaban, V. V. Grechikhin, J. V. Yufanova

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

The article discusses the gridless method of point sources. A distinctive feature of the method is the small dimension of the systems of equations and relatively high accuracy. It is proposed to use point moments instead of dipoles when implementing the method. Examples of the method implementation are considered. The use of moments in the method of point sources makes it possible to increase the accuracy of calculating the potentials and their gradients, as well as to exclude the numerical instability caused by the error in the difference of close values.

Keywords: point source method, finite element method, point moment, scalar potential, electric field, magnetic field.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА Fe_2 , Fe_2O_2 И Fe_2O_4
С МОЛЕКУЛОЙ СО В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

К. В. Боженко, Г. Л. Гуцев, Л. Г. Гуцев, А. Н. Утенышев, С. М. Алдошин

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

Выполнены квантово-химические расчеты геометрических и электронных структур кластеров Fe_2 , Fe_2O_2 и Fe_2O_4 со всеми возможными для них значениями спиновой мультиплетности в газовой фазе. Найдены ПС реакций их взаимодействия с молекулой СО. Рассчитаны энергии связи данной молекулы с кластерами Fe_2 , Fe_2O_2 и Fe_2O_4 . Обнаружены закономерности изменений энергий связи молекулы СО с кластерами Fe_2 , Fe_2O_2 и Fe_2O_4 в зависимости от числа атомов кислорода в них.

Ключевые слова: оксиды переходных металлов, электронная и геометрическая структура, спиновые магнитные моменты, энергии связи, квантово-химические расчеты.

Оксиды переходных металлов играют важную роль в различных каталитических и биохимических процессах и имеют широкую область применения [1]. Поэтому они являются предметом многочисленных экспериментальных и теоретических исследований [2, 3, 4]. Катализаторы на основе оксидов железа широко используются в процессе Фишера-Тропша для преобразования смеси окиси углерода и водорода в жидкие углеводороды и в процессе Хабера производства аммиака [5]. Для окисления ненасыщенных углеводородов в мягких условиях использовались нано структурированные оксиды металлов [6]. Наночастицы оксида железа играют особенно важную роль в качестве катализаторов многих биологических и технологических процессов, в том числе предназначенных для снижения загрязнения [4]. Показано, что наночастицы оксида железа обладают высокой эффективностью при более низких температурах окисления СО [7], а также в превращении формальдегида и муравьиной кислоты в диоксид углерода [8]. Оксиды железа также используются для окисления метана и различных углеводородов [9]. Оксиды железа обладают высокой каталитической долговечностью и устойчивы к влажности и высоким концентрациям углекислого газа, которые часто дезактивируют катализаторы [10]. Благодаря этому наночастицы оксидов переходных металлов находят возрастающее применение в качестве катализаторов различных химических реакций и основных элементов молекулярных магнитов. Адсорбция молекул на поверхности наночастицы переходного металла может существенно влиять на величину ее полного магнитного момента. Особенно интересно найти наночастицы оксидов переходных металлов, которые изменяют магнитный момент в основном состоянии при взаимодействии с определенными молекулами. Такие наночастицы могли бы использоваться как сенсоры.

Целью работы является исследование реакций взаимодействия молекулы CO с кластерами оксидов железа Fe₂, Fe₂O₂ и Fe₂O₄. Проведение поиска переходных состояний (ПС) реакций взаимодействия оксидов железа Fe₂, Fe₂O₂ и Fe₂O₄ с молекулой CO в газовой фазе, ведущих к ее диссоциации на полученных частицах. Определение закономерности энергии связи этой молекулы с комплексами Fe₂, Fe₂O₂ и Fe₂O₄ в зависимости от количества атомов кислорода в них, а также сравнение спинов основных состояний продуктов и исходных комплексов.

С целью ответа на данные вопросы выполнены квантово-химические расчеты геометрических и электронных структур кластеров Fe₂, Fe₂O₂ и Fe₂O₄ и продуктов их взаимодействия с молекулой CO в газовой фазе со всеми возможными для них значениями спиновой мультиплетности. Все расчеты выполнены в рамках метода DFT (приближение BPW91/6-311+G*) по программе GAUSSIAN-09 [11]. Найдены закономерности изменений энергий связи молекулы CO с кластерами Fe₂, Fe₂O₂ и Fe₂O₄ в зависимости от числа атомов кислорода в них.

Энергии связи (ΔQ) CO с оксидами Fe₂, Fe₂O₂ и Fe₂O₄ являются энергиями ее десорбции из продуктов реакций взаимодействия с данными оксидами. Показано, что ΔQ (Fe₂CO → Fe₂ + CO) > ΔQ (Fe₂O₂CO → Fe₂O₂ + CO) > ΔQ (Fe₂O₄CO → Fe₂O₄ + CO).

Показано, что закономерности в изменении энергий связи молекулы CO с оксидами Fe₂, Fe₂O₂ и Fe₂O₄, находящимися в основном состоянии, совпадают с максимальными энергиями связи ее в этих же рядах оксидов. Поэтому для поиска закономерностей энергий связи молекулы CO с оксидами железа при увеличении количества атомов кислорода в них достаточно рассмотреть ее энергии связи с оксидами в основном состоянии. Можно предположить, что этот вывод сохранится для сходных двухатомных молекул и оксидов.

Литература

1. Rao C. N. R., Raveau B. Transition Metal Oxides: Structure, Properties and Synthesis of Ceramic Oxides, 2nd ed. Wiley - VCH: Weinheim, 1998.
2. Yuan C., Wu H. B., Xie Y., Lou X. W. Mixed Transition Metal Oxides: Design, Synthesis, and Energy Related Applications// Angew. Chem. Int. Ed. – 2014. – N 53. - P. 1488-1504.
3. Fernando A., Weerawardene K. L. D. M., Karimova N. V., Aikens C. M. Quantum Mechanical Studies of Large Metal, Metal Oxide, and Metal Chalcogenide Nanoparticles and Clusters. Chem. Rev. – 2015. – N 115. - P. 6112-6216.
4. Li X.-Q., Zhang W.-X. Iron Nanoparticles: the Core–Shell Structure and Unique Properties for Ni(II) Sequestration//Langmuir – 2006. – N 22. - P. 4638–4642.
5. Burtron H. D. Fischer–Tropsch Synthesis: Relationship Between Iron catalyst Composition and Process Variables//Catal. Today – 2003. – N 84. - P. 83–98.
6. Malmali M., Wei Y., McCormick A., Cussler E. L. Ammonia Synthesis at Reduced Pressure via Reactive Separation// Ind. Eng. Chem. Res. – 2016. – N 55. - P. 8922–8932.
7. H.-Y. Lin H.-Y., Chen Y.-W., Wang W.-J. Preparation of Nanosized Iron Oxide and Its Application in Low Temperature CO Oxidation//J. Nanopart. Res. – 2005. – N 7. – P. 249–263.

8. Yumura T., Amenomori T., Kagawa Y., Yoshizawa K. Mechanism for the Formaldehyde to Formic Acid and the Formic Acid to Carbon Dioxide Conversions Mediated by an Iron Oxo Species//J. Phys. Chem. A – 2002. – N 106. - P. 621–630.

9. Tanaka S., Nakagawa K., Kanezaki E., Katoh M., Murai K.-I., Moriga T., Nakabayashi I., Sugiyama S., Kidoguchi Y., Miwa K. Catalytic Activity of Iron Oxides Supported on γ -Al₂O₃ for Methane Oxidation//J. Jpn. Pet. Inst. – 2005. – N 48. - P. 223–228.

10. Schröder D., Schwarz H., Clemmer D., Chen Y., Armentrout P. B., Baranov V. I., Böhme D. K. Activation of Hydrogen and Methane by Thermalized FeO⁺ in the Gas Phase as Studied by Multiple Mass Spectrometric Techniques//Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes – 1997. – N 161. - P. 175–191.

11. Licence to Use Agreement: Gaussian, Inc., 340 Quinnipiac Street, Building 40, Wallingford, CT 06492.

QUANTUM CHEMICAL STUDY OF REACTIONS OF Fe₂, Fe₂O₂, AND Fe₂O₄ IRON OXIDES INTERACTING WITH A CO MOLECULE IN THE GAS PHASE

K. V. Bozhenko, G. L. Gutsev, L. G. Gutsev, A. N. Utenyshev, S. M. Aldoshin

Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

Quantum chemical calculations of geometric and electronic structures of Fe₂, Fe₂O₂, and Fe₂O₄ clusters with all possible values of spin multiplicity in the gas phase are performed. The PS of reactions of their interaction with the CO molecule are found. The binding energies of this molecule with Fe₂, Fe₂O₂, and Fe₂O₄ clusters are calculated. Regularities of changes in the binding energies of the CO molecule with Fe₂, Fe₂O₂, and Fe₂O₄ clusters depending on the number of oxygen atoms in them were found.

Keywords: Transition metal oxides, electronic and geometric structure, spin magnetic moments, binding energies, quantum chemical calculations.

СЕГМЕНТАЦИЯ ДЕФЕКТОВ ТЕКСТИЛЬНЫХ СТРОП ПО НЕСКОЛЬКИМ КАДРАМ

Г. К. Букалов, А. О. Бурьгин, И. Г. Панин, А. В. Торцев

Костромской государственный университет
igpanin@list.ru

Рассматривается задача нахождения дефектов на текстильной стропе при ограниченном множестве дефектных изображений. Представлены два метода регуляризации, помогающие значительно увеличить результат сегментации дефектов, а именно операции вставки дефектов на не аномальные изображения и операция нормальной регуляризации.

Ключевые слова: стропа, изображение, дефект, U-Net, GAP.

Чтобы решить проблему сегментации дефектов по нескольким кадрам из изображений с высоким разрешением, было предложено использовать две входные ветви данных во время обучения сети. Одна из них предназначена для достаточного количества нормальных изображений без дефектов, а другая – для ограниченного количества аннотированных дефектных изображений. Большинство исследовательских работ используют глубокие нейронные сети, такие как Deep Convolution Autoencoder (DCAE) [1] или Generative Adversarial Network (GAN) [2], которые обучаются с использованием только нормальных изображений.

В предлагаемой статье представлены наработки в следующих направлениях:

1. Использование новой функции потерь нормальной регуляризации, которая помогает кодировщику создавать отличительные представления нормальных областей путем максимального увеличения сходства между нормальными областями в аномальных изображениях и случайно выбранными нормальными обучающими изображениями;

2. Использование функции вставки дефектов на не аномальные изображения;

3. Определение эффективности предложенных методов регуляризации при использовании U-Net подобной сети.

Пусть I^n – множество нормальных изображений, I^d – множество дефектных изображений, M^d – соответствующие дефектам маски, а F^n и F^d – множества параметров сети для детекции дефектов для I^n и I^d соответственно. Тогда компонента фоновой регуляризации принимает следующий вид:

$$B^d = F^d \odot (1 - \hat{M}^D),$$

где \hat{M}^D есть обратная маска к M^d , а оператор \odot обозначает поэлементное умножение. Затем Global Average Pooling (GAP) [3] применяется как к B^d , так и к F^n для получения векторизованных представлений b^d и f^n следующим образом:

$$b^d = GAP(B^d), \quad f^n = GAP(F^n).$$

Чтобы стимулировать выравнивание нормальных областей, функция потерь нормальной фоновой регуляризации предлагается в виде отрицательного косинусного сходства между b^d и f^n :

$$L_{Nor} = -\frac{(b^d)^T f^n}{\|b^d\|_2 \cdot \|f^n\|_2}.$$

Чтобы еще больше уменьшить переобучение, используется метод вставки дефектов на не аномальных изображениях, то есть когда область дефекта на аномальном изображении I^d вырезается и вставляется на нормальное изображение I^n . Тогда измененное таким образом множество изображений I_{Mod}^d будет равно:

$$I_{Mod}^d = I^d \odot M^d + I^n \odot (1 - M^d).$$

Далее полученное изображение из множества I_{Mod}^d подается через кодер и сети декодера для генерации прогнозируемой маски дефекта \tilde{M}_{Mod}^d с использованием сигмоидной функции активации на конечном выходном слое. Также используется двоичная кросс-энтропийная функция потерь, которая рассчитывается путем попиксельного сравнения маски истинности M^d и \tilde{M}_{Mod}^d , а именно:

$$L_{WBCE} = -\lambda \sum_{(w,h)} \left[M^d(w, h) \log(\tilde{M}_{Mod}^d(w, h)) + \right. \\ \left. + (1 - M^d(w, h)) \log(1 - \tilde{M}_{Mod}^d(w, h)) \right],$$

где w и h обозначают координату ширины и высоты соответственно.

Параметр λ является количественной оценкой «реалистичности» дополненного изображения с кадрированием и вставкой путем сравнения его с исходным аномальным изображением. Вес λ определяется как косинусное сходство между двумя векторами после объединения глобального среднего, то есть:

$$\lambda = \frac{|GAP(F^d)^T GAP(F_{Mod}^d)|}{\|GAP(F^d)\|_2 \cdot \|GAP(F_{Mod}^d)\|_2}.$$

Для каждого батча изображений случайным образом определяется какая операция будет применяться: операция вставки дефектов на не аномальные изображения или операция нормальной регуляризации, используя массив признаков изображения F^d для того, чтобы получить прогнозируемую маску дефектов \tilde{M}^d , а затем вычисляется стандартная двоичная кросс-энтропийная функция потерь:

$$L_{BCE} = -\lambda \sum_{(w,h)} \left[M^d(w, h) \log(\tilde{M}^d(w, h)) \right. \\ \left. + (1 - M^d(w, h)) \log(1 - \tilde{M}^d(w, h)) \right].$$

Для оценки эффективности экспериментов сегментированию дефектов за несколько кадров были приняты критерии Intersection-Over-Union (IOU) и Dice Coefficient (DC). IOU и DC используются для измерения перекрывающихся областей между прогнозируемой двоичной маской дефекта и нормальным изображением:

$$IOU = \frac{TP}{TP + FN + FP},$$

$$DC = \frac{2TP}{2TP + FN + FP}.$$

Для измерения производительности обнаружения аномалий за несколько кадров строится кривая ROC. Средняя точность классификации и площадь под кривыми ROC рассчитываются как показатели производительности детекции дефектов.

Эксперимент 1. Сравнение методов сегментации по одному кадру.

В данном подразделе проводится эксперимент по сравнению моделей и связанных с ними методов бенчмаркинга при сегментации дефектов по нескольким кадрам. В табл. 1 и 2 показаны средние IOU и DC и стандартное отклонение для каждой категории при сегментации дефектов по одному кадру и по 5 кадрам, соответственно.

Таблица 1

Средние IOU для сегментации нескольким кадрам

	TernausNet-11	TernausNet-16	U-Net	U-Net++	<i>NOR + Mod</i>
1 кадр	0.3018	0.2912	0.3017	0.3367	0.4119
5 кадров	0.4129	0.4108	0.4138	0.5466	0.6009

Таблица 2

Средние DC для сегментации нескольким кадрам

	TernausNet-11	TernausNet-16	U-Net	U-Net++	<i>NOR + Mod</i>
1 кадр	0.4083	0.3897	0.4045	0.4333	0.5821
5 кадров	0.6099	0.5958	0.6106	0.6485	0.6911

Видно, что предложенный метод *NOR + Mod* значительно превосходит все другие методы сегментации с точки зрения среднего IOU и среднего DC. Следует так же отметить, что при большем числе аннотированных обучающих данных, метод *NOR + Mod* все равно может улучшить производительность сегментации.

Эксперимент 2. Сравнение методов сегментации по нескольким кадрам

В этом подразделе даны результаты экспериментов обнаружения дефектов по нескольким кадрам. В табл. 3 указана средняя точность классификации и площади под кривыми ROC соответственно. Здесь также видно преимущество метода *NOR + Mod*.

Значения точности (ACC) и площадь на ROC кривой (AUC)
для детекции по одному кадру и по пяти

Метод	1 кадр		5 кадров	
	ACC (%)	AUC (%)	ACC (%)	AUC (%)
TernausNet-11	73.54	80.14	79.12	88.34
TernausNet-16	74.99	77.45	82.98	90.18
U-Net	79.01	85.12	89.20	92.89
U-Net++	81.57	87.72	89.34	93.12
<i>NOR + Mod</i>	84.32	89.74	92.45	94.54

С одной стороны, NBR разработан для обучения сети генерированию представлений для нормальных регионов изображений, то есть для тех на которых нет дефектов. Без NBR сеть может изучать «нормальную» семантику изображения только из не аномальных областей изображений среди ограниченного количества дефектных обучающих образов и, следовательно, страдает от переобучения. С другой стороны, операция вставки дефектов разработана, чтобы облегчить работу изучения межклассовых (нормальных и аномальных) знаний из различных комбинаций дефектных и нормальных областей изображений с помощью простой операции вставки дефектов на не аномальные изображения.

Литература

1. Ruff L., Vandermeulen R., Goernitz N., Deecke L., Siddiqui S. A., Binder A., Müller E., Kloft M.: “Deep one-class classification,” in International conference on machine learning. 2018. P 4393-4402.
2. Schlegl T., Seeböck P., Waldstein S. M., Schmidt-Erfurth U., Langs G.: “Unsupervised anomaly detection with generative adversarial networks to guide marker discovery,” in International conference on information processing in medical imaging. Springer. 2017. P 146-157.
3. Lin M., Chen Q., Yan S.: “Network in network”. arXiv:1312.4400. 2013.

SEGMENTATION DETECTION OF TEXTILE SLINGS IN SEVERAL FRAMES

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

Kostroma State University

In article we consider the problem of finding defects on a textile sling with a limited set of defective images. Two regularization methods are presented that help to significantly increase the result of defect segmentation, namely, the operation of inserting defects into non-abnormal images and the operation of normal. Computational experiments aimed at investigating the effectiveness of the proposed method in comparison with existing techniques have been carried out.

Keywords: sling, image, CNN, U-Net, GAP.

ПОТОКИ ЭНЕРГИИ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ВОЛН
В ЦЕПОЧКЕ МАЯТНИКОВ С КРАТНЫМИ ЧАСТОТАМИ

Е. Е. Гетманова

ООО «Дистанционный репетитор», Москва

elge@mail.ru

В работе показано, как осуществляется обмен энергией между маятниками в цепочке несвязанных линейных осцилляторов с кратными частотами при формировании в ней волн. Передача энергии происходит от низкочастотных маятников высокочастотным в одних временных интервалах, от высокочастотных низкочастотным – в других интервалах.

Ключевые слова: волны в системе несвязанных линейных осцилляторов, обмен энергией между парой маятников, потоки энергии в цепочке несвязанных линейных осцилляторов.

В работе изучен обмен энергией между несвязанными линейными осцилляторами (с плавно меняющимися частотами), образующими цепочку. В цепочке, под действием импульса силы, формируются волны. Показано, что за время равное периоду полного формирования ансамблей волн в двух четвертях данного периода осуществляется передача энергии от низкочастотных маятников высокочастотным, и в двух других – направление передачи энергии противоположное, от высокочастотных маятников низкочастотным. Исследование, в некоторой мере, моделирует процесс обмена энергией между внутренними органами живых существ, частоты которых являются кратными.

В [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 $T = 2\pi/\omega$ силы с частотой ω совершают свободные колебания, характерной особенностью которых является согласованное волновое движение между маятниками, входящими в определенные (волновые) группы. Совокупность волновых групп в определенных интервалах создает ансамбль (совокупность) волн. Установлено также, что при формировании произвольного ансамбля с числом волн p в момент $t_{p,2\pi n}$ (фаза маятников, включенных в одну или две волновые группы одинакова, сдвиг фаз между соседними маятниками в любой волновой группе кратен 2π) суммарная энергия образованных волн-групп (волн, объединяющих маятники с одинаковой фазой), равна нулю. Обмен энергией между волнами-группами является результатом обмена между определенной парой маятников, каждый из которых является элементом волн-групп. Энергия каждого из любой пары маятников, определяется совокупной потенциальной энергией всех маятников, включенных в данную волну-группу.

Исследования показали, что энергетический обмен между двумя маятниками осуществляется либо через передаточный маятник (является элементом волны-группы, энергия которой равна либо близка к нулевой), либо выполняется между соседними маятниками, частоты которых отличаются на 5 с^{-1} (номера маятников отличаются на единицу).

Через один передаточный маятник ω_{pr} может осуществляться энергетический обмен между различным числом объединенных в пары маятников с частотами ω_i, ω_j , которые удовлетворяют условиям $\omega_i = \omega_{pr} - \Delta\omega$, $\omega_j = \omega_{pr} + \Delta\omega$. Совокупность пар маятников, между которыми совершается обмен энергией, называется *энергетической группой*.

Обмен энергией между двумя маятниками осуществляется до момента, когда получающий энергию элемент пары (а также все маятники, входящие в волну-группу с ним), переходят в состояние максимального смещения (сжатия или растяжения при рассмотрении пружинных маятников). После чего происходит присоединение осциллятора к следующей энергетической группе, где он образует пару с маятником этой группы, и в дальнейшем отдает энергию. До момента перехода в состояния максимального смещения обмена энергией с маятниками других групп не происходит.

Если высокочастотный (в паре) маятник передает энергию низкочастотному, то при достижении максимального смещения, низкочастотный переходит в новую энергетическую группу, где его частота выше, чем частота парного с ним маятника и направление передачи энергии от высокочастотного к низкочастотному сохраняется. Аналогично, передача энергии от низкочастотного маятника высокочастотному, переводит последний, при достижении максимального смещения, в следующую энергетическую группу, где его частота ниже, чем находящегося с ним паре маятника. Повторяется процесс передачи энергии от низкочастотного маятника высокочастотному.

В результате в определенных интервалах полного цикла формирования ансамбля волн, энергия в каждой паре передается от низкочастотных маятников высокочастотным, в других – от высокочастотных к низкочастотным.

На рис. 1 показаны моменты времени $t_{p,2\pi n}$, когда формируются волны-группы в ансамбле с числом волн p и осуществляется обмен энергией между парами маятников. Стрелками (и цифрами) обозначены временные интервалы, в которых происходит передача энергии от низкочастотных маятников высокочастотным (области 1 и 3), либо в обратном направлении, от высокочастотных маятников к низкочастотным (области 2 и 4).

В интервале $(1-5,5)T$ создаются ансамбли с уменьшающимся числом волн (рис. 1, (1)), что приводит к увеличению энергетических групп (и передаточных маятников) и уменьшению пар маятников в каждой энергетической группе. На рис. 2 показано изменение энергии маятников (элементов, соответствующих волн-групп) при последовательном формировании ансамблей в интервале от $1,5T$ (двадцать волн) до $2,17T$ (двенадцать волн). На рис. 2 приведено число волн, и моменты времени, создания ансамблей с числом волн 20, 19, ..., 18, ..., 12. В ансамбле из восемнадцати волн, маятники 9, 18, 27, 36 (волновые группы, включающие маятники 9, 27 и 18, 36) получают максимальное смещение и переходят в соседние энергетические группы. При создании ансамбля из шестнадцати волн, маятники 8, 16, 24, 32, переходят в соседние энергетические группы. Если в момент $1,5T$ первая энергетическая группа включа-

ет девять пар маятников, то в момент образования ансамбля из двенадцати волн, обмен энергией происходит между двумя парами маятников (передаточный маятник 3) (рис. 2). Таким образом, осцилляторы, достигшие состояние максимального смещения, переходят в следующую энергетическую группу, где при объединении в пары определяются как низкочастотные, передающие энергию высокочастотным.

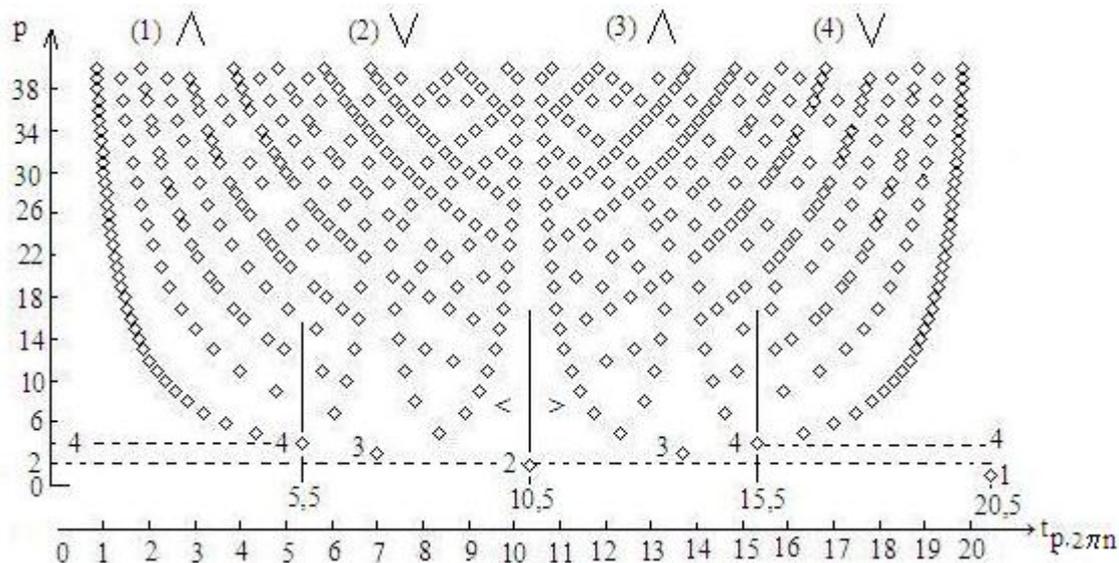


Рис. 1

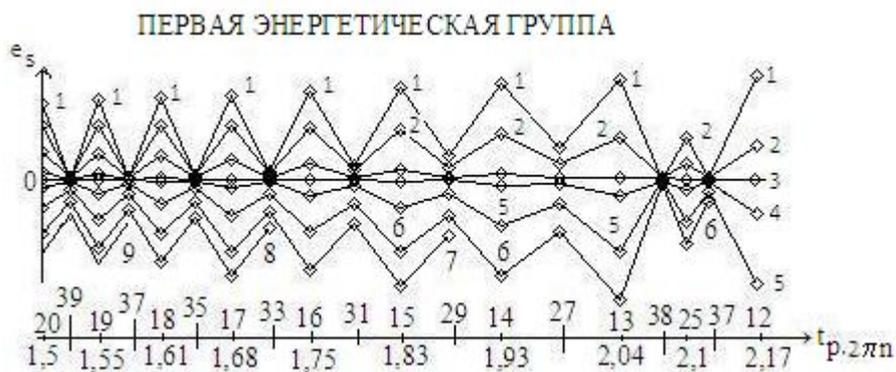


Рис. 2

Формирование ансамблей в интервале $(1-5,5)T$ повторяется в обратном порядке в интервале $(15,5-21)T$ (рис. 1, (4)). Вначале создается ансамбль из двенадцати волн $(18,83T)$, затем вся последовательность, показанная на рис. 2, выполняется в обратном порядке до образования ансамбля из двадцати волн $(19,5T)$. Идет процесс перехода маятников из второй в первую энергетическую группу при достижении максимального смещения, передача энергии происходит от высокочастотного маятника низкочастотному.

При создании ансамбля из восьми волн $(3T)$, рис. 1, (1)) в первой энергетической группе обмен энергией происходит между маятниками 1 и 3, передаточный маятник 2 (рис. 3). Аналогичный процесс происходит в других энергетических группах.



Рис. 3

В момент $5,5T$ все нечетные маятники имеют нулевое смещение, все четные – максимальное смещение. Изменение энергии соседних маятников в интервале $(4,5–6,7)T$ (рис. 1, (2) и (3)) показано на рис. 4 (две энергетические группы, включающие первый-второй и третий-четвертый маятники). Первый (нечетный маятник) передает энергию второму, третий (нечетный) – четвертому. После момента $5,5T$ начинается обратный процесс передачи энергии от высокочастотных (в группе маятников) низкочастотным.

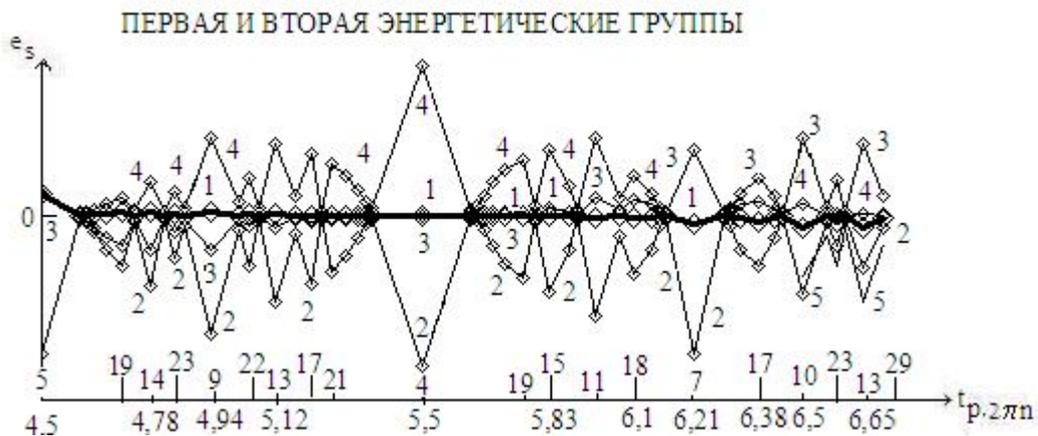


Рис. 4

В интервале $(7–8,88)T$ формируется ансамбли из трех, четырех, пяти волн. Первая энергетическая группа включает три маятника, затем четыре, и пять маятников (рис. 5).

До момента $10,5T$ идет расширение энергетических групп за счет включения в них новых пар маятников и передачи энергии низкочастотным маятниками от высокочастотных. В момент $10,5T$ в цепочке создаются две волны из четных и нечетных маятников с максимальным смещением. Затем процесс выполняется в обратном направлении, уменьшение волн в ансамблях, увеличение числа энергетических групп, уменьшение пар маятников в каждой энергетической группе. В момент $15,5T$ энергетические группы включают по два маятника (аналогично моменту $5,5T$). Далее происходит изменение направление передачи энергии между маятниками, увеличение числа пар маятников в энергетических группах, и выполняется процесс передачи энергии от высокочастотных маятников низкочастотным.

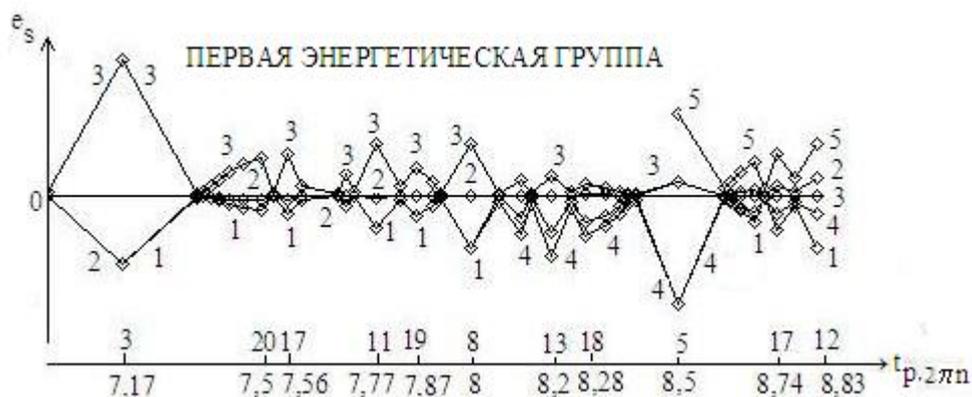


Рис. 5

Выводы

Обмен энергией между несвязанными маятниками в процессе создания ансамблей волн, происходит только в моменты образования волн-групп, между парой маятников, каждый из которых является элементом определенной волн-группы. Последовательное формирование ансамблей с различным числом волн, меняет маятники, включенные в волны-группы, и создает условия для обмена энергией между различными парами маятников.

В интервале $(1-5,5)T$ (рис. 1, (1)) число волн в ансамблях уменьшается, увеличивается число энергетических групп, уменьшается число пар маятников, выполняющих энергетических обмен. в каждой энергетической группе идет передача энергии от низкочастотных маятников высокочастотным. В интервале $(5,5-10,5)T$ (рис. 1, (2)) происходит процесс передачи энергии от высокочастотных низкочастотным маятникам, как результат образования ансамблей с увеличивающимся числом волн. В момент $10,5T$ в цепочке формируется две волны из имеющих максимальное положительное смещение четных и максимальное отрицательное смещение нечетных маятников. Далее, в интервале $(10,5-21)T$ процесс создания ансамблей и передачи энергии выполняется в обратном порядке.

Литература

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

ENERGY FLOWS IN A CHAIN OF PENDULUMS WITH MULTIPLE FREQUENCIES DURING THE FORMATION WAVES IN IT

E. E. Getmanova

Company "DistTutor", Moscow

It is shown how energy is exchanged between pendulums in a chain of unlinked pendulums with multiple frequencies when waves are formed in it. Energy is transferred from low frequency to high frequency pendulums in some time interval and from high-frequency to low-frequency pendulums in other time intervals.

Keywords: waves in system of unlinked linear oscillators, exchange of energy, energy flows.

СТОЛКНОВЕНИЕ СОЛИТОНОВ В ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ

С. Ю. Глазов^{1,2}, Н. Е. Мещерякова²

¹Волгоградский государственный социально-педагогический университет

²Волгоградский государственный медицинский университет
ser-glazov@yandex.ru

Численно исследованы особенности распространения электромагнитных волн в двумерной графеновой сверхрешетке в бесстолкновительном приближении. Предложен метод оценки степени неаддитивности энергетического спектра такой сверхрешетки. Рассмотрен случай столкновения двух солитонов, распространяющихся вдоль осей сверхрешетки со слабой неаддитивностью энергетического спектра.

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

Введение

В последнее время исследователи нелинейных оптических явлений все большее внимание уделяют графеновым структурам [1-6] и, в частности, графеновым сверхрешеткам (ГСР). В таких структурах возможна генерация уединенных электромагнитных импульсов (УЭИ) [1], имеющих практическое значение [7,8]. На данный момент существуют технологические проблемы в получении одномерных ГСР (например, графен на полосчатой подложке [9]). Однако, теоретические исследования охватывают и двумерные (2D) ГСР [10-15], практическое получение которых еще более затруднено. Это объясняется интересными эффектами в 2D структурах, и надеждой на скорейшую реализацию с учетом современного развития нанoeлектроники. Если полосчатую подложку под графеном заменить на подложку из периодически в шахматном порядке чередующихся областей бесщелевого и щелевого графена, получится 2D ГСР [10,11]. В работе [12] заложены основы теоретического изучения распространения электромагнитных импульсов в такой 2D ГСР. В данной работе рассмотрены вопросы, связанные с взаимодействием УЭИ в 2D ГСР в бесстолкновительном режиме.

Основные уравнения

Закон дисперсии носителей заряда в 2D ГСР, состоящей из графена, осажденного на подложку из чередующихся в шахматном порядке областей бесщелевого и щелевого графена (рис. 1) в одноминизонном приближении имеет вид [10]

$$\varepsilon(\vec{p}) = \pm \sqrt{\Lambda_0^2 + \Lambda_1^2(1 - \cos(p_x d_1)) + \Lambda_2^2(1 - \cos(p_y d_2))}, \quad (1)$$

где p_x, p_y – проекции квазиимпульса электрона на оси CP , Δ_0, Δ_1 и Δ_2 были выбраны численно путем решения дисперсионного уравнения (здесь и далее $\hbar=1$). Подробнее особенности этого спектра описаны в работах [11-13]. Отметим, что непараболичность энергетического спектра определяет нелинейные свойства такой структуры, и приводит к возможности распространения в ней УЭИ [16].

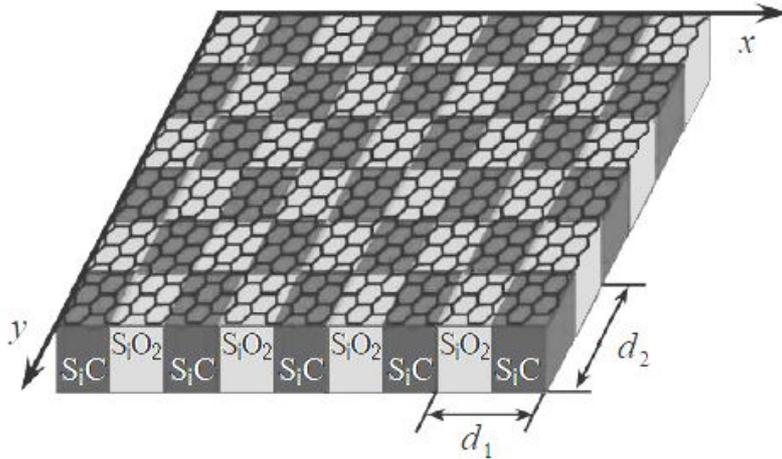


Рис. 1. Двумерная графеновая сверхрешетка

Эволюция нелинейных УЭИ может быть описана уравнением д'Аламбера для векторного потенциала

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

где $V = c\chi^{-1/2}$, χ – эффективная диэлектрическая проницаемость среды. Векторный потенциал связан с напряженностью электрического поля $\vec{E} = -(1/c)\partial\vec{A}/\partial t$ (используется кулоновская калибровка потенциалов).

Воспользуемся разложением скорости электронов $\vec{v}(\vec{p}) = (\partial\varepsilon/\partial p_x, \partial\varepsilon/\partial p_y)$ в двойной ряд Фурье и предполагая электронный газ невырожденным, получим 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 – концентрация 2D электронов, a – толщина графена, $\vec{\varphi} = \frac{e}{c}(A_x d_1, A_y d_2)$ – безразмерный векторный потенциал, $B_{nm} = a_{nm} I_{nm} / I_{00}$,

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

$$a_{nm} = \frac{\Delta_1^2 d_1}{2\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin(x) \sin(nx) \cos(my) dx dy}{\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos(x)) + \Delta_2^2 (1 - \cos(y))}}.$$

Численное моделирование

В общем случае уравнение (2) решают численно. Выберем периоды 2D ГСР $d_1 = d_2 = d = 2 \cdot 10^{-6}$ см. Для этого случая численно рассчитаны параметры энергетического спектра (1): $\Delta_0 = 0.4217\Delta_{\text{SiC}}$ ($\Delta_{\text{SiC}} = 0.13$ эВ), $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.3318\Delta_{\text{SiC}}$.

Для оценки степени неаддитивности можно определить количество перекрестных членов при разложении спектра в ряд Фурье

$$\varepsilon(\vec{p}) = \Delta_{\text{SiC}} \left\{ g_1 - \frac{g_2}{2} [\cos(p_x d) + \cos(p_y d)] - g_3 \cos(p_x d) \cos(p_y d) \right\}, \quad (4)$$

где $g_1 = 0.624475$, $g_2 = 0.1787$, $g_3 = 0.01306$. Здесь ограничились первыми членами в разложении и, считая относительное отклонение спектров в 2% приемлемым, получили случай слабой неаддитивности спектра. В данном случае система уравнений для компонент безразмерного векторного потенциала имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial \tilde{y}^2} + \sin \varphi_x (1 + \beta \cos \varphi_y) &= 0, \\ \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{t}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial \tilde{y}^2} + \sin \varphi_y (1 + \beta \cos \varphi_x) &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\tilde{t} = t\varpi / \sqrt{\chi}$, $\tilde{x} = x\varpi / c$, $\tilde{y} = y\varpi / c$, $\varpi^2 = 2\pi m_0 e^2 B_{10} d / a$, $\beta = 2B_{11} / B_{10}$. В случае аддитивного энергетического спектра $\beta = 0$ и уравнения (5) представляют собой двумерные синус-уравнения Гордона. Особенности распространения УЭИ вдоль осей ГСР и некоторых выделенных направлений, для которых возможно аналитическое решение, обсуждаются в работе [12].

Значительный интерес представляют результаты взаимодействия двух импульсов. Для структур с аддитивным спектром два солитона, бегущие вдоль осей СР по взаимоперпендикулярным направлениям, будут распространяться без искажений. В системе уравнений (5) возмущение в одном направлении из-за слабой связи проявляется в области даже малых потенциалов в ортогональном направлении и наоборот.

На рис. 2 представлены результаты моделирования столкновений УЭИ в 2D ГСР. По вертикальной оси отложен модуль напряженности электрического поля в безразмерных единицах.

На рис. 2(б) хорошо заметно взаимное влияние солитонов друг на друга. Отметим, что изменение претерпевает область перекрытия двух солитонов. Уменьшается амплитуда этой области с образованием двух скоростных импульсов, распространяющихся вдоль фронта солитонов.

Для демонстрации и анализа процесса эволюции импульса удобно выбрать определенные направления в пространстве и фиксировать изменения потенциала и электрического поля вдоль этих направлений. На рис. 3 представлены результаты исследования изменения формы электромагнитного импульса (срез вдоль направления распространения под углом 45° к осям ГСР).

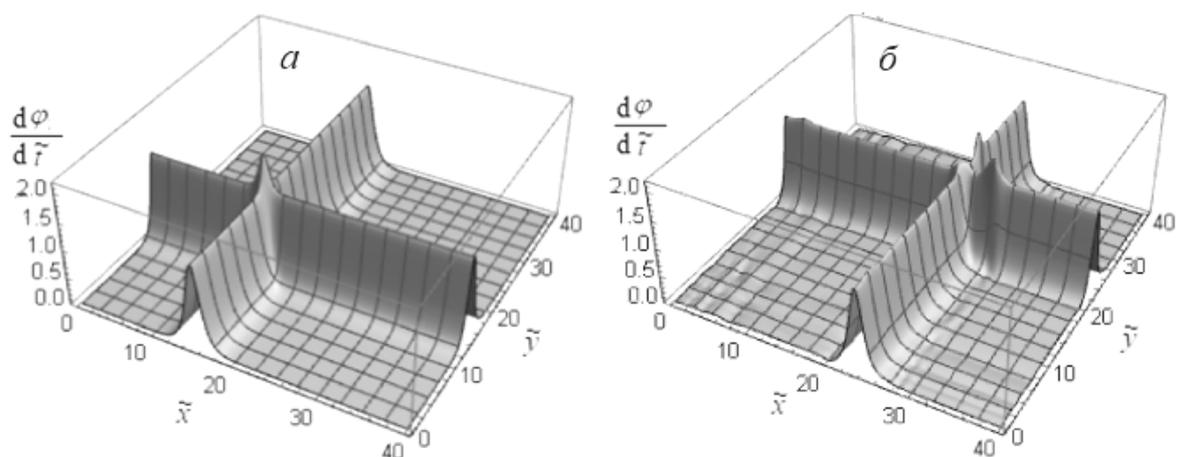


Рис. 2. Взаимодействие солитонов а) $\tilde{t} = 0$, б) $\tilde{t} = 10$

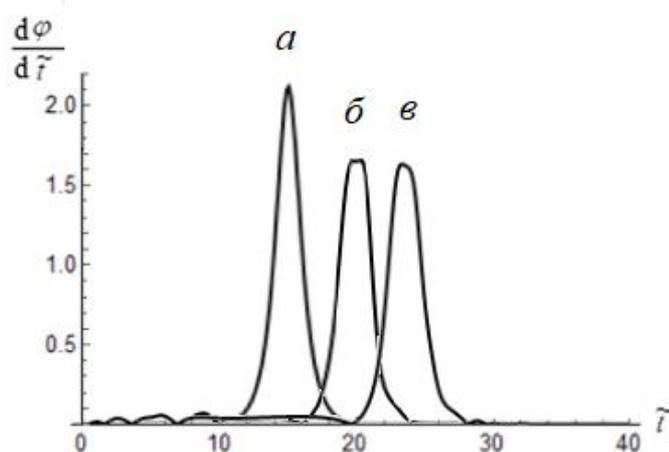


Рис. 3. Профиль импульса (срез под углом 45° к осям ГСР): а) $\tilde{t} = 0$, б) $\tilde{t} = 7$, в) $\tilde{t} = 12$

Амплитуда импульса быстро уменьшается на начальном этапе и при достижении определенного значения в дальнейшем не изменяется. Импульс как бы подстраивается под среду. Видоизменяется также и профиль импульса.

Заключение

Исследованы особенности распространения электромагнитных волн в двумерной графеновой сверхрешетке в бесстолкновительном приближении. Изучено взаимное влияние солитонов, распространяющихся вдоль осей СР по взаимоперпендикулярным направлениям. Разработан программный комплекс для численного решения системы уравнений, описывающей распространение электромагнитных волн в 2D ГСР, сеточным методом.

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. et al. // Laser & Photonics Reviews. 2014. V. 8. P. 291.

5. Bludov Yu. V. et al. // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. P. 045424.
6. Кухарь Е. И., Крючков С. В., Ионкина Е. С. // ФТП. 2018. Т. 52. В. 6. С. 620.
7. Крючков С. В., Капля Е. В. // ЖТФ. 2003. Т. 48. С. 53.
8. Sun Z., Hasan T., Ferrari A. C. // Physica E. 2012. V. 44. P. 1082.
9. Ratnikov P. V. // JETP Lett. 2009. V. 90 № 6. P. 469.
10. Kryuchkov S. V., Popov C. A. // J. Nano- Electron. Phys. 2017. V. 9. № 2. P. 02013.
11. Бадикова П. В., Глазов С. Ю., Сыродоев Г. А. // ФТП. 2019. Т. 53. В. 7. С. 927.
12. Глазов С. Ю., Сыродоев Г. А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 1. С. 98.
13. Бадикова П. В., Глазов С. Ю., Сыродоев Г. А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 1. С. 30.
14. Forsythe C., Zhou X., Watanabe K. et al. // Nature Nanotechnology. 2018. V. 13. P. 566.
15. Zhang Y. et al. // NPJ 2D Materials and Applications. 2018. № 2:31.
16. Эпштейн Э. М. // ФТТ. 1977. Т. 19. В. 11. С. 3456.

COLLISION OF SOLITONS IN A TWO-DIMENSIONAL GRAPHENE SUPERLATTICE

S. Yu. Glazov^{1,2}, N. E. Mescheryakova²

¹Volgograd State Pedagogical University

²Volgograd State Medical University

The features of electromagnetic wave propagation in a two-dimensional graphene superlattice in the collisionless approximation are studied numerically. A method for estimating the degree of nonadditivity of the energy spectrum of such a superlattice is proposed. The case of collision of two solitons propagating along the axes of a superlattice with weak nonadditivity of the energy spectrum is considered.

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ АБСОРБЦИОННЫХ СПЕКТРОВ КРЕМНИЯ, ПОКРЫТОГО СЛОЕМ ЕСТЕСТВЕННОГО ОКСИДА

О. А. Дежина, М. Д. Манякин, Е. В. Парина, Д. А. Коюда

Воронежский государственный университет
dezhinaksu@mail.ru

Для исследования электронного строения материалов на основе кремния используется экспериментальный метод XANES. Первостепенной задачей было разделить экспериментальные $L_{2,3}$ спектры на спектры L_2 и L_3 . С помощью метода подгонки линейной комбинации моделировался XANES L_3 -спектр реального образца кремния, покрытого слоем естественного оксида SiO_2 . Результаты расчёта и моделирования хорошо согласуются с экспериментом. Проведение такого рода анализа поможет рассмотреть вклад не только диоксида кремния, но и его субоксидов.

Ключевые слова: кристаллический кремний, диоксид кремния, спектры XANES, $L_{2,3}$ спектры, слой естественного оксида, моделирование, край поглощения, метод ЛППВ.

Кремний является основой современной полупроводниковой микроэлектроники. По распространённости в земной коре кремний занимает второе место после кислорода, что делает его очень доступным и недорогим материалом. Активные исследования в области кремниевых технологий помогают найти новые функциональные материалы, в том числе всевозможные наноструктуры на основе кремния и его соединений – от нанокластеров [1, 2] до так называемых клатратных кристаллов [3]. Многочисленные наноматериалы, которые можно формировать в рамках кремниевых технологий, обладают чрезвычайно развитой поверхностью, которой свойственно активное взаимодействие с кислородом. Поэтому роль поверхностного окисления кремниевых наноструктур в их практическом применении является ключевой [4-6].

Для исследования электронного строения материалов на основе кремния, включая наноматериалы и наноструктуры, хорошо подходит экспериментальный метод спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (X-ray Absorption Near Edge Structure — XANES), так как он чувствителен к поверхности и тонким приповерхностным слоям материала. При исследовании наноматериалов и структур на основе кремния методом XANES в пределах глубины зондирования, как правило, оказываются поверхностные оксиды различного происхождения. Таким образом, учет вклада SiO_2 в состав и структуру этих объектов является чрезвычайно важной научной задачей. Эффективным способом решения указанной проблемы является компьютерное моделирование.

Для удаления слоя естественного оксида в кремнии химическое или ионное травление зачастую приводят к разупорядочению атомного строения слоя,

граничащего со стороны кремния с оксидом, что безусловно проявляется в тонкой структуре Si $L_{2,3}$ XANES. Термическое удаление приводит к наблюдению остаточного (бывшего переходным) слоя кремний-оксид кремния со всеми возможными степенями окисления. Таким образом, актуальным является проведение прямых расчетов спектров XANES кремния в кристаллическом кремнии и диоксиде в пределах всего диапазона ближней тонкой структуры за $L_{2,3}$ краем поглощения.

Монокристаллический кремний (с-Si) относится к кубической сингонии и характеризуется пространственной группой симметрии $Fd\bar{3}m$. Кристаллические параметры кремния приведены в табл. 1.

Таблица 1

Кристаллические параметры кремния

Параметр решетки a , Å	5.4307		
Координаты атомов	x/a	y/b	z/c
Si 1	0.125	0.125	0.125
Si 2	0.875	0.375	0.375

α -SiO₂ (α -кварц) относится к тригональной сингонии и обладает пространственной группой симметрии $P321$. Кристаллические параметры кварца приведены в табл. 2.

Таблица 2

Кристаллические параметры α -кварца

Параметры решетки	a , Å	b , Å	c , Å
	4.988357	4.988357	5.466693
	α	β	γ
	90	90	120
Координаты атомов	x/a	y/b	z/c
Si 1	0.473533	0	0.666666
Si 2	0	0.473533	0.333333
Si 3	0.526466	0.526466	0
O 1	0.412600	0.260963	0.789817
O 2	0.739036	0.151636	0.456484
O 3	0.260963	0.412600	0.210182
O 4	0.848363	0.587399	0.123150
O 5	0.587399	0.848363	0.876849
O 6	0.151636	0.739036	0.543515

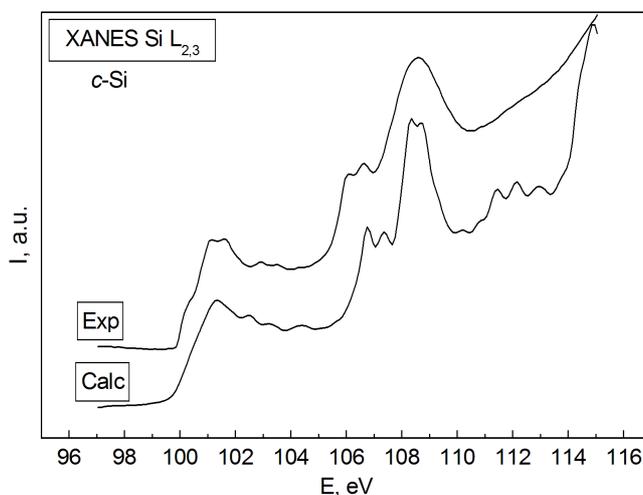
Расчеты из первых принципов проводились на основе теории функционала плотности (DFT) полнопотенциальным методом линеаризованных присоединенных плоских волн (FP-LAPW) с использованием пакета Wien2k [7]. В

этом случае полный потенциал подобно методу ортогонализированных плоских волн [8] учитывает анизотропию кристаллического потенциала, что особенно важно в расчетах электронного строения полупроводниковых материалов. Использовалось обобщенное градиентное приближение (GGA) для обменно-корреляционного потенциала с функционалом Perdew, Burke, Ernzerhof (PBE). Моделирование спектров XANES проводилось методом остовой дырки. При этом использовались суперячейки размера $2 \times 2 \times 2$.

В данной работе нами было проведено моделирование электронной структуры и рассчитаны спектры XANES $L_{2,3}$ -края поглощения кремния и диоксида кремния.

Первостепенной задачей было разделить экспериментальные $L_{2,3}$ спектры кремния и SiO_2 на спектры L_2 и L_3 и сопоставить их с рассчитанными спектрами кремния и SiO_2 соответственно. Для моделирования XANES L_3 -спектра реального образца кремния, покрытого слоем естественного оксида SiO_2 , применялся метод подгонки линейной комбинации (LCF) [9, 10] эталонных спектров. Согласно методу LCF, спектр рентгеновского поглощения многофазного образца (в данном случае $\text{Si} + \text{SiO}_2$) может быть представлен в виде линейной комбинации расчетных спектров известных эталонных фаз Si и SiO_2 . При этом коэффициенты линейной комбинации определяются из условия наилучшего соответствия модельного спектра экспериментальному спектру многофазной системы при очевидном дополнительном условии равенства единице суммы весовых коэффициентов.

На рисунке экспериментальный XANES $L_{2,3}$ -спектр кремния [11] сопоставлен с теоретическим $L_{2,3}$ -спектром кремния, покрытого слоем диоксида кремния. Наилучшее соответствие модельного спектра экспериментальному получилось при вкладах в полный спектр спектров эталонных фаз Si и SiO_2 в соотношении соответственно 51,5% и 48,5%. Как видно из этих результатов моделирования, вклады в полный спектр от поверхностного слоя диоксида кремния и объемного массивного кремния оказываются примерно одинаковыми.



Экспериментальный [11] (Exp) и теоретический XANES (Calc) $L_{2,3}$ спектры кристаллического кремния, покрытого слоем естественного оксида.

Причина этого заключается в малой глубине выхода электронов при поглощении рентгеновских (синхротронных) квантов в области энергий края $L_{2,3}$ спектра кремния при энергии ~ 100 eV и выше, в области тонкой структуры.

Теоретический $L_{2,3}$ -спектр найден путем добавления к расчетному L_3 -спектру L_2 -спектра. Последний, в свою очередь, получен смещением L_3 спектра в сторону больших энергий перехода на величину энергии спин-орбитального расщепления 0.60 eV и уменьшением интенсивности вдвое.

В целом результаты расчетов и моделирования показывают хорошее согласие с экспериментом. Некоторое несовпадение элементов тонкой структуры расчетного и экспериментального спектров объясняется спецификой условий (потенциала, функционалов), выбранных для расчетов краев поглощения из первых принципов или несовершенством экспериментальных образцов по отношению к "идеальным" монокристаллам, выбранным для расчетов. Так, существенно меньшая полуширина основного пика оксидной части теоретического XANES Si $L_{2,3}$ спектра (107 – 110 эВ), по отношению к экспериментальному, иные наблюдаемые отличия объясняются структурным несовершенством нанослоя естественного оксида кремния. А именно, нарушением в упаковке основной структурной единицы диоксида кремния – кремний-кислородных тетраэдров SiO_4 в аморфном слое естественного SiO_2 , тогда как для расчетов мы использовали структуру монокристаллов кварца.

Тем не менее, полученные из первых принципов спектры, продемонстрированный в настоящей работе подход к их моделированию и сопоставление с результатами высокоразрешающего синхротронного эксперимента показывают возможность детального изучения сигнала части элементарного кремния и оксида кремния в материалах и структурах системы кремний-кислород сложного состава. Проведение такого анализа является первым шагом на пути к комплексному теоретическому и экспериментальному рассмотрению вклада не только диоксида кремния, но и его субоксидов SiO_x в сложный композитный состав перспективных кремниевых наноматериалов и структур на их основе, обладающих развитой поверхностью и границами раздела.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-20180).

Литература

1. Борщ Н. А., Берестнев К. С., Переславцева Н. С., Курганский С. И. Пространственная структура и электронный спектр кластеров YSi_n^- ($n = 6 - 17$) // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, № 6. – С. 1227 – 1232.
2. Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Курганский С. И. Пространственная структура и электронный спектр кластеров TiSi_n^- ($n = 6 - 18$) // Журнал физической химии. – 2014. – Т. 88, № 10. – С. 1523 – 1529.
3. Курганский С. И., Борщ Н. А., Переславцева Н. С. Электронная структура и спектральные характеристики клатратов Si_{46} и $\text{Na}_8\text{Si}_{46}$ // Физика и техника полупроводников. - 2005. - Т. 39, № 10. - С. 1218 - 1223.
4. Unoccupied electronic band structure of pentagonal Si nanoribbons on Ag(110) / Kleimeier N. F., Wenzel G., Urban A. J., Tchalala M. R., Oughaddou H., Dedkov Y., Voloshina E., Zacharias H. // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2019. – Vol. 21, № 32. – P. 17811 - 17820.

5. A review on silicon nanowire-based anodes for next-generation high-performance lithium-ion batteries from a material-based perspective / Yang Y., Yuan W., Kang W., Ye Y., Pan Q., Zhang X., Ke Y., Wang C., Qiu Z., Tang Y. // *Sustainable Energy & Fuels*. – 2020. – Vol. 4, № 4. – P. 1577 – 1594.
6. Development of silicon nanowires with optimized characteristics and fabrication of radial junction solar cells with < 100 nm amorphous silicon absorber layer / Ahmed N., Ramasamy P., Bhargav P. B., Rayerfrancis A., Chandra B. // *Materials Science in Semiconductor Processing*. – 2020. – Vol. 106. – 104778.
7. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences / K. Schwarz, P. Blaha, G. K. H. Madsen // *Comput. Phys. Commun.* – 2002. – Vol. 147. – № 1. – C. 71–76; № 2. – C. 71-76.
8. Farberovich O. V., Kurganskii S. I., Domashevskaya E. P. Problems of the OPW method. II. Calculation of the band structure of ZnS and CdS // *Physica status solidi (b)*. - 1980. - V. 97, N 2. - P. 631 - 640.
9. Kelly S. D., Hesterberg D., Ravel B. Analysis of soils and minerals using X-ray absorption spectroscopy, in: A.L. Ulery, L.R. Drees (Eds.), *Methods of Soil Analysis Part 5: Mineralogical methods*, Soil Science Society of America, Inc., Madison, 2008, pp. 387-463.
10. Hesterberg D. Macroscale Chemical Properties and X-Ray Absorption Spectroscopy of Soil Phosphorus, in: B. Singh, M. Grafe (Eds.), *Synchrotron-Based Techniques in Soils and Sediments*, Elsevier, 2010, pp. 313-356.
11. Turishchev S. Yu. Surface deep profile synchrotron studies of mechanically modified top-down silicon nanowires array using ultrasoft X-ray absorption near edge structure spectroscopy / S. Yu. Turishchev, E. V. Parinova, A. K. Pisljaruk, D.A. Koyuda, D. Yermukhamed, T. Ming, R. Ovsyannikov, D. Smirnov, A. Makarova, V. Sivakov // *Scientific Reports*. - 2019. - Vol. 9. - P. 8066.

MODELING OF X-RAY ABSORPTION SPECTRA OF SILICON COATED WITH A LAYER OF NATURAL OXIDE

O. A. Dezhina, M. D. Manyakin, E. V. Parinova, D. A. Koyuda

Voronezh State University

To study the electronic structure of silicon-based materials, the experimental method XANES is used. The primary task was to divide the experimental $L_{2,3}$ spectra into L_2 and L_3 spectra. The XANES L_3 spectrum of a real silicon sample covered with a layer of natural oxide SiO_2 was modeled using the linear combination fitting method. The calculation and simulation results are in good agreement with the experiment. Such an analysis will help to consider the contribution of not only silicon dioxide, but also its suboxides.

Keywords: crystalline silicon, silicon dioxide, XANES spectra, $L_{2,3}$ spectra, natural oxide layer, modeling, absorption edge, LAPW method.

ВЛИЯНИЕ НИЗКООМНЫХ ТОКОВЫХ КОНТАКТОВ НА ИЗМЕРЕНИЕ ЭФФЕКТА ХОЛЛА В АНИЗОТРОПНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛАСТИНАХ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ФОРМЫ. ЧАСТЬ 1. ПОСТАНОВКА И РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

А. А. Заворотний^{1, 2}

¹Липецкий государственный технический университет

²МБОУ «Школа № 6» г. Липецка имени В. Шавкова

aazavorotniy@mail.ru

Представлены постановка и решение краевой задачи электродинамики по распределению потенциала электрического поля в области анизотропной полупроводниковой пластины прямоугольной формы, находящейся во внешнем поперечном магнитном поле. При этом учтено, что на периметре исследуемого кристалла находятся ассиметрично расположенные низкоомные токовые электроды. Решение данной задачи подводит к анализу шунтирующего влияния контактов на результаты локальных измерений эффекта Холла.

Ключевые слова: анизотропный полупроводник, шунтирующее влияние электродов, эффект Холла, двухзондовый метод.

Эффект Холла в настоящее время является одним из основных методов определения концентрации и подвижности носителей заряда в полупроводниковых образцах различной геометрической формы [1, 2]. Однако на практике наиболее часто используются кристаллы правильной геометрической формы (прямоугольной, квадратной, круглой и т.п.), так как в таких образцах для измерения постоянной Холла применяют простую в расчетах формулу Ван дер Пау [1, 3].

В свою очередь в последнее время анизотропные по отношению к удельной электропроводности полупроводники находят все большее применение в структурах и приборах функциональной электроники ввиду более высокой чувствительности к внешним воздействиям по сравнению с изотропными кристаллами [2, 4]. Поэтому представляет интерес создание новых или совершенствование уже известных методов измерений электрофизических параметров в таких кристаллах с учетом их особенностей.

В ряде работ [2, 5, 6] на основе двухзондового метода предложены простые в реализации методики измерения э.д.с. Холла в изотропных и анизотропных полупроводниковых пластинах прямоугольной формы. Однако постановка и решение краевых задач электродинамики по распределению потенциала электрического поля в этих публикациях не учитывают закорачивающего эффекта токовых контактов, расположенных на периметре исследуемого кристалла, на результаты измерения эффекта Холла, поскольку считается, что площадь токовых контактов значительно меньше, чем размеры исследуемых кристаллов. Од-

нако подобная ситуация справедлива далеко не всегда, например, с тех случаях, когда измерения проводятся в непосредственной близости к токовому электроду или когда размеры контактов сравнимы с размерами исследуемого образца. Впервые учет этого момента рассматривался в работе [7], где предложено решение краевой задачи, в которой учитывается шунтирующее влияния низкоомных контактов на распределение холловского потенциала в области изотропной полупроводниковой пластины. Однако в данной публикации нет учета анизотропии удельной электропроводимости, асимметричности расположения токовых контактов, а также не указано, насколько сильно влияет закорачивающее действие электродов на распределение потенциала электрического поля в области кристалла по сравнению с задачами, где шунтирующее влияние не учитывалось. Такие задачи рассмотрены, например, в работах [2, 6]. В работе [8] решена аналогичная статье [7] задача, но уже для анизотропного полупроводника, однако все так же без учета асимметричности и разных размеров контактов, без сравнения с другими работами и без выражения, позволяющего локальным образом проводить измерения э.д.с. Холла на плоской поверхности образца.

Постановке и решению краевой задачи электродинамики по распределению потенциала электрического поля в области анизотропной полупроводниковой пластины, находящейся во внешнем поперечном постоянном магнитном поле, при расположении токовых низкоомных контактов и измерительных точечных зондов согласно двухзондовому методу измерения э.д.с. Холла посвящена данная работа.

Известно, что тензор электропроводности под влиянием внешнего магнитного поля принимает следующий вид [9]:

$$\hat{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \sigma_x \sigma_y R_z B \\ -\sigma_x \sigma_y R_z B & \sigma_y \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где σ_x, σ_y – главные направления тензора электропроводности, R_z – компонента тензора коэффициента Холла вдоль оси Oz , B – индукция внешнего магнитного поля.

Рассмотрим анизотропную полупроводниковую пластину прямоугольной формы, ориентированную вдоль σ_x, σ_y и находящуюся во внешнем магнитном поле, направленном вдоль оси Oz (рис. 1). Исследуемый кристалл имеет следующие геометрические размеры: a – длина, b – ширина, d – толщина. Низкоомные токовые контакты 1 и 2, положение которых задается параметрами b_1 и b_2 соответственно, расположены на противоположенных гранях образца и имеют размеры $2c_1, 2c_2$ одинаковой толщины d . На плоской поверхности пластины находятся прижимные зонды 3 и 4, образуя измерительный зондовый пробник. Их положение относительно центра этого пробника с координатами (a_0, b_0) задается параметром l .

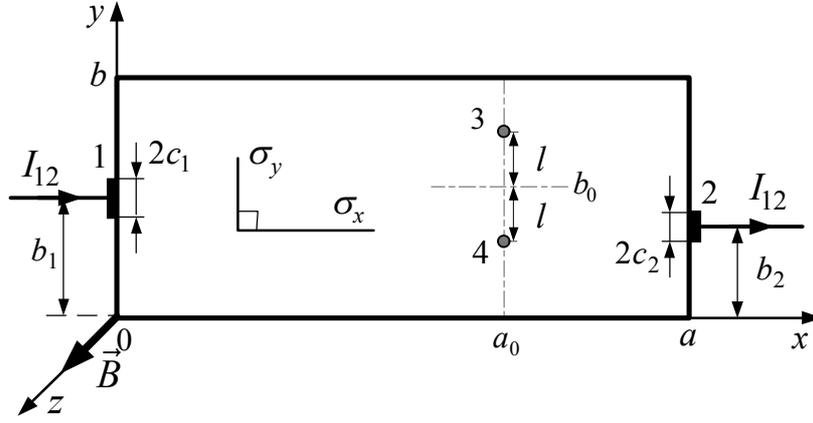


Рис. 1. Схема расположения токовых и измерительных контактов на поверхности образца

При пропускании через контакты 1 и 2 постоянного тока силой I_{12} в установившемся режиме потенциал электрического поля в области анизотропного полупроводника удовлетворяет следующей краевой задаче электродинамики [2, 6]:

$$\sigma_x \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0; \quad (2)$$

$$\left(\sigma_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sigma_x \sigma_y R_z B \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{x=0} = \begin{cases} -\frac{I_{12}}{2c_1 d}, & \text{при } b_1 - c_1 \leq y \leq b_1 + c_1; \\ 0, & \text{в остальной области;} \end{cases} \quad (3)$$

$$\left(\sigma_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sigma_x \sigma_y R_z B \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \Big|_{x=a} = \begin{cases} -\frac{I_{12}}{2c_2 d}, & \text{при } b_2 - c_2 \leq y \leq b_2 + c_2; \\ 0, & \text{в остальной области;} \end{cases} \quad (4)$$

$$\left(\sigma_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} - \sigma_x \sigma_y R_z B \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \Big|_{y=0, y=b} = 0. \quad (5)$$

Граничные условия (3)-(5) получены из предположения, что нормальная составляющая плотности тока равна нулю всюду, кроме точек под токовыми контактами.

Решение краевой задачи (2)-(5) ищется методом разделения переменных путем представления общего решения в виде комплексного ряда Фурье [10]:

$$\varphi(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} [A_n \text{sh}(\gamma \beta_n x) + B_n \text{ch}(\gamma \beta_n x)] \cdot \exp(i \beta_n y), \quad (6)$$

$$\gamma = \sqrt{\sigma_y / \sigma_x}, \quad \beta_n = \pi n / b, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

где A_n, B_n – коэффициенты, зависящие от n , и подлежащие определению.

Подстановка выражения (6) в (3), (4) и освобождение от экспоненты путем интегрирования по y приводит к следующим системам уравнений относительно коэффициентов A_n и B_n :

$$A_n \gamma + B_n i \sigma_y R_z B = \begin{cases} -\frac{2I_{12}}{\sigma_x dbc_1} \Theta_n \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \cos \beta_n b_1}{\beta_n^2}, & \text{при } n = 0, 2, 4, \dots \\ i \frac{2I_{12}}{\sigma_x dbc_1} \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \sin \beta_n b_1}{\beta_n^2}, & \text{при } n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (7)$$

$$A_n [\gamma \operatorname{ch}(\gamma \beta_n a) + i \sigma_y R_z B \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)] + B_n [\gamma \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a) + i \sigma_y R_z B \operatorname{ch}(\gamma \beta_n a)] = \begin{cases} -\frac{2I_{12}}{\sigma_x dbc_2} \Theta_n \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \cos \beta_n b_2}{\beta_n^2}, & \text{при } n = 0, 2, 4, \dots \\ i \frac{2I_{12}}{\sigma_x dbc_2} \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \sin \beta_n b_2}{\beta_n^2}, & \text{при } n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (8)$$

В (7) и (8) введено, что $\Theta_n = \begin{cases} 1, & \text{при } n \neq 0, \\ 1/2, & \text{при } n = 0. \end{cases}$

В системах (7)-(8) предполагается задание «мнимых токов», физический смысл которых состоит в том, что через токовые контакты происходит «стекание» холловских зарядов. Именно эти «мнимые токи» и позволяют учесть шунтирующее влияние электродов на результаты измерений [7, 8]. Заметим, что в работах [2, 3, 5, 6, 11] указывалось, что в виду малости входных сечений токовых контактов этими слагаемыми можно пренебречь, однако в ряде случаев необходимо проведение измерения э.д.с. Холла в непосредственной близости к металлическим электродам, поэтому не всегда можно игнорировать закорачивающий эффект.

Решая отдельно систему уравнений для четного и нечетного n и складывая полученные выражения, в итоге будем иметь следующее выражение для потенциала электрического поля в области образца:

$$\varphi(x, y) = \varphi_0(x, y) + \varphi_H(x, y), \quad (9)$$

где $\varphi_0(x, y)$ – потенциал электрического поля в области исследуемого образца без магнитного поля:

$$\varphi_0(x, y) = \frac{I_{12}(a/2 - x)}{db\sigma_x} + \frac{2I_{12}}{db\sigma_x \gamma} \sum_{n=2,4,\dots} \left\{ \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \cos \beta_n b_1}{\beta_n^2 c_1} \cdot \frac{\operatorname{ch}[\gamma \beta_n (x - a)]}{\operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} - \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \cos \beta_n b_2}{\beta_n^2 c_2} \cdot \frac{\operatorname{ch}(\gamma \beta_n x)}{\operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} \right\} \cdot \cos \beta_n y - \frac{2I_{12}}{db\sigma_x \gamma} \sum_{n=1,3,\dots} \left\{ \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \sin \beta_n b_1}{\beta_n^2 c_1} \cdot \frac{\operatorname{ch}[\gamma \beta_n (x - a)]}{\operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} - \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \sin \beta_n b_2}{\beta_n^2 c_2} \cdot \frac{\operatorname{ch}(\gamma \beta_n x)}{\operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} \right\} \cdot \sin \beta_n y; \quad (10)$$

$\varphi_H(x, y)$ – дополнительный холловский потенциал, возникающий при включении внешнего магнитного поля [2, 6, 11]:

$$\begin{aligned}
\varphi_H(x, y) = & \frac{I_{12} R_z B}{db} \cdot \frac{y - b/2}{1 + \sigma_x \sigma_y R_z^2 B^2} - \\
& - \frac{2I_{12} R_z B}{db(1 + \sigma_x \sigma_y R_z^2 B^2)} \sum_{n=2,4,\dots} \left\{ \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \cos \beta_n b_1 \cdot \text{sh}[\gamma \beta_n (a - x)]}{\beta_n^2 c_1 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n a)} + \right. \\
& \left. + \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \cos \beta_n b_2 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n x)}{\beta_n^2 c_2 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n a)} \right\} \cdot \sin \beta_n y + \\
& + \frac{2I_{12} R_z B}{db(1 + \sigma_x \sigma_y R_z^2 B^2)} \sum_{n=1,3,\dots} \left\{ \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \sin \beta_n b_1 \cdot \text{sh}[\gamma \beta_n (a - x)]}{\beta_n^2 c_1 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n a)} + \right. \\
& \left. + \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \sin \beta_n b_2 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n x)}{\beta_n^2 c_2 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n a)} \right\} \cdot \cos \beta_n y.
\end{aligned} \tag{11}$$

На рис. 2а представлено моделирование эквипотенциалей в области анизотропного образца со следующими параметрами: $a/b = 2$, $d/b = 0,004$, $2c_1 = 0,2b$, $2c_2 = 0,3b$, $b_1 = 0,25b$, $b_2 = 0,75b$, $\sigma_x/\sigma_y = 4$, $I_{12} = 30$ мА, $B = 0,9$ Тл, $R_z = 5 \cdot 10^{-3}$ м³/Кл. Для наглядности на рисунке пунктирными линиями представлено также решение, не учитывающее шунтирующего влияния токовых электродов на распределение потенциала в области полупроводникового кристалла [2, 6, 11]. Видно, что значения для потенциала, рассчитанного по выражению (9), довольно сильно отличаются от значений потенциала, высчитанного без дополнительных слагаемых с «мнимыми токами».

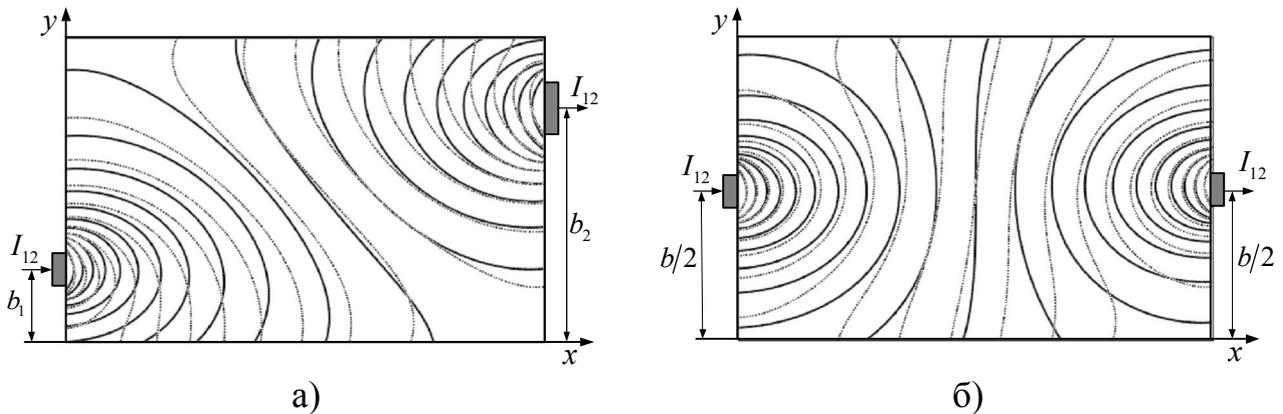


Рис. 2. Распределение потенциала электрического поля в области анизотропного кристалла с ассиметрично (а) и симметрично (б) расположенными токовыми контактами. Сплошные линии – эквипотенциали с учетом шунтирующего влияния электродов, пунктирные линии – эквипотенциали без этого учета

На рис. 2б для наглядности представлено моделирование эквипотенциалей анизотропного полупроводникового образца с симметричным ($b_1 = b_2 = 0,5b$) расположением контактов одинаковой ширины ($2c_1 = 2c_2 = 0,1b$);

все остальные параметры моделирования такие же, как и для рис. 2а. Из рис. 2б видно, что на оси симметрии между токовыми контактами значения потенциала, рассчитанного по двух разным методикам, будут различаться не сильно, тогда как при приближении к границам образца будет все заметнее проявление различий между результатами замеров потенциала с учетом закорачивающего эффекта токовых электродов и без него. Данный факт связан с тем, что при проявлении эффекта Холла носители заряда разных знаков под действием силы Лоренца стремятся как можно дальше расположиться друг от друга, поэтому «стекание» носителей будет преимущественно происходить с границ кристалла.

Заметим, что в относительно слабых магнитных полях, когда можно пренебречь эффектом физического магнетосопротивления образца, т.е. когда $\sigma_x \sigma_y R_z^2 B^2 \ll 1$, а также, когда токовые контакты расположены посередине боковых граней образца ($b_1 = b_2 = b/2$) и имеют одинаковые размеры ($2c_1 = 2c_2 = 2c$), выражение (11) совпадает с выражением для потенциала электрического поля, полученным в работе [8] Н. Н. Поляковым. Таким образом, можно считать, что данная работа является логическим развитием и обобщением статьи [8].

Выражение (11) будет использовано во второй части данной работы для получения и анализа расчетной формулы локального измерения э.д.с. Холла между прижимными зондами 3 и 4 (рис. 1).

Литература

1. Павлов, Л. П. Методы измерения параметров полупроводниковых материалов / Л. П. Павлов. – М.: Высшая школа, 1987. – 239 с.
2. Филиппов, В. В. Особенности явлений электронного переноса в анизотропных полупроводниках: монография / В. В. Филиппов. – М.: Издательство «Спутник+», 2015. – 259 с.
3. Кучис, Е. В. Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования / Е. В. Кучис. – М.: Радио и связь, 1990. – 264 с.
4. Маренкин, С. Ф. Фосфиды, арсениды цинка и кадмия: монография / С. Ф. Маренкин, В. М. Трухан. – Минск, 2010. – 224 с.
5. Батавин, В. В. Измерение параметров полупроводниковых материалов и структур / В. В. Батавин, Ю. А. Концевой, Ю. В. Федорович. – М.: Радио и связь, 1985. – 264 с.
6. Филиппов, В. В. Методы измерения и контроля коэффициентов электронного переноса анизотропных полупроводников: монография / В. В. Филиппов, Н. Н. Поляков. – Липецк: ЛГПУ, 2011. – 110 с.
7. Поляков, Н. Н. Измерение коэффициента Холла и удельного сопротивления полупроводников с низкоомными токовыми электродами // Заводская лаборатория, 1990, Т.56, №5. – с. 42-46.
8. Поляков, Н. Н. Измерение коэффициента Холла и электропроводности анизотропных полупроводниковых образцов // Известия вузов. Физика, 1990, №11. – с. 56-60.
9. Аскеров, Б. М. Электронные явления переноса в полупроводниках: монография / Б.М. Аскеров. – М.: Наука, 1985. – 320 с.
10. Эдвардс, Р. Ряды Фурье в современном изложении. В 2-х томах. Том 1 / Р. Эдвардс. – М.: Мир, 1985. – 264 с.

11. Заворотний, А. А. Особенности контактных методов измерений кинетических коэффициентов анизотропных полупроводниковых структур: Дис. кан.-та физ.-мат. наук: 01.04.10 / А. А. Заворотний. – Липецк: ЛГПУ, 2018. – 169 с.

INFLUENCE OF LOW-RESISTANCE CURRENT CONTACTS
ON HALL EFFECT MEASUREMENTS TAKEN WITH ANISOTROPIC
SEMICONDUCTOR WAFERS OF RECTANGULAR SHAPE.
PART 1. IDENTIFICATION AND SOLUTION OF A BOUNDARY VALUE
ELECTRODYNAMICS PROBLEM

A. A. Zavorotniy^{1,2}

¹Lipetsk State Technical University

²V. Shavkov School No.6 (City of Lipetsk)

The paper presents the identification and solution of a boundary value electrostatics problem regarding electric field potential distribution in a rectangular anisotropic semiconductor wafer located in an external transverse magnetic field. It also factors in that low-resistance current electrodes are placed asymmetrically on the perimeter of the crystal under study. The solution of this problem leads to the analysis of the shunting effect produced by contacts on the local Hall effect measurements.

Keywords: anisotropic semiconductor, shunting effect of electrodes, Hall effect, two-probe method.

ВЛИЯНИЕ НИЗКООМНЫХ ТОКОВЫХ КОНТАКТОВ НА ИЗМЕРЕНИЕ ЭФФЕКТА ХОЛЛА В АНИЗОТРОПНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛАСТИНАХ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ФОРМЫ. ЧАСТЬ 2. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ РЕШЕНИЯ И ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ

А. А. Заворотний^{1, 2}

¹ФГБОУ ВО «Липецкий государственный технический университет»

²МБОУ «Школа № 6» г. Липецка им. В. Шавкова

aazavorotniy@mail.ru

На основе решения краевой задачи электродинамики по распределению потенциала электрического поля в области анизотропной полупроводниковой пластины прямоугольной формы, находящейся во внешнем магнитном поле, получено выражение для э.д.с. Холла. Проведено моделирование зависимости данного выражения от ряда значащих параметров исследуемого кристалла, токовых электродов и положения измерительных зондов. На основе представленного анализа даны конкретные практические рекомендации по проведению измерений в заводских лабораториях.

Ключевые слова: анизотропный полупроводник, шунтирующее влияние электродов, эффект Холла, двухзондовый метод.

Значение эффекта Холла для практических нужд современной полупроводниковой электроники переоценить довольно трудно, поскольку на основе данного эффекта разработаны уникальные методики определения одних из самых важных параметров носителей заряда в кристаллах: их концентрация и подвижность. Причем следует заметить, что хотя методики измерений э.д.с. Холла на постоянных токах в отличие от методов на переменных и обладают большей погрешностью и не позволяют учесть и устранить ряд сопутствующих побочных эффектов, но они достаточно просты в реализации и не требуют дорогостоящего оборудования, а теория самих этих методов измерений хорошо известна и надежно себя зарекомендовала при определении параметров изотропных, относительно удельной электрической проводимости, полупроводниковых кристаллов [1, 2, 3]. Чего нельзя с достаточной уверенностью сказать о кристаллах, обладающих анизотропией этой проводимости. Более того, в анизотропных образцах теория методов измерений на переменных токах становится чрезвычайно громоздкой, а возникающие при этом дифференциальные уравнения не поддаются точным математическим решениям [4, 5].

Все это приводит к тому, что в промышленном производстве полупроводниковых кристаллов с тензорной удельной проводимостью уделяется большое значение методикам измерений параметров основных носителей заряда на постоянных токах. Поэтому на сегодняшний момент в связи с повышением спроса на качественные материалы принципиально важным является продолжение разработки новых и/или модернизации существующих методов измере-

ний кинетических характеристик носителей заряда в условиях повышенной чувствительности анизотропных полупроводниковых кристаллов к внешним воздействиям.

В данной работе рассмотрим модернизацию двухзондового метода измерения э.д.с. Холла в прямоугольном полупроводниковом кристалле, обладающем анизотропией удельной электропроводности. При этом предполагается, что компоненты тензора электропроводности уже известны (они могут быть определены по различным методикам, предложенным в работах [4, 5, 6]), а сам образец вырезан вдоль главных направлений этого тензора. Заметим, что разрабатываемые здесь поправки к методике измерения коэффициента Холла, учитывающие шунтирующее влияние токовых контактов, проявляющееся в «стекании» основных носителей заряда с граней кристалла, осуществляется при постоянном токе, протекающем через низкоомные электроды металл-полупроводник 1 и 2, расположенные на периметре исследуемого образца (рис. 1).

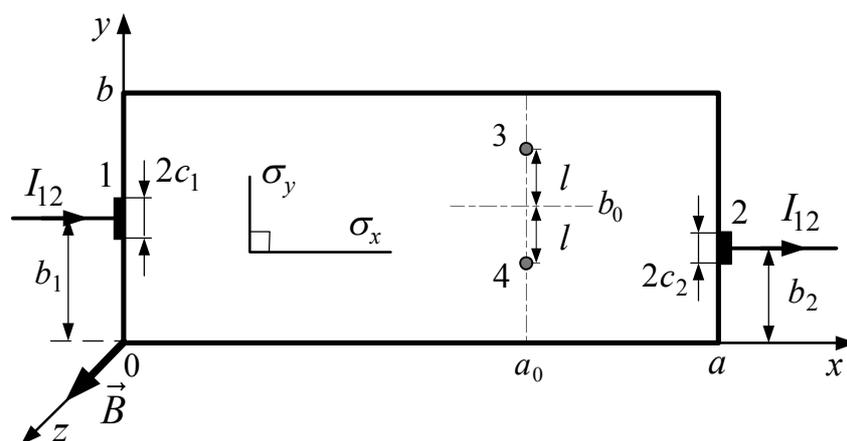


Рис. 1. Параметры кристалла и схема расположения токовых и измерительных контактов на образце

В первой части работы было получено выражение для холловского потенциала, дополнительно возникающего при включении поперечного постоянного магнитного поля, поэтому, используя этот результат, определим выражение для э.д.с. Холла между измерительными зондами 3 и 4 (рис. 1) следующим образом:

$$\varepsilon_H = \varphi_H(x = a_0, y = b_0 + l) - \varphi_H(x = a_0, y = b_0 - l) = \frac{I_{12} R_z B}{d(1 + \sigma_x \sigma_y R_z^2 B^2)} \cdot Q, \quad (1)$$

где (a_0, b_0) – координаты центра измерительного прижимного пробника, l – расстояние от этого центра до измерительных зондов 3 и 4, I_{12} – сила постоянного тока, протекающая через электроды 1 и 2, R_z – компонента тензора коэффициента Холла вдоль оси Oz , B – модуль индукции магнитного поля, d – толщина исследуемого кристалла, σ_x, σ_y – компоненты тензора удельной электропроводности, Q – поправочный множитель, учитывающий анизотропию

электропроводности, размеры и расположение токовых контактов на периметре и измерительных зондов на поверхности исследуемого образца, имеющий следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 Q = & \frac{2l}{b} - \frac{4}{b} \sum_{n=2,4,\dots} \left\{ \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \cos \beta_n b_1 \cdot \operatorname{sh}[\gamma \beta_n (a - a_0)]}{\beta_n^2 c_1 \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} + \right. \\
 & \left. + \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \cos \beta_n b_2 \cdot \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a_0)}{\beta_n^2 c_2 \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} \right\} \cdot \cos \beta_n b_0 \cdot \sin \beta_n l - \\
 & - \frac{4}{b} \sum_{n=1,3,\dots} \left\{ \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \sin \beta_n b_1 \cdot \operatorname{sh}[\gamma \beta_n (a - a_0)]}{\beta_n^2 c_1 \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} + \right. \\
 & \left. + \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \sin \beta_n b_2 \cdot \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a_0)}{\beta_n^2 c_2 \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} \right\} \cdot \sin \beta_n b_0 \cdot \sin \beta_n l,
 \end{aligned} \tag{2}$$

где $\beta_n = \frac{\pi n}{b}$, $\gamma = \sqrt{\sigma_y / \sigma_x}$ – параметр анизотропии, $2c_1, 2c_2$ – размеры токовых контактов, b_1, b_2 – параметры, задающие положение этих электродов на периметре кристалла, a – длина образца, b – его ширина.

Заметим, что в практике исследования изотропных полупроводниковых кристаллов эффект Холла измеряют в относительно слабых магнитных полях, в которых можно пренебречь эффектом физического магнетосопротивления образца (в нашем случае это проявляется в пренебрежении слагаемым $\sigma_x \sigma_y R_z^2 B^2$ по сравнению с единицей в выражении (1)), токовые контакты стараются изготавливать одинаковых размеров и располагать их на оси симметрии образца $y = b/2$, т.е. в выражении (2) для Q при этом нужно положить, что $2c_1 = 2c_2 = 2c$ и $b_1 = b_2 = b/2$ [4, 5, 7]. С учетом указанных замечаний, выражения (1) и (2) примут более простой вид:

$$\varepsilon_H = \frac{I_{12} R_z B}{d} \cdot Q_1, \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
 Q_1 = & \frac{2l}{b} - \frac{4}{b} \sum_{n=2,4,\dots} \left\{ (-1)^{n/2} \frac{\sin \beta_n c}{\beta_n c} \cdot \frac{\operatorname{sh}[\gamma \beta_n (a - a_0)] + \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a_0)}{\beta_n \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} \cos \beta_n b_0 \sin \beta_n l \right\} - \\
 & - \frac{4}{b} \sum_{n=1,3,\dots} \left\{ (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{\sin \beta_n c}{\beta_n c} \cdot \frac{\operatorname{sh}[\gamma \beta_n (a - a_0)] + \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a_0)}{\beta_n \operatorname{sh}(\gamma \beta_n a)} \sin \beta_n b_0 \sin \beta_n l \right\}.
 \end{aligned} \tag{4}$$

Отметим, что ранее в работах [4, 6] в аналогичных выражению (4) формулах для множителя Q_1 не учитывалось слагаемое с нечетными n , что возможно лишь при условии омичности токовых контактов, а также значительной удаленности измерительного пробника от электродов [8, 9].

Проведем анализ множителя Q в зависимости от различных практически значимых параметров, входящих в выражение (2). В процессе анализа будем проводить сравнение с множителем Q' , для которого опустим слагаемое, содержащее ряд с нечетными n , т.е. Q' – множитель, определяемый выражением (2), но без третьего слагаемого:

$$Q' = \frac{2l}{b} - \frac{4}{b} \sum_{n=2,4,\dots} \left\{ \frac{\sin \beta_n c_1 \cdot \cos \beta_n b_1 \cdot \text{sh}[\gamma \beta_n (a - a_0)]}{\beta_n^2 c_1 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n a)} + \frac{\sin \beta_n c_2 \cdot \cos \beta_n b_2 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n a_0)}{\beta_n^2 c_2 \cdot \text{sh}(\gamma \beta_n a)} \right\} \cdot \cos \beta_n b_0 \cdot \sin \beta_n l. \quad (5)$$

Именно в таком виде исходя из работ [4, 6] можно получить поправочный множитель для выражений э.д.с. Холла при использовании двухзондового метода измерений.

На рис. 2 представлены в качестве примера зависимости множителя Q и Q' от параметра анизотропии γ для прямоугольных полупроводниковых пластин, отношение линейных размеров которых составляет $a/b = 2$. При данном моделировании использованы следующие параметры: $a_0 = 0,1a$, $b_0 = 0,5b$, $l = 0,2b$. Нумерация линий на рис. 2 обозначает следующее: 1 – $Q(b_1 = b_2 = 0,5b, c_1 = c_2 = 0,001b)$, 2 – $Q'(b_1 = b_2 = 0,5b, c_1 = c_2 = 0,001b)$, 3 – $Q(b_1 = b_2 = 0,5b, c_1 = c_2 = 0,3b)$, 4 – $Q'(b_1 = b_2 = 0,5b, c_1 = c_2 = 0,3b)$, 5 – $Q(b_1 = 0,25b, b_2 = 0,75b, c_1 = c_2 = 0,1b)$, 6 – $Q'(b_1 = 0,25b, b_2 = 0,75b, c_1 = c_2 = 0,1b)$.

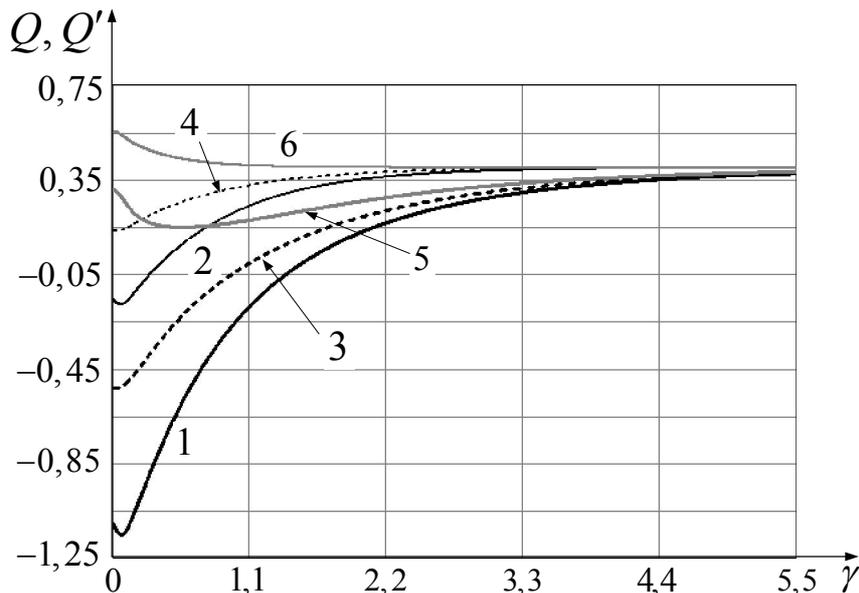


Рис. 2. Зависимости множителей Q и Q' от параметра анизотропии γ

Рисунок показывает достаточно ярко выраженную зависимость множителя Q , определяемого выражением (2), от анизотропии удельной электропрово-

димости. В случае преобладания проводимости σ_x над σ_y , т.е. когда $\gamma < 1$, наблюдается существенная разница в значениях поправочного множителя Q с учетом шунтирующего влияния токовых электродов от значений аналогичного множителя Q' в случаях, когда ряд с нечетными n не учитывался при решении краевой задачи электродинамики по распределению потенциала электрического поля в области полупроводникового образца. Видно, что для $\gamma > 1$ разница между Q и Q' быстро уменьшается с ростом анизотропии, доходя до незначительной при $\gamma > 4$. Из рис. 2 также видно, что размеры токовых контактов не сильно влияют на значение Q' , однако для Q , как и следовало ожидать, значения c_1 и c_2 существенно меняют результат для поправочного множителя при параметре анизотропии $\gamma < 3$. Таким образом, закорачивание токовых электродов обязательно необходимо учитывать при измерении э.д.с. Холла в образцах с тензорным характером электропроводности.

На рис. 3 представлены зависимости множителей Q и Q' от положения центра измерительного пробника вдоль оси Ox , т.е. от a_0 для некоторых значений ширины токовых электродов и параметра анизотропии. Для моделирования были взяты следующие параметры: $a/b = 2$, $b_0 = b/2$, $l = 0,2b$, $b_1 = b_2 = b/2$. На рисунке линиям соответствуют следующие обозначения: 1 – $Q(c_1 = c_2 = 0,001b, \gamma = 4)$, 2 – $Q'(c_1 = c_2 = 0,001b, \gamma = 4)$, 3 – $Q(c_1 = c_2 = 0,001b, \gamma = 0,25)$, 4 – $Q'(c_1 = c_2 = 0,001b, \gamma = 0,25)$, 5 – $Q(c_1 = c_2 = 0,4b, \gamma = 4)$, 6 – $Q'(c_1 = c_2 = 0,4b, \gamma = 4)$, 7 – $Q(c_1 = c_2 = 0,4b, \gamma = 0,25)$, 8 – $Q'(c_1 = c_2 = 0,4b, \gamma = 0,25)$.

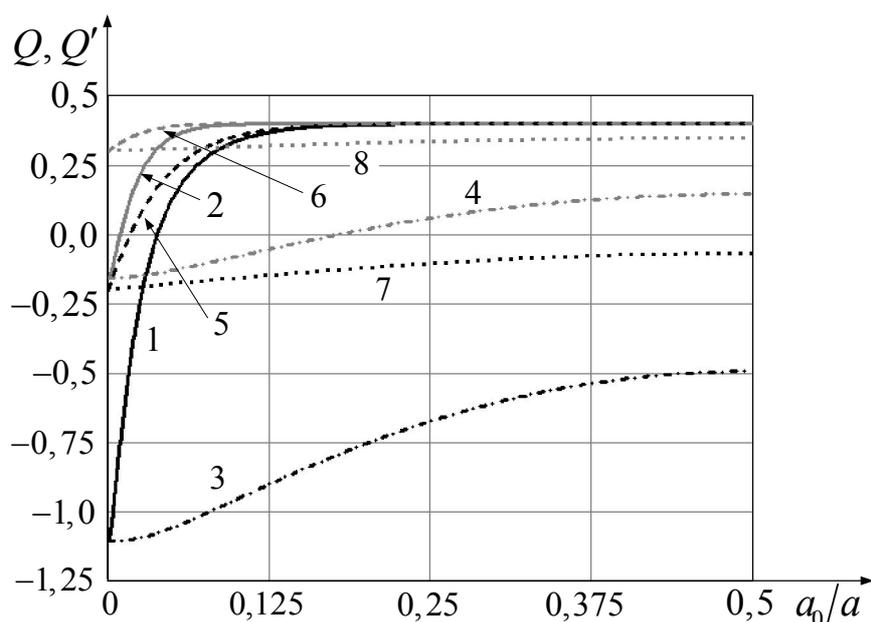


Рис. 3. Зависимости Q и Q' от координаты a_0 центра измерительного зондового пробника

Из анализа зависимостей множителей Q и Q' от a_0 по рис. 3 можно сделать следующие выводы: 1) при преобладании проводимости вдоль оси Oy ($\gamma > 1$) и положении измерительного пробника на расстоянии $a_0 > 0,125a$ значения множителей практически не различимы вне зависимости от размеров токовых контактов; 2) при $\gamma < 1$ пренебрегать шунтирующим влиянием токовых контактов в процессе измерений нельзя, поскольку в этом случае значения Q значительно отличаются от значений Q' , однако с увеличением размеров токовых электродов в данной анизотропии электропроводности зависимости этих множителей от a_0 становятся все более несущественными. Это объясняется тем, что при достаточно больших токовых контактах концентрация «стекающих» носителей заряда будет несущественно различаться в областях близких к электродам от области в центральной части исследуемого полупроводникового кристалла.

Рис. 4 изображает зависимости множителей Q и Q' от положения центра измерительного пробника вдоль оси Oy , т.е. от координаты b_0 . Для моделирования использованы следующие параметры: $a/b = 2$, $b_1 = b_2 = b/2$, $a_0 = 0,1a$, $l = 0,1b$, $\gamma = 0,25$. На рисунке линиям соответствуют следующие обозначения: 1 – $Q(c_1 = c_2 = 0,001b)$, 2 – $Q'(c_1 = c_2 = 0,001b)$, 3 – $Q(c_1 = c_2 = 0,1b)$, 4 – $Q'(c_1 = c_2 = 0,1b)$, 5 – $Q(c_1 = c_2 = 0,4b)$, 6 – $Q'(c_1 = c_2 = 0,4b)$.

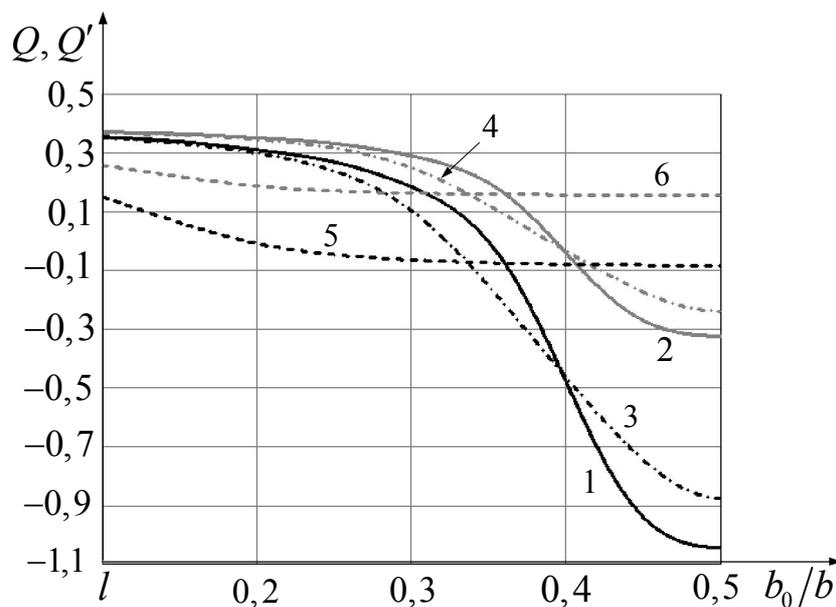


Рис. 4. Зависимости множителей Q и Q' от координаты b_0 центра измерительного пробника

Комплексный анализ зависимостей, представленных на рис. 4, позволяет сделать следующие выводы: 1) для $\gamma > 1$ значения множителей Q и Q' практически не зависят от смещения измерительного пробника вдоль оси Oy (данная

ситуация не представлена на рис. 4), однако для $\gamma < 1$ эти зависимости существенны и значительно различны для Q и Q' , поэтому в случае подобной ориентации исследуемого пробника необходимо обязательно учитывать шунтирующее влияние токовых контактов; 2) с увеличением размеров токовых электродов контрастность зависимостей снижается, но остается достаточно значимой при проведении замеров, однако при удалении измерительного пробника от токовых контактов эта зависимость практически перестает влиять на результаты измерений.

Комплексный анализ зависимостей множителей Q и Q' от линейных размеров токовых электродов, т.е. от c_1, c_2 и результаты проведенного моделирования приводят к следующим заключениям: 1) при параметре анизотропии $\gamma > 1$ изменения ширины электродов незначительно сказывается на значениях Q и Q' , но при этом между собой данные зависимости очень различны, поэтому при проведении измерений обязательно необходимо учитывать закорачивающее влияние токовых контактов; 2) при наличии асимметрии, т.е. при $b_1 \neq b_2$, в расположении токовых электродов зависимости Q и Q' от их линейных размеров снижается; 3) увеличение расстояния l между измерительными зондами существенно уменьшает контрастность данных зависимостей, приводя к незначительному изменению с возрастанием c_1, c_2 .

Из всего проведенного анализа влияния шунтирующего эффекта токовых электродов на локальное измерение коэффициента Холла можно предложить следующие практические рекомендации:

1) в большинстве случаев расположения токовых контактов на полупроводниковых образцах с преобладающей анизотропией вдоль оси между электродами, пренебрегать слагаемым, учитывающим их закорачивающее влияние, не рекомендуется, т.к. тогда погрешность измерений будет больше 7%;

2) для уменьшения погрешности результата измерений рекомендуется также избегать проведения замеров, располагая измерительные зонды близко к границам исследуемого кристалла, т.к. преимущественно с краев образца происходит «стекание» носителей заряда;

3) для уменьшения влияния побочных термоэлектрических и термомагнитных явлений следует пропускать постоянный ток в момент непосредственного измерения, а сами измерения проводить достаточно быстро.

Методика измерения э.д.с. Холла с предложенными в данной работе поправками, учитывающими шунтирующее влияние токовых электродов, прошла успешную апробацию на анизотропных полупроводниковых кристаллах CdAs_2 и CdSb . Сравнение новых результатов с предыдущими значениями, полученными в методиках без учета закорачивающего эффекта токовых контактов [4, 5, 6], позволило уменьшить методическую погрешность измерений с 6,5% до 3,35% в непосредственной близости к ним, что является достаточно значимым результатом, подтверждающим правильность разработанной модернизации двухзондового метода определения э.д.с. Холла.

Литература

1. Кучис, Е. В. Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования / Е. В. Кучис. – М.: Радио и связь, 1990. – 264 с.
2. Цидильковский, И. М. Термомагнитные явления в полупроводниках / И. М. Цидильковский. – М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1960. – 396 с.
3. Павлов, Л. П. Методы измерения параметров полупроводниковых материалов / Л. П. Павлов. – М.: Высшая школа, 1987. – 239 с.
4. Филиппов, В. В. Особенности явлений электронного переноса в анизотропных полупроводниках: монография / В. В. Филиппов. – М.: Издательство «Спутник+», 2015. – 259 с.
5. Филиппов, В. В. Методы измерения и контроля коэффициентов электронного переноса анизотропных полупроводников: монография / В. В. Филиппов, Н. Н. Поляков. – Липецк: ЛГПУ, 2011. – 110 с.
6. Заворотный, А. А. Особенности контактных методов измерений кинетических коэффициентов анизотропных полупроводниковых структур: Дис. кан.-та физ.-мат. наук: 01.04.10 / А. А. Заворотный. – Липецк: ЛГПУ, 2018. – 169 с.
7. Поляков, Н. Н. Измерение коэффициента Холла и удельного сопротивления полупроводников с низкоомными токовыми электродами // Заводская лаборатория, 1990, Т.56, №5. – с. 42-46.
8. Поляков, Н. Н. Кинетические явления в ограниченных анизотропных и неоднородных полупроводниках: Дис. д-ра физ.-мат. наук: 01.04.10 / Н. Н. Поляков. – Липецк: ЛГПУ, 1995. – 308 с.
9. Филиппов, В. В. Явления электронного переноса в анизотропных и низкоразмерных полупроводниковых структурах: Дис. д-ра физ.-мат. наук: 01.04.10 / В. В. Филиппов. - Липецк: ЛГПУ, 2012. – 317 с.

INFLUENCE OF LOW-RESISTANCE CURRENT CONTACTS ON HALL EFFECT MEASUREMENTS TAKEN WITH ANISOTROPIC SEMICONDUCTOR WAFERS OF RECTANGULAR SHAPE. PART 2. ANALYSIS OF THE SOLUTION RESULTS AND PRACTICAL RECOMMENDATIONS

A. A. Zavorotniy^{1,2}

¹Lipetsk State Technical University

²V. Shavkov School No.6 (City of Lipetsk)

Based on the solution of the boundary value problem of electrodynamics on the distribution of the electric field potential in the region of an anisotropic rectangular-shaped semiconductor plate located in an external magnetic field, an expression for Hall's electromotive force was obtained. The modeling of the dependence of this expression on a number of significant parameters of the crystal under study, the current electrodes and the position of the measuring probes was carried out. The specific practical recommendations for conducting of measurements in factory laboratories are given on the basis of the presented analysis.

Keywords: anisotropic semiconductor, shunting effect of electrodes, Hall's effect, two-probe method.

АППРОКСИМАЦИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЗАКРИТИЧЕСКИХ АЗОТА И КИСЛОРОДА

С. В. Бородкин¹, И. Л. Батаронов², А. В. Иванов¹

¹Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия им. профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж

²Воронежский государственный технический университет
borodkinstanislav@yandex.ru

Для аналитических зависимостей теплофизических характеристик вещества в сверхкритическом состоянии разработаны методы физической и бигиперболической аппроксимации. Методом физической аппроксимации построены уравнения для плотности и теплоемкости. Метод бигиперболической аппроксимации использован для динамической вязкости, теплопроводности и энтальпии. Показано хорошее качество полученных аппроксимаций в закритической области состояния.

Ключевые слова: аппроксимация, алгебраические кривые, теплофизические характеристики, сверхкритическое состояние.

Для проведения численного моделирования и обработки экспериментальных данных необходимо получить аналитические зависимости теплофизических параметров вещества [1, 2]. Для сверхкритического и закритического состояний эта задача не является тривиальной, поскольку параметры изменяются от типичных для жидкого до типичных для газообразного состояний и характеризуются наличием аномального поведения в критической области [2].

Построение аналитических зависимостей будем проводить на основе известных проверенных данных по этим параметрам в сверхкритическом состоянии вещества [3-6]. Аппроксимацию будем проводить подбором подходящих аналитических зависимостей.

В качестве нормировочных значений переменных для сверхкритического состояния обычно используются критические параметры вещества. Для теплофизических характеристик, неопределенных в критической точке, возьмем идеально-газовые значения характеристик. Принятые далее нормировочные значения для кислорода и азота приведены в таблице.

Критические и нормировочные значения переменных

Параметр	Единица измерения	Значение для кислорода	Значение для азота
Газовая постоянная R	Дж/(кг·К)	259,835	296,8
Критическая температура T_k	К	154,581	126,2
Критическое давление P_k	МПа	5,043	3,400
Критическая плотность ρ_k	кг/м ³	436,2	313,1
Температура кипения $T_{ж}$ при 0,1 МПа	К	90,188	77,35
Изобарная теплоемкость C_{p0}	кДж/(кг·К)	3,5 R	3,5 R
Удельная энтальпия H	кДж/кг	313,3	313,3
Теплопроводность λ_0	мВт/(м·К)	27	27
Динамическая вязкость μ_0	10 ⁻⁷ Па·с	200	200

На эти значения будут нормированы переменные в построенных зависимостях:

$$t = \frac{T}{T_k}, \quad p = \frac{P}{P_k}, \quad r = \frac{\rho}{\rho_k}, \quad c = \frac{C_p}{C_{p0}}, \quad \mu^* = \frac{\mu}{\mu_0}, \quad \lambda^* = \frac{\lambda}{\lambda_0}, \quad h^* = \frac{h}{H}. \quad (1)$$

Аппроксимацию будем проводить в диапазоне температур 70÷450 К и диапазоне давлений 15÷40 МПа, представляющих интерес для практических систем и соответствующих закритической области.

Далее используются два вида аппроксимации: *физическая*, основанная на имеющихся физических зависимостях свойств в асимптотических пределах, и *алгебраическая*, использующая формальную схожесть зависимости с некоторой алгебраической кривой. Физическую аппроксимацию применим для зависимостей плотности и теплоемкости, алгебраическую – для кинетических коэффициентов: вязкости, теплопроводности, а также энтальпии.

Плотность. Графики термобарической зависимости плотности кислорода и азота $\rho(T, P)$ представлены на рис. 1 в виде изобарных сечений.

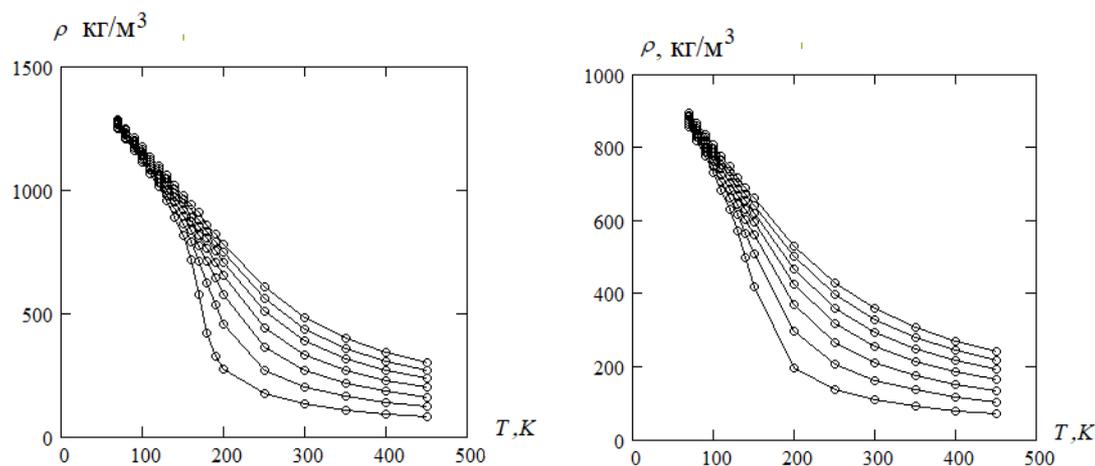


Рис. 1. Температурные зависимости плотности кислорода (слева) и азота (справа) при давлениях, МПа (снизу вверх): 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40

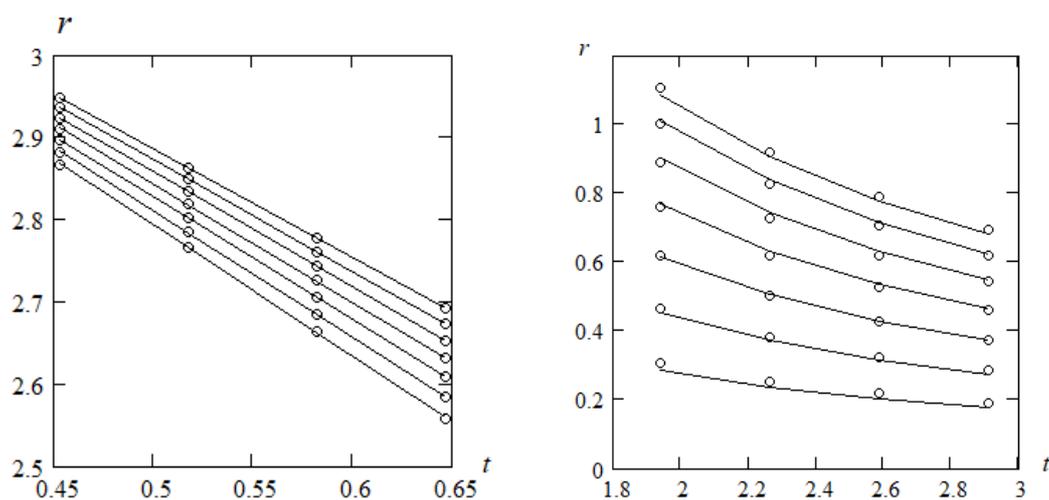


Рис. 2. Аппроксимация низкотемпературной (слева) и высокотемпературной (справа) зависимостей плотности кислорода при давлениях, МПа (снизу вверх): 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40

Из рис. 1 нетрудно заметить, что на зависимостях выделяются три области: низкотемпературная, в которой зависимость имеет характер, близкий к конденсированному состоянию, высокотемпературная, с характером, близким к газовому, и промежуточная псевдокритическая. Тогда для предельных случаев целесообразно использовать соответствующие аппроксимации, а промежуточную область получить подходящей «сшивкой» предельных зависимостей.

Низкотемпературная зависимость плотности (рис. 2) имеет почти линейный вид, как у жидкости, и может быть представлена через коэффициент объемного теплового расширения β и сжимаемость s :

$$rl(t, p) = r0 - s(p) \cdot p - \beta(p) \cdot t. \quad (2)$$

Среднеквадратическая аппроксимация данных дала следующие выражения зависимостей:

$$\begin{aligned} r0 &= 3,617; & s(p) &= 0,01401 - 6,391 \cdot 10^{-4} p; \\ \beta(p) &= 1,7203 - 0,06725 p + 2,09 \cdot 10^{-3} p^2. \end{aligned} \quad (3)$$

Зависимости (2), (3) также изображены на рис. 2 сплошными линиями и показывают хорошее согласие с экспериментальными точками.

Высокотемпературная зависимость плотности (рис. 2) имеет вид, характерный для газового состояния вещества, и может быть представлена вириальным разложением:

$$rh(t, p) = Z0 \frac{p}{t} + Z1(p) \frac{p^2}{t^2}. \quad (4)$$

МНК-аппроксимация точек на рис. 2 дала следующие выражения:

$$Z0 = 0,22; \quad Z1(p) = 0,10945 - 0,03486 \sqrt{p}. \quad (5)$$

Зависимости (4), (5) также представлены на рис. 2 сплошными линиями и показывают удовлетворительное согласие с экспериментальными значениями. Отметим, что идеально-газовое значение первого коэффициента для кислорода равно 0,288.

Для сшивки полученных зависимостей воспользуемся тем обстоятельством, что силы взаимодействия неполярных молекул изменяются с расстоянием по степенному закону, поэтому построим общую зависимость в виде взвешивания со степенной функцией:

$$rh(t, p) = \frac{1}{1 + \varphi(t, p)} rl(t, p) + \frac{\varphi(t, p)}{1 + \varphi(t, p)} rh(t, p), \quad (6)$$

$$\varphi(t, p) = (t - t_n(p))^n \theta(t - t_n(p)),$$

где параметры n и $t_n(p)$ определяются подбором для промежуточной области. В результате численного анализа получено

$$n = 8; \quad t_n(p) = 0,05 \cdot (1 + p). \quad (7)$$

Итоговый результат аппроксимации во всем диапазоне температур по уравнениям (2)-(7) показан на рис. 3.

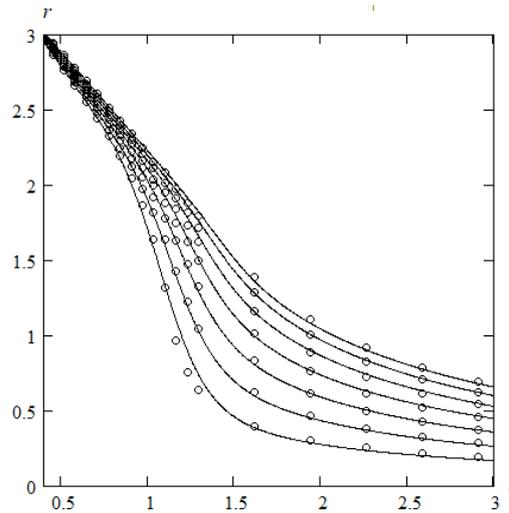


Рис. 3. Аппроксимация общей температурной зависимости плотности кислорода при давлениях, МПа (снизу вверх): 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40

Аналогичный анализ для плотности азота дает следующие формулы для параметров:

$$\begin{aligned}
 r_0 &= 3,701; & s(p) &= 0,02538 - 7,695 \cdot 10^{-4} p; & n &= 6; \\
 \beta(p) &= 1,8357 - 0,08113p + 2,05 \cdot 10^{-3} p^2; & t_{\text{н}}(p) &= 0,3 + 0,015p; & & (8) \\
 Z_0 &= 0,2477; & Z_1(p) &= \frac{0,06397}{\sqrt{p}} - 0,00609\sqrt{p}.
 \end{aligned}$$

Общий характер зависимости (8) такой же, как и для кислорода, за исключением вириального коэффициента Z_1 , но численные значения несколько отличаются. Идеально-газовое значение коэффициента Z_0 для азота составляет 0,29.

Как следует из рис. 3, аппроксимация несколько ухудшается при приближении давления к критическому значению, но это несущественно для систем, использующих закритические состояния.

Теплоемкость. Графики зависимости изобарной теплоемкости кислорода и азота $C_p(T, P)$ от температуры и давления представлены на рис. 4. Как следует из представленных зависимостей, теплоемкость в рассматриваемой области можно представить в виде суммы «регулярной» и «аномальной» теплоемкости, последняя характеризуется зависимостью в виде размытого пика в области критической температуры.

Регулярную часть теплоемкости будем описывать монотонной функцией с перегибом, соответствующей плавному переходу от жидкого к газообразному состоянию:

$$c_r = c_0 + \exp(-ac(p) - bc(p)t^4). \quad (9)$$

Аппроксимация для кислорода дает значения:

$$c_0 = 1,12; \quad ac(p) = 0,282 + 0,00551p; \quad bc(p) = 0,679 + 0,0911p. \quad (10)$$

Тогда для аномальной части теплоемкости будем иметь зависимости, представленные на рис. 4.

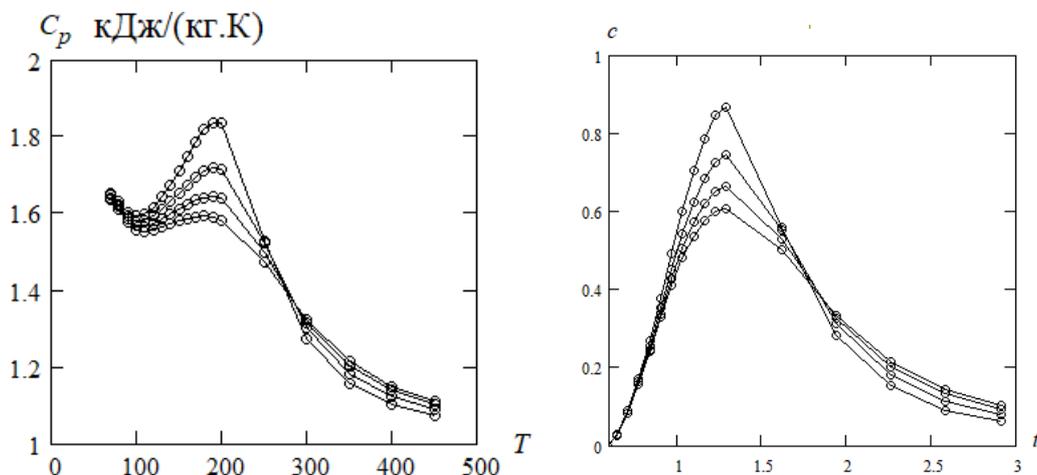


Рис. 4. Температурная зависимость изобарной теплоемкости кислорода (слева) и ее аномальной части (справа) при давлениях, МПа (снизу вверх справа): 25, 30, 35, 40

Эту зависимость будем моделировать двумя множителями, первый из которых описывает возрастающую правую часть графика, а второй – профиль пика:

$$c_a = \frac{(t - t_0)^2 \theta(t - t_0)}{\delta + (t - t_0)^2} \cdot \frac{A(p)\Delta(p)}{(t - t_m)^2 + \Delta^2(p)}. \quad (11)$$

В результате обработки экспериментальных данных для кислорода получено:

$$t_0 = 0,6; \quad t_m = 1,25; \quad \delta = 0,06; \quad \Delta(p) = 0,06 + 0,081p; \quad A(p) = 0,4 + 0,01p. \quad (12)$$

Результатирующая аппроксимация по (9)-(12) показана на рис. 5.

Аналогичным образом получена аппроксимация изобарной теплоемкости азота.

Теплопроводность. Графики зависимости изобарной теплопроводности кислорода и азота $\lambda(T, P)$ от температуры и давления представлены на рис. 6. Нетрудно заметить, что зависимости имеют характерный гиперболический вид. Это обстоятельство позволяет эффективно построить аппроксимирующую зависимость.

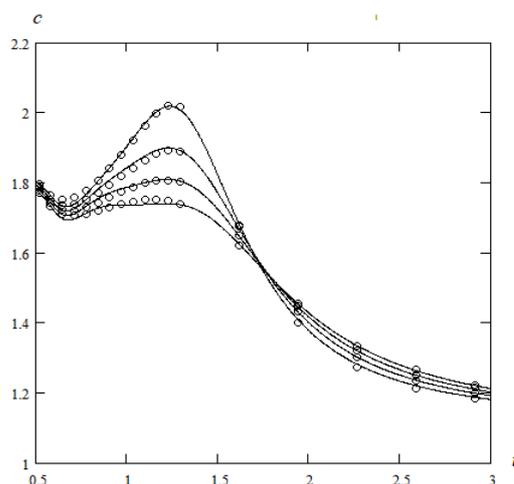


Рис. 5. Аппроксимация общей температурной зависимости изобарной теплоемкости кислорода при давлениях, МПа (снизу вверх справа): 25, 30, 35, 40

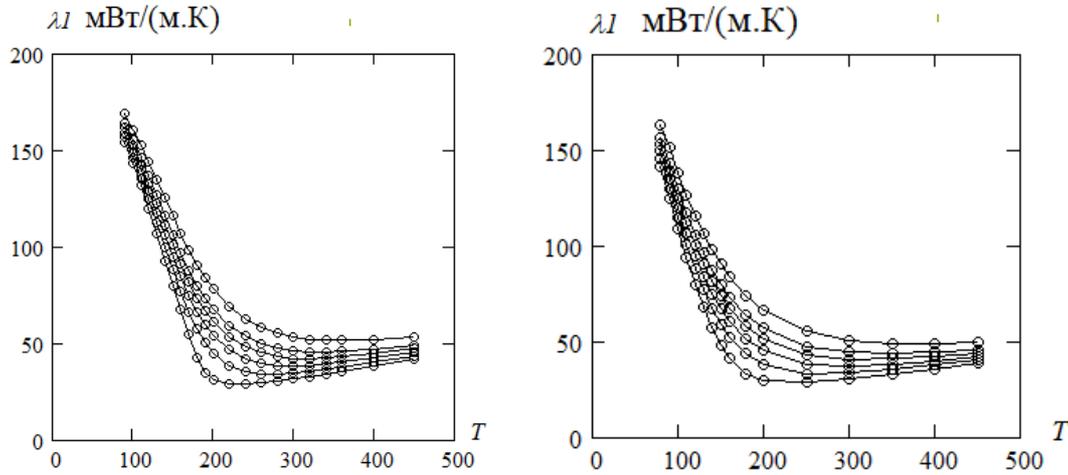


Рис. 6. Температурная зависимость теплопроводности кислорода (слева) и азота (справа) при давлениях, Мпа (снизу вверх): 10, 15, 20, 25, 30, 40

Температурную зависимость параметра будем строить в виде алгебраической функции общего вида:

$$F(x, y) \equiv \sum_{i,j=0}^n a_{i,j} x^i y^j = 0. \quad (13)$$

В общем случае такая зависимость не разрешается в явном виде, поэтому используем частный случай ее представления в виде комбинации гиперболических зависимостей. Отдельная гиперболическая зависимость представляется алгебраической функцией второго порядка вида

$$(y - y_0 - k_1(x - x_0))(y - y_0 - k_2(x - x_0)) = \varepsilon_1. \quad (14)$$

Здесь (y_0, x_0) – точка пересечения асимптот гипербол, (k_1, k_2) – угловые коэффициенты асимптот, ε_1 – параметр гиперболы. Пусть $y_1(x)$ – решение уравнения (14):

$$y_1(x) = \left(y_0 + \frac{k_1 + k_2}{2}(x - x_0) \right) \pm \sqrt{\left(\frac{k_1 - k_2}{2}(x - x_0) \right)^2 + \varepsilon_1}. \quad (15)$$

В этом выражении знак выбирается в соответствии с требуемой ветвью гиперболы. Подставив его в асимптоту другой зависимости вида (14), получим бигиперболическую зависимость

$$y_2(x) = \frac{b_0 + k_3x + y_1(x)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{b_0 + k_3x - y_1(x)}{2} \right)^2 + \varepsilon_2}, \quad (16)$$

где $y = b_0 + k_3x$ – третья асимптота зависимости (одна из асимптот у обеих гипербол совпадает), ε_2 – параметр второй гиперболы.

Зависимость (16) является алгебраической зависимостью четвертого порядка, а ее схематический вид представлен на рис. 7.

Данную процедуру можно продолжать необходимое число раз. Коэффициенты выбранной зависимости могут быть найдены из ее представления в виде (13) и применении к нему линейного метода наименьших квадратов.

Полученные при аппроксимации температурных зависимостей для разных давлений коэффициенты будут функциями давления, которые хорошо аппроксимируются полиномами (обычно достаточно квадратного трехчлена).

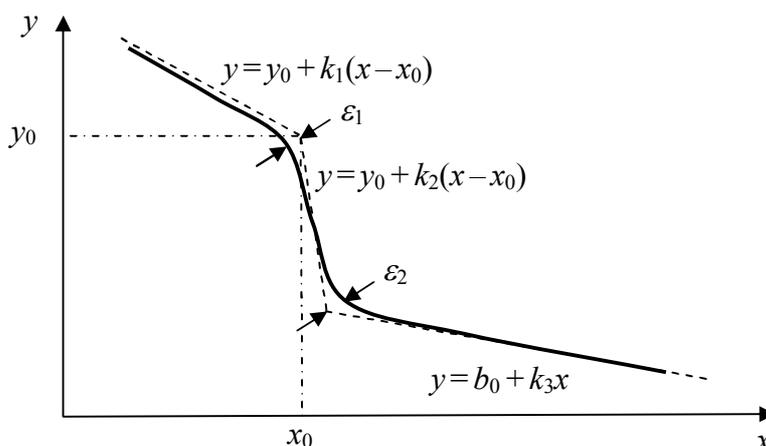


Рис. 7. Схематическое изображение бигиперболической зависимости

Температурные зависимости теплопроводности кислорода, представленные на рис. 6, имеют вид простой гиперболической зависимости (14), которая и была использована для их аппроксимации. Раскрывая скобки в выражении (14), запишем его в виде:

$$y^2 = c_1x^2 + c_2xy + c_3x + c_4y + c_5, \quad (17)$$

где обозначено

$$\begin{aligned} c_1 &= -k_1k_2, & c_2 &= k_1 + k_2, \\ c_3 &= 2k_1k_2x_0 - (k_1 + k_2)y_0, & c_4 &= 2y_0 - (k_1 + k_2)x_0, \\ c_5 &= \varepsilon_1 + (k_1 + k_2)x_0y_0 - k_1k_2x_0^2. \end{aligned} \quad (18)$$

Коэффициенты регрессионного уравнения (17) легко определяются методом множественной регрессии. Затем из первых двух соотношений в (18) решением квадратного уравнения находятся коэффициенты k_1, k_2 , после чего вторые два соотношения в (18) образуют линейную систему уравнений для определения x_0, y_0 , затем последнее соотношение в (18) выражает значение ε_1 .

Полученные значения параметров для различных давлений затем аппроксимируем полиномиальной зависимостью от давления. В итоге было получено уравнение аппроксимирующей зависимости для кислорода:

$$\lambda^*(t, p) = 5,21 - 3,42t + \sqrt{21,645 - 36,5t + 14,5t^2 + 0,658p + 0,013p^2}, \quad (19)$$

Здесь λ^* – нормированная теплопроводность кислорода.

Графики зависимости (19) в сравнении с экспериментальными данными представлены на рис. 8. Как следует из рис. 8, заметная ошибка аппроксимации появляется лишь при околоскритическом давлении 10 МПа.

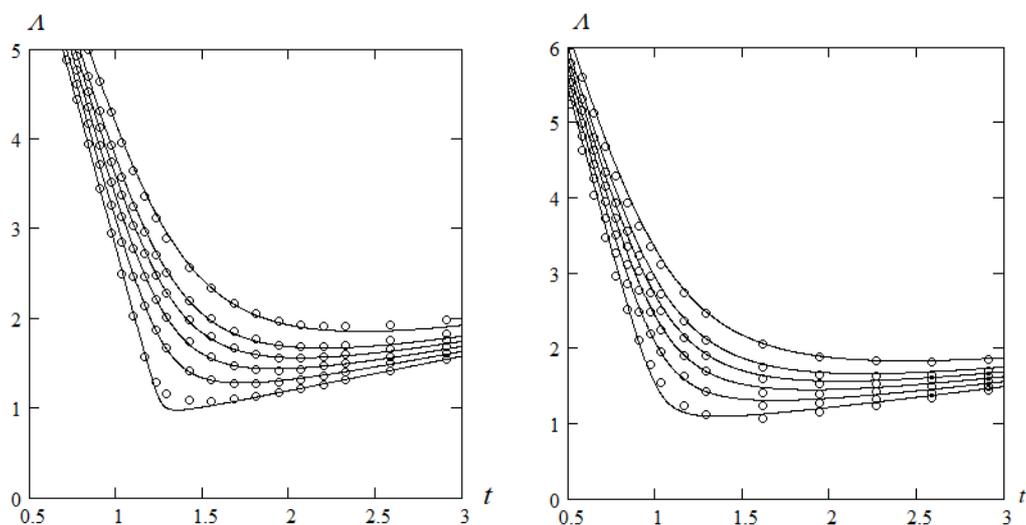


Рис. 8. Аппроксимация температурной зависимости изобарной теплопроводности кислорода (слева) и азота (справа) при давлениях, МПа (снизу вверх): 10, 15, 20, 25, 30, 40

Температурные зависимости теплопроводности азота, представленные на рис. 6, также имеют вид простой гиперболической зависимости и аппроксимируются по изложенной выше методике. В результате проведенных вычислений с оценкой значимости различных слагаемых была получена аппроксимация зависимость теплопроводности сверхкритического азота:

$$\lambda^*(t, p) = 5,21 - 4,27t - 0,0261p + \sqrt{20,2 + 0,71p - 42,75t + 0,331pt + 20,85t^2}. \quad (20)$$

Графики зависимости (20) в сравнении с экспериментальными данными представлены на рис. 8.

Динамическая вязкость. Графики зависимости динамической вязкости кислорода $\mu_1(T, P)$ от температуры и давления представлены на рис. 9.

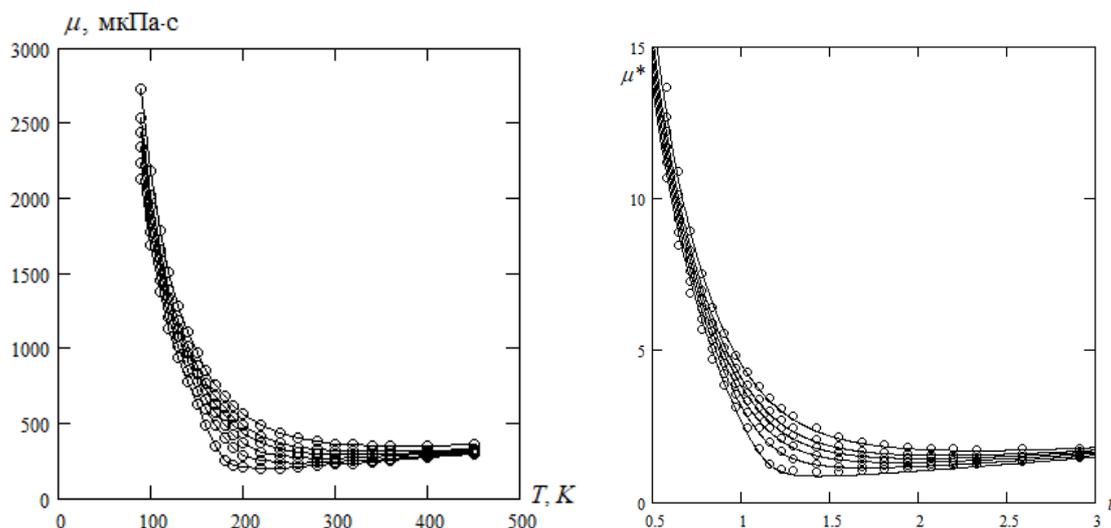


Рис. 9. Температурная зависимость динамической вязкости СКФ-кислорода (слева) и ее аппроксимация (справа) при давлениях, МПа (снизу вверх): 10, 15, 20, 25, 30, 40

Здесь видно, что зависимости имеют характерный бигиперболический вид. Тогда для нахождения коэффициентов применим зависимости (15), (16) и методику, использованную в предыдущем параметре.

Особенность данного случая состоит в том, что одна из асимптот является вертикальной, поэтому соотношение (14) модифицируется в виде:

$$y_1(x) = y_0 + k_1(x - x_0) + \frac{\varepsilon_1}{x - x_0}. \quad (21)$$

Соответственно зависимости (16) можно придать явный вид:

$$y_2(x) = \frac{1}{2} \left(b_0 + k_2x + y_0 + k_1(x - x_0) + \frac{\varepsilon_1}{x - x_0} \right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} \left(b_0 + k_2x - \left(y_0 + k_1(x - x_0) + \frac{\varepsilon_1}{x - x_0} \right) \right)^2} + \varepsilon_2. \quad (22)$$

Поскольку это уравнение содержит только два неизвестных угловых коэффициента, то для их определения из параметров линеаризованной модели опять получаем квадратное уравнение, остальные коэффициенты находятся из линейных уравнений. В результате, после отсева незначимых членов и упрощения формулы, получили зависимость нормированной динамической вязкости в виде:

$$\mu^*(t, p) = 0,87 + 0,14p - 2,59t - 0,084tp + \frac{3}{t - 0,083 - 0,0084p} + \sqrt{\left(0,803 + 0,0476p - 3,08t - 0,084tp + \frac{3}{t - 0,083 - 0,0084p} \right)^2} + 1,62p - 2,67. \quad (23)$$

Температурные графики зависимости (23) в сравнении с экспериментальными значениями приведены на рис. 9.

Аналогичным образом была получена аппроксимация зависимости динамической вязкости СКФ-азота от температуры и давления.

Энтальпия. Графики зависимости удельной энтальпии $h(T, P)$ кислорода от температуры и давления представлены на рис. 10. Зависимость для азота имеет полностью аналогичный вид.

Представленные зависимости также могут быть аппроксимированы бигиперболической зависимостью, но уже общего вида (16), (17):

$$h^*(t, p) = 0,9415t - 0,0325 + 0,064p + 0,00195tp + 0,3\sqrt{(t-1)^2 + 0,033} + \sqrt{\left(0,7825 - 0,4585t - 0,064p + 0,00195tp - 0,3\sqrt{(t-1)^2 + 0,033} \right)^2} + 0,059p - 0,084. \quad (24)$$

Графики температурной зависимости (24) в сравнении с опытными данными представлены на рис. 10.

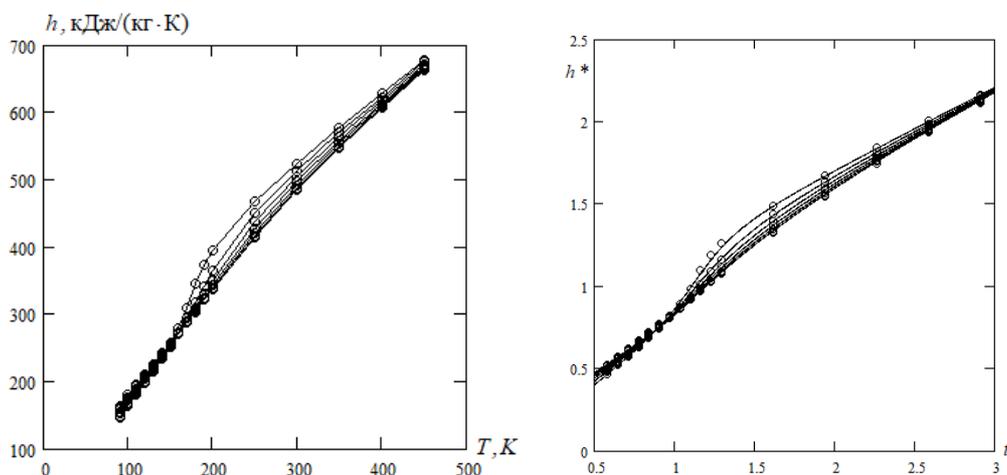


Рис. 10. Температурная зависимость удельной энтальпии СКФ- кислорода (слева) и ее аппроксимация (справа) при давлениях, МПа (снизу вверх справа): 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40

Аналогичным образом получена аппроксимация зависимости удельной энтальпии СКФ-азота от температуры и давления.

Литература

1. Кутателадзе С. С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление: Справочное пособие. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 367 с.
2. Петухов Б. С., Генин Л. Г., Ковалев С. А. Теплообмен в ядерных энергетических установках. – М.: Атомиздат, 1974. – 408 с.
3. ГСССД 89-85. Азот. Коэффициенты динамической вязкости и теплопроводности при температурах 65...1000 К и давлениях от состояния разреженного газа до 200 МПа: Таблицы стандартных справочных данных. – М.: Изд-во стандартов, 1986. – 21 с.
4. ГСССД 93-86. Кислород. Коэффициенты динамической вязкости и теплопроводности при температурах 70...500 К и давлениях от соответствующих разреженному газу до 100 МПа: Таблицы стандартных справочных данных. – М.: Изд-во стандартов, 1986. – 16 с.
5. ГСССД 4-78. Плотность, энтальпия, энтропия и изобарная теплоёмкость жидкого и газообразного азота при температурах 70-1500 К и давлениях 0,1-100 МПа: Таблицы стандартных справочных данных. – М.: Изд-во стандартов, 1978. – 12 с.
6. ГСССД 1981. Кислород жидкий и газообразный. Плотность, энтальпия, энтропия и изобарная теплоёмкость при температурах 70-500 К и давлениях 0,1-100 МПа: Таблицы стандартных справочных данных. – М.: Изд-во стандартов, 1982. – 11 с.

APPROXIMATION OF THERMOPHYSICAL PARAMETERS OF SUPERCRITICAL NITROGEN AND OXYGEN

S. V. Borodkin¹, I. L. Bataronov², A. V. Ivanov¹

¹Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

²Voronezh State Technical University

Methods of physical and bihyperbolic approximation have been developed for the analytical dependences of the thermophysical characteristics of a substance in the supercritical state. The equations for density and heat capacity are constructed by the method of physical approximation. The hyperbolic approximation method is used for dynamic viscosity, thermal conductivity, and enthalpy. The good quality of the approximations obtained in the over-critical region of the state is shown.

Keywords: approximation, algebraic curves, thermophysical characteristics, supercritical state.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ПОТОКЕ ЗАКРИТИЧЕСКИХ АЗОТА И КИСЛОРОДА В ТРУБЕ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

С. В. Бородкин¹, И. Л. Батаронов², А. В. Иванов¹, В. И. Ряжских²

¹Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия им. профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж

²Воронежский государственный технический университет
borodkinstanislav@yandex.ru

Методом конечных элементов проведен вычислительный эксперимент по определению полей температуры и скорости в сверхкритическом турбулентном потоке кислорода и азота. Теплообмен с внешней средой моделировался по уравнению Ньютона-Рихмана с постоянным коэффициентом теплоотдачи. Найдены распределения вдоль потока среднемаассовой температуры, температуры стенки, линейной плотности потока тепла через стенку. На основании этих данных рассчитаны локальные коэффициент теплоотдачи и число Нуссельта. Построены критериальные уравнения для локального критерия Нуссельта в азоте и кислороде в закритической области.

Ключевые слова: моделирование, турбулентный теплообмен, критериальное уравнение, коэффициент теплоотдачи.

Введение

Для решения инженерных задач по расчету теплопередачи необходимо использование выражений для коэффициентов теплоотдачи между компонентами системы [1-3]. Для обычных жидкостей и газов получены универсальные зависимости для вычисления этого коэффициента [1, 3], тогда как для сверхкритических флюидов (СКФ) имеется большое число теоретических и экспериментальных исследований, дающих весьма разнообразные результаты для числа Нуссельта [3-5] в зависимости от типа вещества и условий эксперимента. Поэтому считается [3], что число Нуссельта для СКФ должно определяться в каждом конкретном случае индивидуально.

1. Постановка задачи турбулентного теплообмена в сверхкритическом флюиде

Для расчета сопряженного теплообмена в турбулентном течении в настоящее время наиболее широко применяются $k-\varepsilon$ модели турбулентности [6, 7], основанные на осредненных по Рейнольдсу уравнениях переноса (RANS), в том числе и для СКФ [8, 9].

Для упрощения вычислительной задачи будем пренебрегать гравитационными эффектами и закручиванием потока в змеевике. Учет этих эффектов может быть осуществлен соответствующими поправочными множителями [1, 3]. Тогда задача становится аксиально-симметричной и уравнения $k-\varepsilon$ модели турбулентного переноса принимают вид:

– уравнение переноса импульса

$$\begin{aligned} \rho \left(v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial r} + 2r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu + \mu_T}{r} \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \right] - \\ &- \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu + \mu_T) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (rv_r)}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} (\rho k) = 0, \\ \rho \left(v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial z} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu + \mu_T}{r} \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \right) + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_T) \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] - \\ &- \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left[(\mu + \mu_T) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (rv_r)}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} (\rho k) = 0, \end{aligned} \quad (1.1)$$

– уравнение переноса массы

$$\frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v_r) = 0, \quad (1.2)$$

– уравнение переноса энергии

$$\rho c_p v_z \frac{\partial T}{\partial z} + \rho c_p v_r \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda^* \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda^* \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Q_{vh} + W_P, \quad (1.3)$$

– уравнение переноса кинетической энергии турбулентности

$$\rho v_z \frac{\partial k}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial k}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial T}{\partial r} \right] + P_k + \rho \varepsilon, \quad (1.4)$$

– уравнение переноса диссипации турбулентности

$$\rho v_z \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} + \rho v_r \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 1} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (1.5)$$

Здесь P_k – скорость производства турбулентной кинетической энергии, μ_T – турбулентная вязкость:

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon},$$

где C , σ – эмпирические константы,

$$P_k = \mu_T \left[2 \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (rv_r)}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right].$$

Использование аксиально-симметричной формулировки позволяет существенно снизить численную размерность задачи, что является важным для проведения расчета в длинной тонкой трубке.

В качестве констант модели использованы апробированные по многочисленным тестовым расчетам значения [6, 7]:

$$C_{\varepsilon 1} = 1,44, C_{\varepsilon 2} = 1,92, C_{\mu} = 0,09, \sigma_k = 1,0, \sigma_{\varepsilon} = 1,3, K_v = 0,41, B = 5,2.$$

Областью решения задачи являлось продольное сечение трубки радиуса $R_1 = 5$ мм и длиной $L_1 = 4$ м. Для исключения влияния граничных эффектов на входе и выходе трубки на концах были добавлены буферные области длиной 20 мм с условием теплоизолированности поверхности трубки (рис. 1).

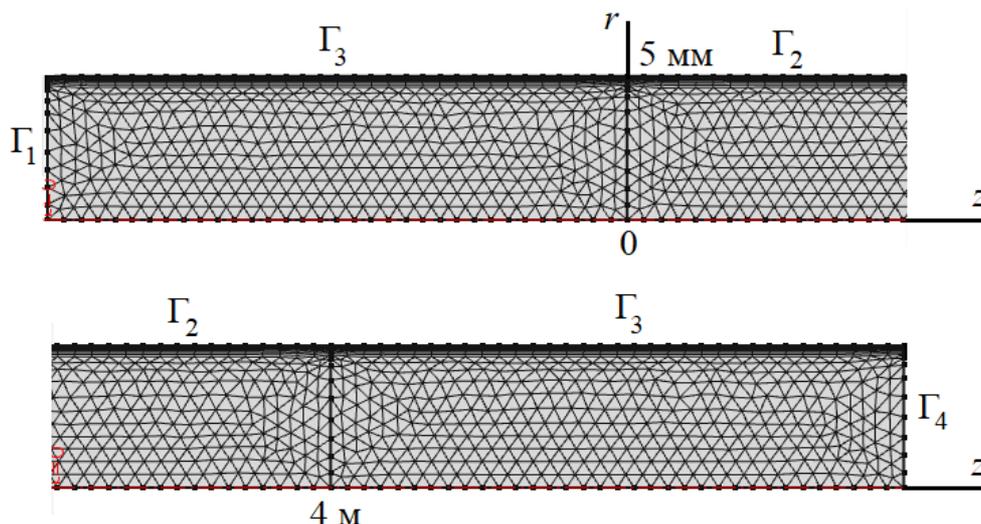


Рис. 1. Входной и выходной концы области решения задачи

В соответствии с выбранной геометрией были заданы следующие граничные условия на линиях Γ_i (рис. 1):

1) на линии Γ_1 входного потока СКФ:

– однородное распределение температуры

$$T(r) = T_{in}, \quad (1.6)$$

– автомодельное распределение скорости турбулентного потока:

$$v_r(r) = 0, \quad v_z(r) = V_0 \sqrt{1 - \left(\frac{r}{R_1}\right)^2}, \quad (1.7)$$

в котором значение нормировочного множителя V_0 определялось условием непрерывности потока:

$$2\pi\rho(T_{in}) \int_0^{R_1} v_r r dr = M_1,$$

откуда получено

$$V_0 = \frac{n}{n-1} \frac{m_1}{\rho(T_{in})}.$$

В расчетах использовано значение $n = 7$.

Использование автомодельного профиля (1.7) позволяет сократить размер входной буферной зоны, необходимой для релаксации входных распределений переменных.

– входное распределение плотности турбулентной энергии и скорости диссипации турбулентной энергии, выраженные через масштаб длины турбулентности L_T и интенсивности турбулентности l_T :

$$k(r) = \frac{3}{2} (l_T v_z(r))^2, \quad \varepsilon(r) = C_\mu^{3/4} \frac{(k(r))^2}{L_T}, \quad (1.8)$$

использованы значения $l_T = 0,05$, $L_T = 0,01$ м.

2) на линии Γ_4 выходного потока СКФ:

– отсутствие кондуктивного переноса тепла:

$$\lambda^* \frac{\partial T}{\partial z}(r) = 0, \quad (1.9)$$

– однородное распределение давления:

$$p(r) = P_{out}, \quad (1.10)$$

– отсутствие вязких напряжений на линии Γ_4 :

$$2(\mu + \mu_T) \left[\frac{\partial v_z}{\partial z} \right] - \frac{2}{3} (\mu + \mu_T) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(rv_r)}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \rho k = 0, \quad (1.11)$$

$$\left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) = 0,$$

– отсутствие кондуктивного переноса турбулентной энергии и диссипации турбулентной энергии:

$$\frac{\partial k}{\partial z}(r) = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial z}(r) = 0. \quad (1.12)$$

Точные условия на выходе из зоны теплообмена заранее неизвестны, поэтому обычно вводится буферная зона без теплообмена с теплоносителем такой длины, чтобы на выходе из нее поток можно считать стабилизированным, то есть таким, для которого выполняются условия (1.9)–(1.12). Тогда на реальной границе выхода из зоны теплообмена автоматически будут получаться естественные граничные условия. Длина требуемой буферной зоны определяется подбором в вычислительном эксперименте.

3) на линии Γ_2 теплообмена с теплоносителем используется условие Ньютона-Рихмана с заданным коэффициентом теплоотдачи α :

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r}(z) = \alpha \cdot (T_w - T(z)). \quad (1.13)$$

Обычно теоретический расчет конвективной теплоотдачи производится для одного из двух режимов: постоянного теплового потока через стенку и постоянной температуры стенки. Однако в реальном техническом устройстве ни одно из этих условий не выполняется, и физические условия теплообмена более близки к общему условию баланса тепла (1.13). Для практических целей доста-

точно исследовать задачу с постоянным по длине коэффициентом теплоотдачи, который, тем самым, становится дополнительным варьируемым параметром модели.

4) на линиях Γ_3 буферных зон применяется условие тепловой изоляции:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r}(z) = 0, \quad (1.14)$$

для обеспечения стабилизации входного и выходного потоков СКФ.

5) на линиях Γ_2, Γ_3 стенки трубки для корректного описания гидродинамического течения использованы пристеночные функции с условиями сшивки:

$$\begin{aligned} v_r(z) &= 0, \\ 2(\mu + \mu_T) \left[\frac{\partial v_r}{\partial r} \right] - \frac{2}{3}(\mu + \mu_T) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(rv_r)}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \rho k &= 0, \\ (\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) &= -\rho \frac{u_\tau}{\delta_w^+} v_z, \quad \frac{\partial k}{\partial r} = 0, \quad \varepsilon = \rho \frac{C_\mu k^2}{\kappa_v \delta_w^+ \eta}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

где δ_w^+, u_τ – параметры пристеночных функций.

Начальное распределение зависимых переменных, влияющее на скорость сходимости и устойчивость расчета, задавалось в виде, согласованном с граничными условиями (1.6), (1.7), (1.10):

$$v_r(r, z) = 0, \quad v_z(r, z) = V_0 \sqrt{1 - \left(\frac{r}{R_1} \right)^2}, \quad T(r, z) = T_{in}, \quad p(r, z) = P_{out}. \quad (1.16)$$

Функции температурной зависимости теплофизических параметров использовались в виде специально построенных аппроксимаций.

Для корректного решения задачи вблизи стенки использовалась приграничная сетка, составленная из 8 слоев тонких прямоугольных элементов с уменьшающейся толщиной, формируемой в автоматическом режиме (рис. 1). Остальная область решения покрывалась треугольными элементами с максимальным размером 0,5 мм.

Построенная сетка содержала около 200000 конечных элементов, число степеней свободы – около 820000, время решения одной задачи на 6-ядерном процессоре с частотой 3,6 ГГц составило 25 мин.

2. Вычислительный эксперимент по расчету теплоотдачи в одномерном потоке СКФ-кислорода

Вычислительный эксперимент проводился для следующих значений параметров, покрывающих рабочие режимы функционирования газификаторов:

- Давление P_{out} 20, 30, 40 МПа.
- Расход СКФ 0,03, 0,06 и 0,12 кг/с.
- Коэффициент теплоотдачи 500, 1000, 2000 Вт/(м²К).

- Входная температура $T_{in} = 90$ К.
- Температура теплоносителя $T_w = 333$ К.

В литературе используются следующие одномерные температурные характеристики потока:

- температура на оси потока

$$T_0(z) = T(0, z), \quad (2.1)$$

- средняя температура потока

$$T_m(z) = \frac{2}{R_1^2} \int_0^{R_1} T(r, z) r dr, \quad (2.2)$$

- среднерасходная температура потока

$$T_v(z) = \frac{2}{\bar{v} R_1^2} \int_0^{R_1} T(r, z) v_z(r, z) r dr, \quad \bar{v} = \frac{2}{R_1^2} \int_0^{R_1} v_z(r, z) r dr, \quad (2.3)$$

- среднемассовая температура потока

$$T_\rho(z) = \frac{2\pi}{M_1} \int_0^{R_1} T(r, z) v_z(r, z) \rho(r, z) r dr, \quad (2.4)$$

– среднемассовая температура, вычисляемая по среднемассовой энтальпии потока:

$$h_T(T_h(z)) = \frac{2\pi}{M_1} \int_0^{R_1} h(r, z) v_z(r, z) \rho(r, z) r dr, \quad (2.5)$$

где $h_T(T)$ – термодинамическая зависимость удельной энтальпии от температуры при постоянном давлении.

Типичное распределение температуры T_0 вдоль потока показано на рис. 2, из которого видно, что длина участка тепловой стабилизации составляет около 30 см. Поэтому в дальнейшем в качестве расчетной длины по осевой координате выбран промежуток 0,5÷3,9 м.

На рис. 3-4 показано распределение теплофизических свойств – плотности и удельной теплоемкости – по сечению потока в псевдокритической области и за ее пределами. Вне этой области распределение свойств практически однородно, поэтому все температурные меры (2.1-2.5) практически совпадают. Однако в пределах данной области это не так. Неоднородность распределения свойств оказывает влияние не только на температуру, но и на гидродинамическую задачу, в результате чего распределение скорости приобретает максимум на половине расстояния от поверхности. Одновременно это сказывается на распределении различных температурных мер, показанное на рис. 5, что приводит к существенному различию температур (2.1-2.5), также приведенных на рис. 5. Близость среднемассовой и среднерасходной по энтальпии температур на рис. 5 обусловлено тем, что в выбранном сечении распределение теплоемкости имеет размытый максимум (рис. 4, 157 К), в результате чего ее неоднородность слабо

сказывается на среднем значении температуры. Однако в другом сечении (рис. 4, 189 К) распределение теплоемкости резко неоднородно, и различие указанных температур становится существенным.

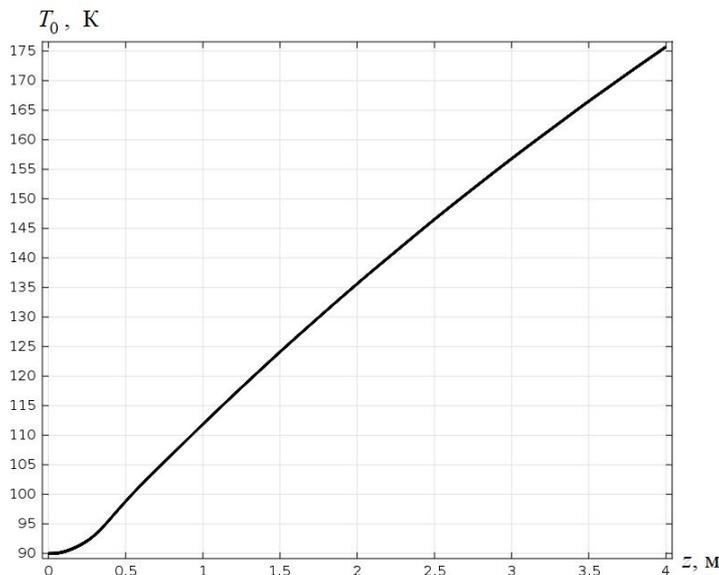


Рис. 2. Распределение температуры вдоль оси потока

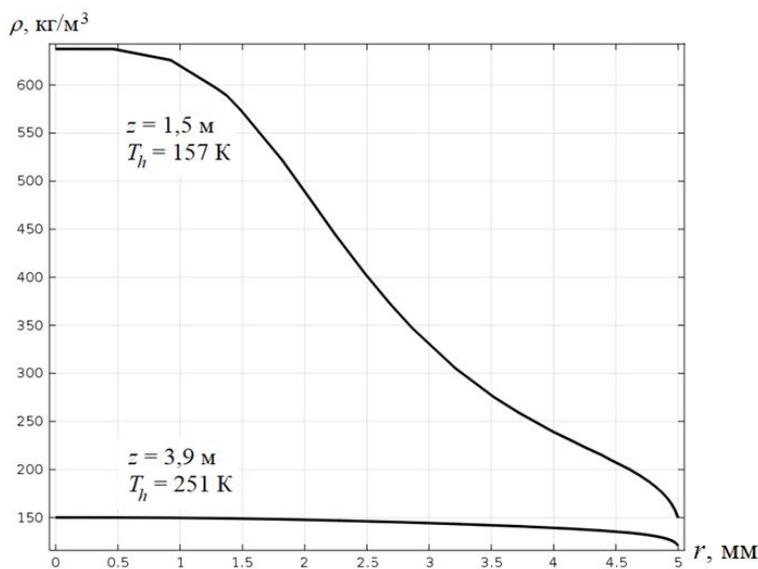


Рис. 3. Распределение плотности СКФ в двух сечениях потока

Расчет среднemasсовой температуры производился на основе интегрального уравнения баланса энергии:

$$\Delta h(z) = \frac{\pi D_t \alpha}{M_1} \int_0^z (T_w - T_{ct}(z')) dz'. \quad (2.6)$$

Затем по аппроксимирующей формуле рассчитывалась среднemasсовая температура:

$$T(z) = T_h(\Delta h(z)). \quad (2.7)$$

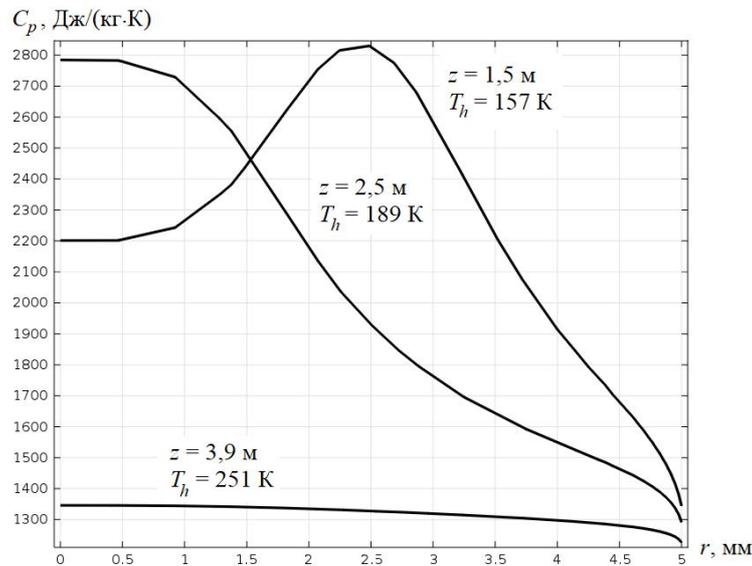


Рис. 4. Распределение удельной теплоемкости СКФ в трех сечениях потока

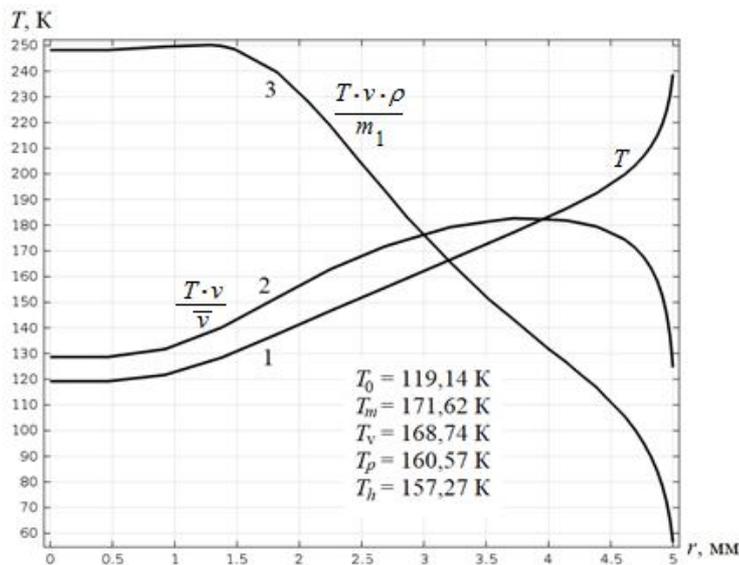


Рис. 5. Распределение различных видов температурных мер: 1 – локальная температура, 2 – расходная температура, 3 – массовая температура, и соответствующие им средние значения

Также контрольный расчет среднемассовой температуры производился путем вычисления приращения среднемассовой удельной энтальпии в заданном сечении потока по отношению к значению на входе в зону теплообмена по формуле:

$$\Delta h_i = \frac{2\pi}{M_1} \int_0^{R_i} (\rho v_x h) \Big|_{z=z_i} r dr - h_0. \quad (2.8)$$

Затем по формуле (2.7) рассчитывалось значение температуры T_i , соответствующее величине (2.8).

В пределах ошибки вычислительного эксперимента и погрешности физической модели оба рассчитанных значения объемной температуры совпадали между собой с точностью до величины вязкой диссипации, которая в данном

эксперименте была незначительна. Это также обосновывает пренебрежение вязкой диссипацией при определении объемной температуры, обычно используемое при моделировании SCF-потока [3, 8, 9].

С использованием соотношений (2.6), (2.7), из решения задачи для заданного набора значений параметров M_1 , α , P_{out} были рассчитаны распределения среднемассовой температуры T по длине потока, выборочно представленные на рис. 6-9 вместе с температурой стенки. Для каждого набора параметров эти температуры представлены кривыми одного типа: нижняя кривая – среднемассовая температура, верхняя кривая – температура стенки.

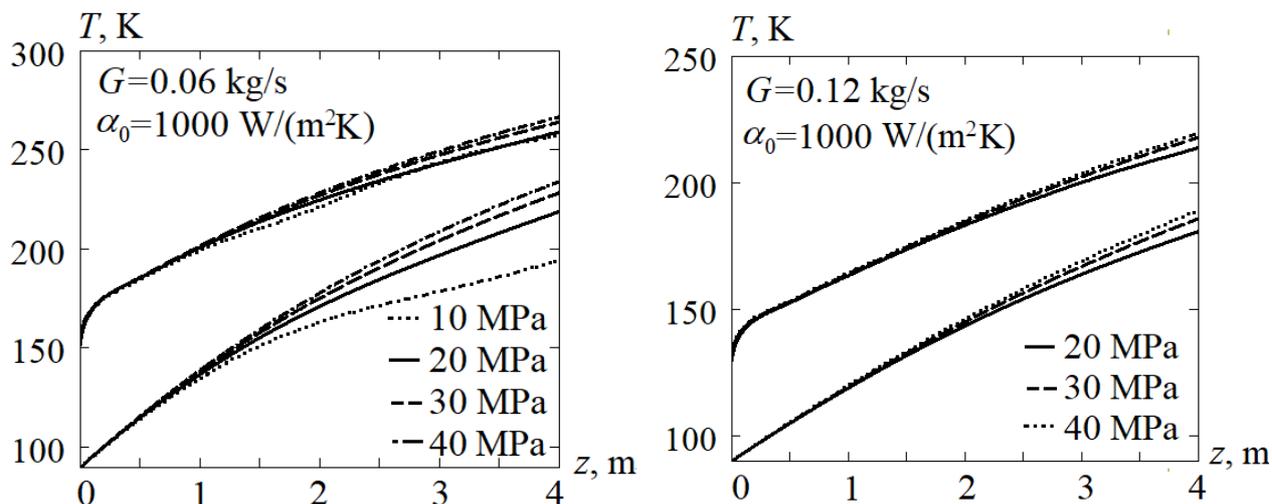


Рис. 6. Зависимость распределения среднемассовой температуры (нижние кривые) и температуры стенки (верхние кривые) от рабочего давления СКФ-кислорода при различном расходе $G = M_1$

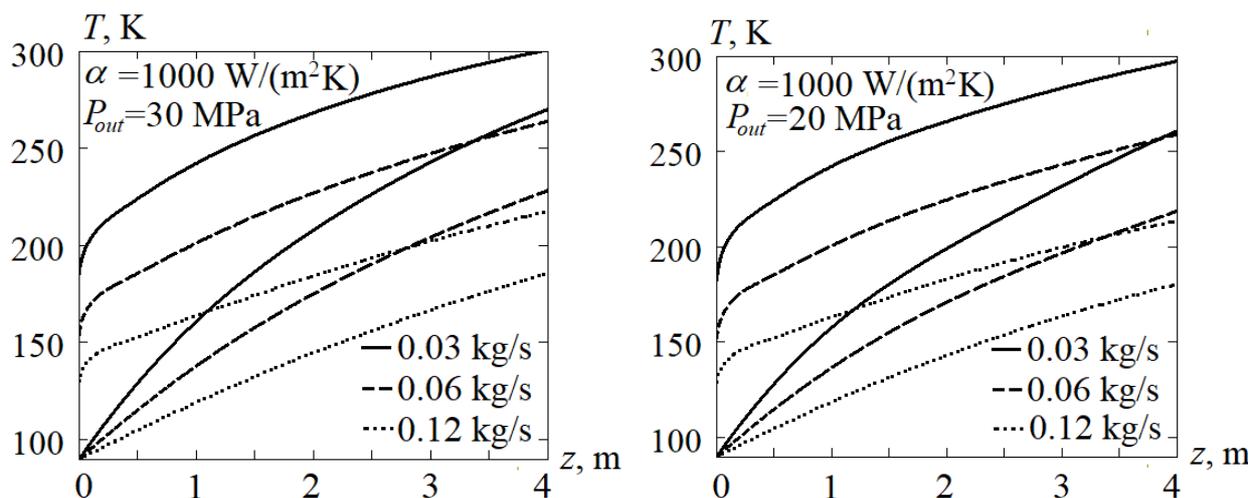


Рис. 7. Зависимость распределения среднемассовой температуры (нижние кривые) и температуры стенки (верхние кривые) от массового расхода СКФ-кислорода при различном давлении

Для сравнения также был произведен расчет с давлением $P_{out} = 10$ МПа из околокритической области, результат которого представлен на рис. 6 точечной линией. Как видно, в этой области наблюдается существенное снижение интенсивности теплообмена и значительное нарастание температурного фактора.

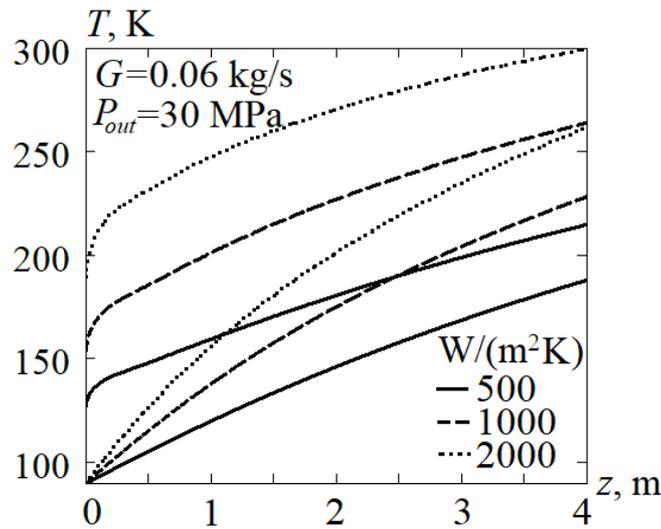


Рис. 8. Зависимость распределения среднемассовой температуры кислорода (нижние кривые) и температуры стенки (верхние кривые) от коэффициента теплоотдачи

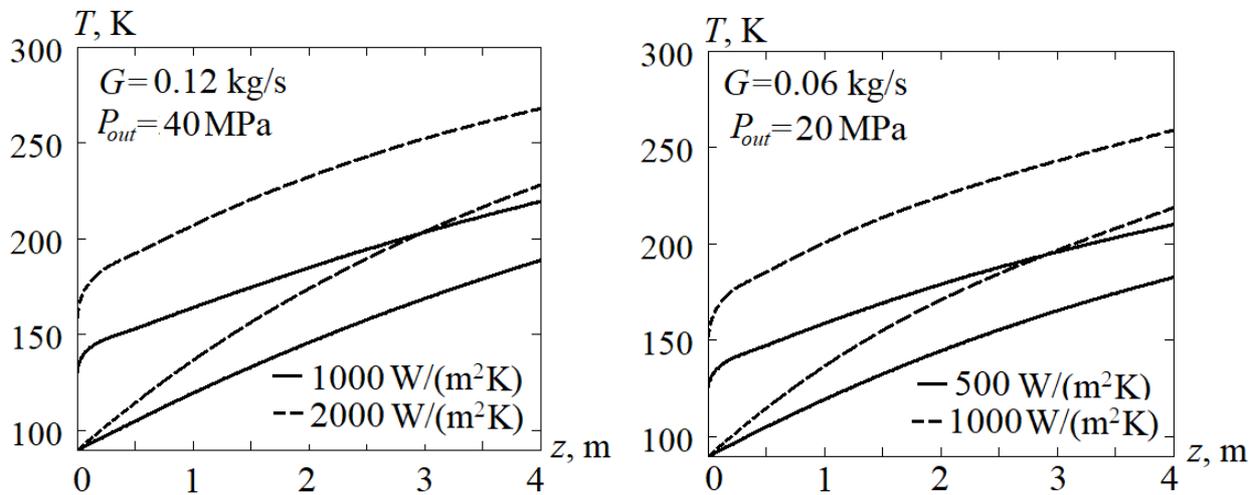


Рис. 9. Зависимость распределения среднемассовой температуры (нижние кривые) и температуры стенки (верхние кривые) от коэффициента теплоотдачи при различном массовом расходе и давлении СКФ-кислорода

Как видно из рис. 6-9, изменение давления СКФ незначительно влияет на разницу между среднемассовой температурой и температурой стенки, а также на характер изменения этих температур вдоль трубки. Однако увеличение коэффициента теплоотдачи приводит к значительному изменению температурного профиля и росту выходной температуры. В свою очередь изменение массового расхода СКФ имеет схожий, но обратный характер влияния на температурный профиль.

3. Аппроксимация коэффициента теплоотдачи СКФ-кислорода

Для расчета локального коэффициента теплоотдачи использовалась плотность теплового потока, определяемая граничным условием (1.13):

$$q(z) = \alpha (T_w - T_{ct}(z)). \quad (3.1)$$

Затем локальный коэффициент теплоотдачи в СКФ, соответствующий температуре $T(z)$, определялся как

$$\alpha_1(z) = \frac{q(z)}{T_{\text{ст}}(z) - T(z)} = \alpha \frac{T_w - T_{\text{ст}}(z)}{T_{\text{ст}}(z) - T(z)}. \quad (3.2)$$

Отметим, что здесь коэффициент теплоотдачи определяется относительно среднемассовой температуры, поэтому, вообще говоря, может не совпадать со значениями, находимыми из других критериальных уравнений. Также коэффициент теплоотдачи непосредственно рассчитывается по среднемассовой температуре и температуре стенки, полученных в предыдущем разделе.

Локальное число Нуссельта определялось на основании значения (3.2) по формуле

$$\text{Nu}_1 = \frac{D_t \alpha_1}{\lambda_1(T)}. \quad (3.3)$$

Это значение также определялось для коэффициента теплопроводности, взятого при среднемассовой температуре.

В результате для каждой комбинации параметров найдена таблица $(\text{Nu}_{1,i}, T_i, T_{\text{ст},i}, P_j, \alpha_k)$ зависимости числа Нуссельта от температур потока СКФ и стенки трубки, давления СКФ и коэффициента теплоотдачи в теплоносителе.

Некоторые результаты расчетов по формулам (3.1-3.3) представлены на рис. 10-12.

Проведено также сравнение с расчетом теплоотдачи в околокритической области (рис. 10). Как видно из сравнения, выход в околокритическую область приводит к значительному немонотонному снижению коэффициента теплоотдачи. Поэтому режим работы криогенной системы следует выбирать таким образом, чтобы рабочая зона оставалась в закритической области давлений.

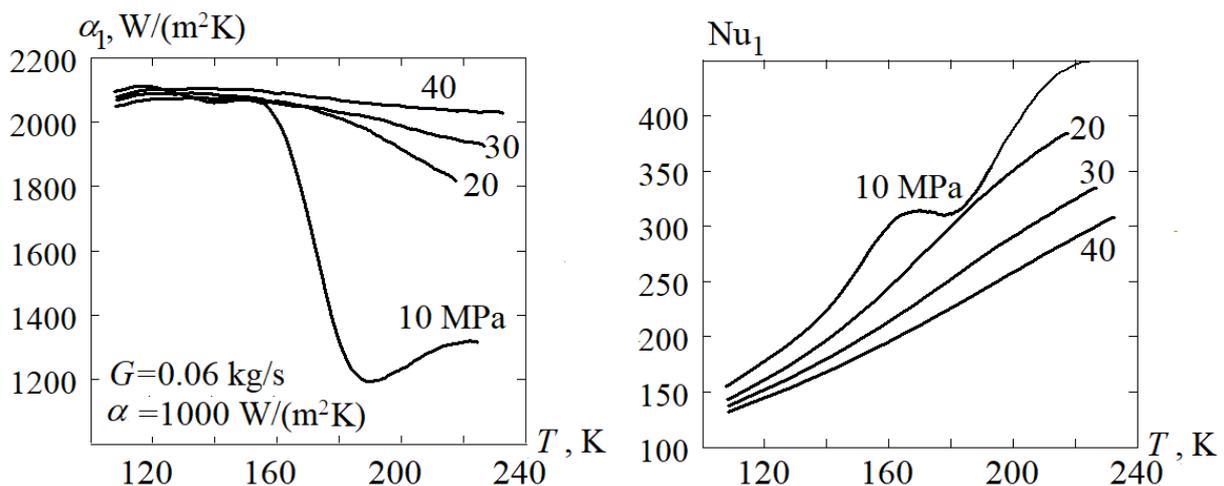


Рис. 10. Температурная зависимость коэффициента теплоотдачи и числа Нуссельта в СКФ-кислорода при закритическом давлении СКФ и сравнение с данными для околокритического давления (10 МПа)

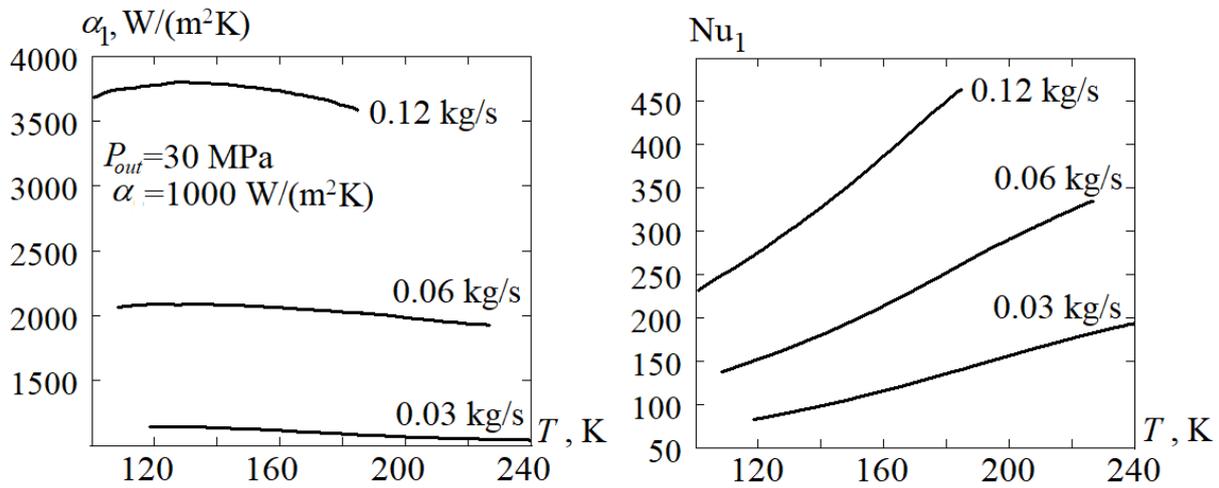


Рис. 11. Температурная зависимость коэффициента теплоотдачи и числа Нуссельта в СКФ-кислорода при различном массовом расходе СКФ

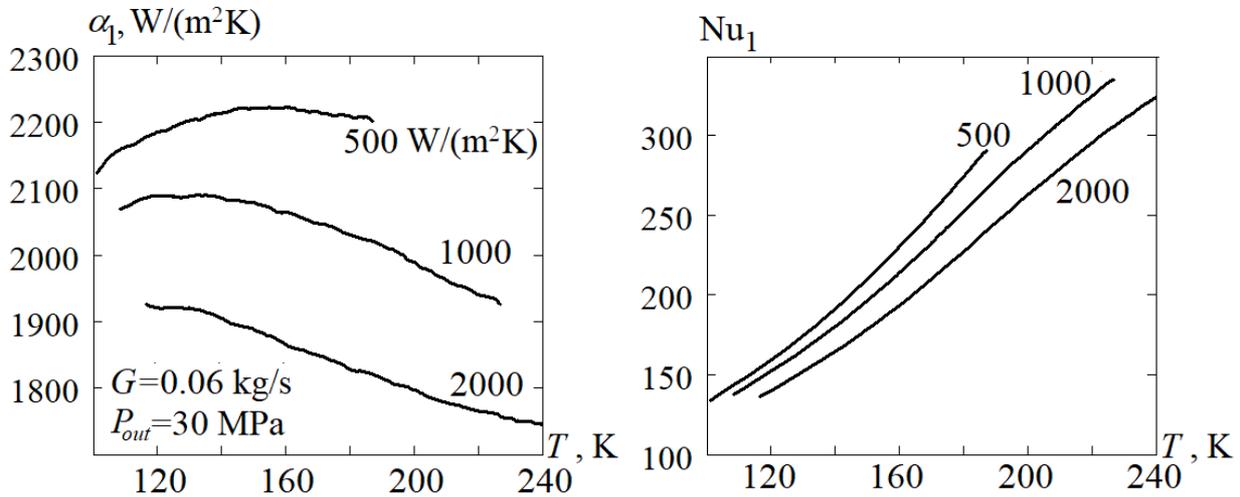


Рис. 12. Температурная зависимость коэффициента теплоотдачи и числа Нуссельта в СКФ-кислорода при различном коэффициенте α

Для получения критериального уравнения была использована мультипликативная модель, в которую были включены все обычно используемые факторы:

$$\text{Nu}(T, P) = a_0 \text{Pr}^{a_1} \text{Re}^{a_2} \left(\frac{\mu_1}{\mu_{1,\text{ст}}} \right)^{a_3} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_{1,\text{ст}}} \right)^{a_4} \left(\frac{c_P}{c_{P,\text{ст}}} \right)^{a_5} \left(\frac{\rho_1}{\rho_{1,\text{ст}}} \right)^{a_6} \left(\frac{\bar{c}_P}{c_P} \right)^{a_7} \left(\frac{D_t \alpha}{\lambda_1} \right)^{a_8} \overline{\text{Pr}}^{a_9}, \quad (3.4)$$

где $\bar{c}_P = \frac{h_{\text{ст}} - h}{T_{\text{ст}} - T}$ – средняя интегральная теплоемкость СКФ, $\overline{\text{Pr}} = \frac{\mu_1 \bar{c}_P}{\lambda_1}$ – сред-

нее по теплоемкости число Прандтля, часто используемое [8] при построении критериального уравнения для СКФ.

Коэффициенты a_i находились регрессионным анализом линеаризованной модели, полученной логарифмированием равенства (3.4). Анализ показал, что коэффициенты a_1 и a_9 сильно коррелированы, причем коэффициент a_1 обладает меньшей значимостью в модели. Также коэффициенты a_3 , a_4 и a_8 оказались

существенно незначимыми. В результате отсеивания этих коэффициентов модель сократилась до вида

$$\text{Nu}(T, P) = a_0 \overline{\text{Pr}}^{a_1} \text{Re}^{a_2} \left(\frac{\rho}{\rho_{\text{ст}}} \right)^{a_3} \left(\frac{\bar{c}_P}{c_P} \right)^{a_4} \left(\frac{c_P}{c_{P,\text{ст}}} \right)^{a_5}. \quad (3.5)$$

В данной модели все коэффициенты показали высокий уровень значимости, относительная ошибка определения натуральных (не логарифмированных) значений числа Нуссельта составила: максимальное значение 3%, среднее значение 1%. Окончательное полученное выражение числа Нуссельта для СКФ-кислорода имеет вид:

$$\text{Nu}(T, P) = 0.0292 \overline{\text{Pr}}^{-0.542} \text{Re}^{0.773} \left(\frac{\rho_{1,\text{ст}}}{\rho_1} \right)^{0.464} \left(\frac{\bar{c}_P}{c_P} \right)^{0.663} \left(\frac{c_P}{c_{P,\text{ст}}} \right)^{0.357}. \quad (3.6)$$

Корреляция полученных в вычислительном эксперименте и рассчитанных по формуле (3.6) значений числа Нуссельта показана на рис. 13.

Как видно, полученные данные показывают очень хорошую корреляцию с уравнением (3.6).

Отметим, что в высокотемпературном пределе последние три сомножителя в левой части равенства (3.6) стремятся к единице, а $\overline{\text{Pr}} \rightarrow \text{Pr}$, в результате уравнение (3.6) показывает хорошее согласие с классической формулой Диттуса-Болтера, что важно для расчетов в широкой области температур. Это также подтверждает достоверность формулы (3.6). Отличие в числовом коэффициенте связано с тем, что для рассматриваемых чисел Рейнольдса сама формула Диттуса-Болтера неточна, а также наша формула построена для диапазона высоких давлений.

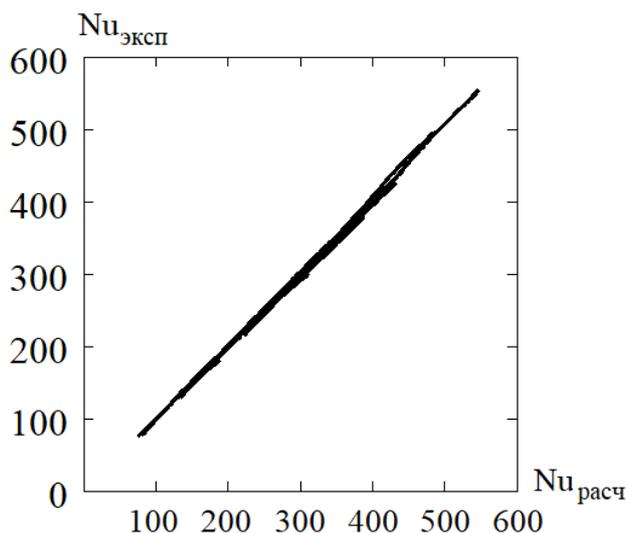


Рис. 13. Сравнение чисел Нуссельта для СКФ-кислорода, полученных в вычислительном эксперименте и по формуле (3.6)

4. Вычислительный эксперимент и аппроксимация коэффициента теплоотдачи СКФ-азота

Вторая серия расчетов проводилась для СКФ-азота при том же наборе параметров, что и для кислорода. Результаты обработки вычислительного эксперимента по формулам (2.6-2.8) показали, что влияние давления, массового расхода СКФ и коэффициента теплоотдачи для СКФ-азота качественно совпадает с аналогичными результатами, полученными для СКФ-кислорода.

Результаты обработки данных вычислительного эксперимента по азоту по формулам (3.1-3.3) приведены на рис. 14-16.

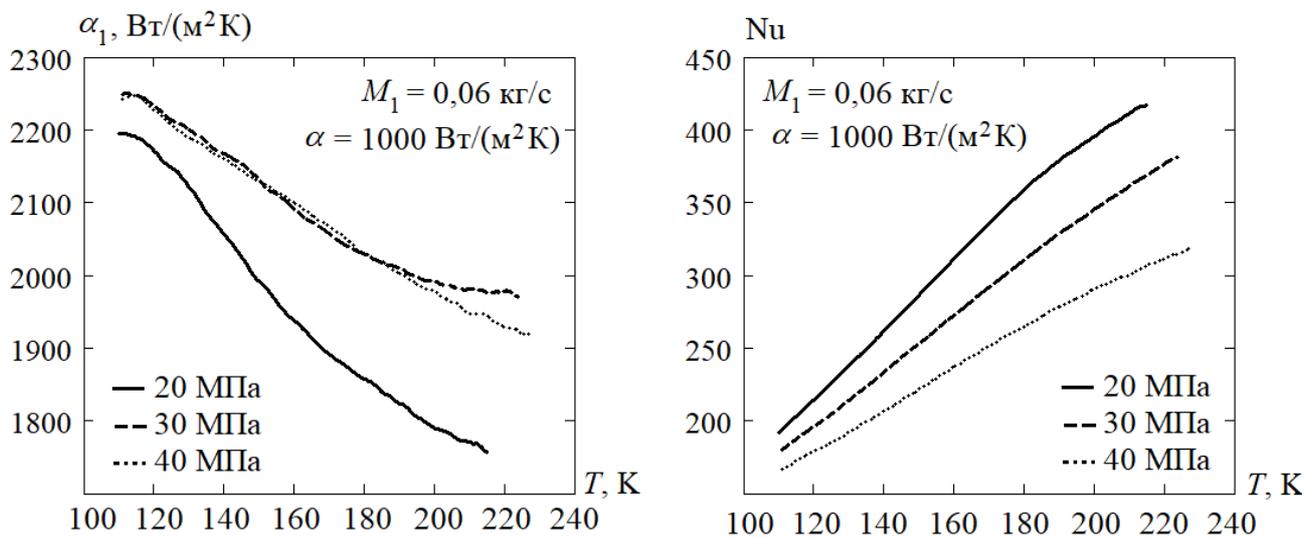


Рис. 14. Температурная зависимость коэффициента теплоотдачи и числа Нуссельта в СКФ-азоте при различном давлении СКФ

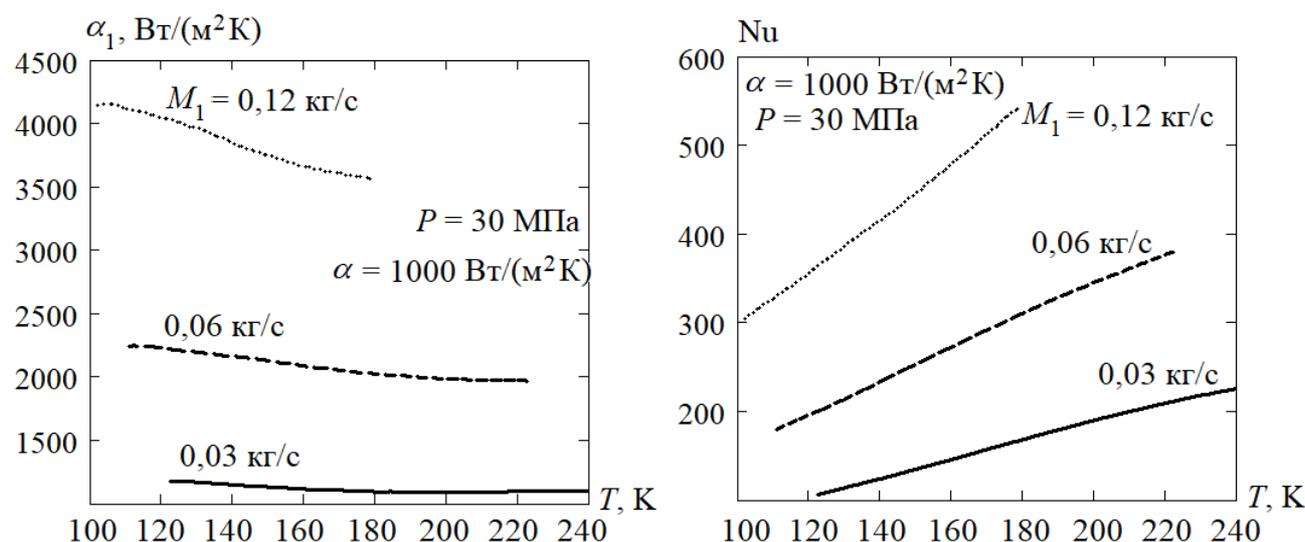


Рис. 15. Температурная зависимость коэффициента теплоотдачи и числа Нуссельта в СКФ-азоте при различном массовом расходе СКФ

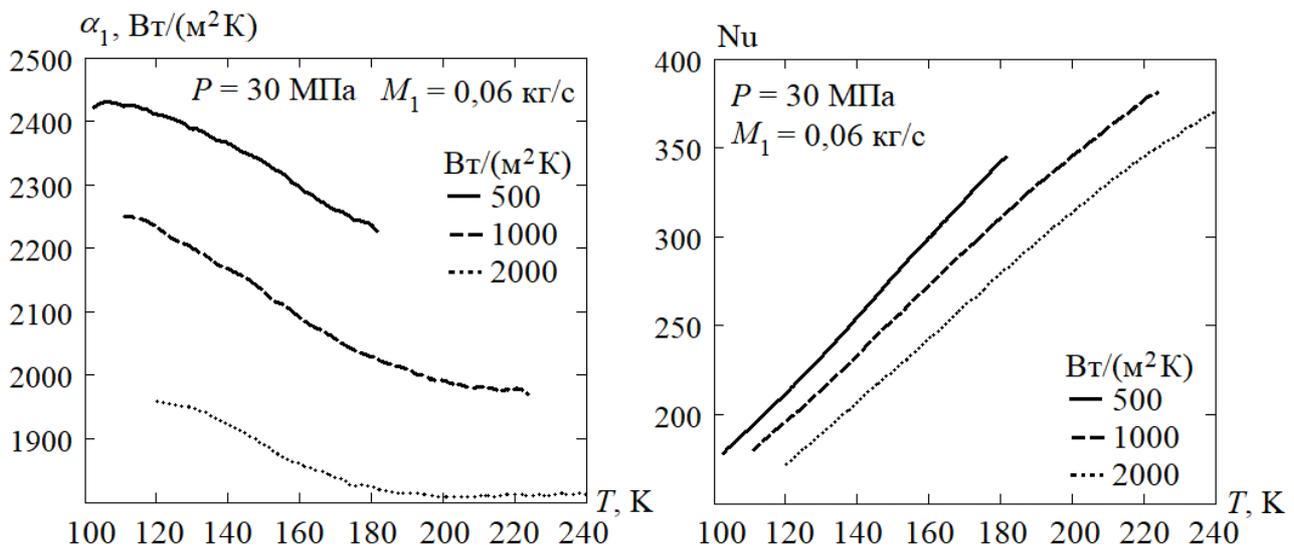


Рис. 16. Температурная зависимость коэффициента теплоотдачи и числа Нуссельта в СКФ-азоте при различном коэффициенте α

Для аппроксимации зависимости числа Нуссельта в азоте также использовалась модель (3.4), но потребовалось учесть зависимость коэффициентов модели от давления, как в уравнении Краснощекова и Протопопова [3]. Использовалась линейная зависимость от давления. В рамках регрессионного анализа установлены те же незначимые коэффициенты, что и в случае кислорода, и дополнительно коэффициент a_5 . Также значимую зависимость от давления показал только коэффициент a_7 . Результирующее критериальное уравнение для азота имеет вид:

$$\text{Nu}(T, P) = 0,0393 \overline{\text{Pr}}^{-0,487} \text{Re}^{0,749} \left(\frac{\rho}{\rho_{\text{ст}}} \right)^{0,438} \left(\frac{\overline{c_p}}{c_p} \right)^{0,233 \frac{P}{P_c} - 1,407} \quad (4.1)$$

Здесь относительная ошибка определения натуральных значений числа Нуссельта составила максимальное значение 4%, среднее значение 1,5%.

Корреляция полученных в вычислительном эксперименте и рассчитанных по формуле (3.6) значений числа Нуссельта показана на рис. 17.

Рис. 17 свидетельствует, что полученные данные показывают хорошую корреляцию с уравнением (3.6). Это уравнение также показывает хорошее соответствие с высокотемпературным пределом в форме уравнения Диттуса-Болтера. Отметим, что специфические коэффициенты в уравнении (4.1) для кислорода оказались существенно другими, чем для кислорода в уравнении (3.6). Поскольку данные уравнения получены в одном вычислительном эксперименте и отличались только теплофизическими зависимостями свойств от температуры, то это различие можно считать достоверным. Данное различие подтверждает мнение [3], что критериальное уравнение в псевдокритической области температур существенно зависит от природы и типа вещества.

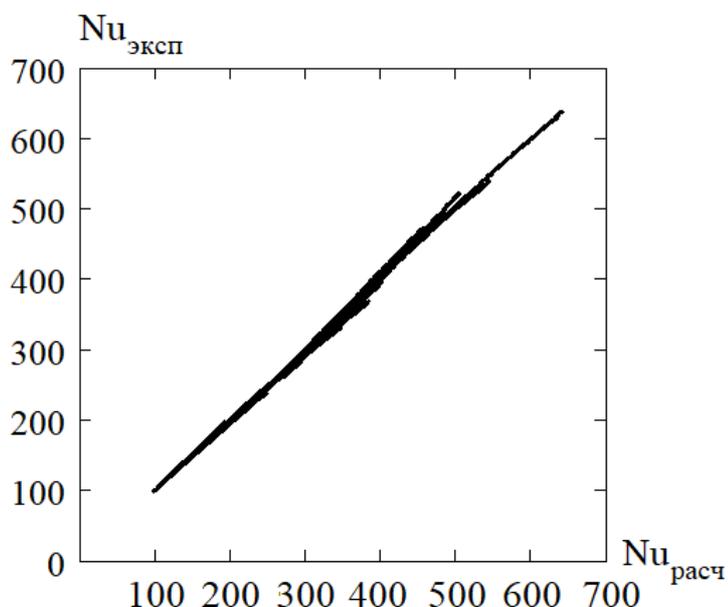


Рис. 17. Сравнение чисел Нуссельта для СКФ-азота, полученных в вычислительном эксперименте и по формуле (4.1)

Отметим, что в критериальные уравнения (3.6), (4.1) не вошел в явном виде фактор коэффициента теплоотдачи с теплоносителем, его влияние автоматически учитывается через самосогласованное формирование температуры стенки в процессе теплопереноса. Это означает, что в рассматриваемой закритической области формируется автомодельный режим теплоотдачи из СКФ, позволяющий использовать универсальные зависимости вида (3.6), (4.1) для широкого диапазона давлений и массовых расходов.

Литература

1. Кутателадзе С. С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 367 с.
2. Алексеев В. П., Вайнштейн Г. Е., Герасимов П. В. Расчет и моделирование аппаратов криогенных установок. – Л.: Энергоатомиздат, 1987. 280 с.
3. Петухов Б. С., Генин Л. Г., Ковалев С. А. Теплообмен в ядерных энергетических установках. М.: Атомиздат, 1974. 408 с.
4. Pioro Igor L., Duffey Romney B. Experimental heat transfer in supercritical water flowing inside channels (survey) // Nuclear Engineering and Design. 2005. V. 235. P. 2407-2430.
5. Huang Dan, Wub Zan, Sunden Bengt, Li Wei. A brief review on convection heat transfer of fluids at supercritical pressures in tubes and the recent progress // Applied Energy. 216. V. 162. P. 494-505.
6. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980. – 618 с.
7. Павловский В. А., Никущенко Д. В. Вычислительная гидродинамика. Теоретические основы. – СПб: Лань, 2018. – 368 с.
8. Petrov N. E., Popov V. N. Heat transfer and hydraulic resistance with turbulent flow in a tube of water under supercritical parameters of state // Thermal Engineering. 1988. V. 35. P. 557-580.
9. Cheng He, Yonglin Ju, Yunzhun Fu. Experimental and simulation investigation on heat transfer characteristics of supercritical nitrogen in a new rib tube of open rack vaporizer // International Journal of Refrigeration. 2019. V. 111. P. 103-112.

SIMULATION OF HEAT AND MASS TRANSFER IN THE FLOW OF SUPERCRITICAL NITROGEN AND OXYGEN IN A TUBE BY THE FINITE ELEMENT METHOD

S. V. Borodkin, I. L. Bataronov, A. V. Ivanov, V. I. Ryazhskikh

¹Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N.E. Zhukovsky
and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

²Voronezh State Technical University

A computational experiment was performed using the finite element method to determine the temperature and velocity fields in a supercritical turbulent flow of oxygen and nitrogen. Heat transfer with the environment was modeled using the Newton-Richman equation with a constant heat transfer coefficient. The distributions along the flow of the mean-enthalpy temperature, the wall temperature, and the linear density of the heat flow through the wall are found. Based on these data, the local heat transfer coefficients and the Nusselt number are calculated. The criterion equations for the local Nusselt criterion in nitrogen and oxygen in the over-critical region are constructed.

Keywords: modeling, turbulent heat and mass transfer, criterion equation, heat transfer coefficient.

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА СФЕРИЧЕСКИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

В. В. Филиппов, А. О. Золотухина

Липецкий государственный педагогический университет им. П. П. Семенова-Тян-Шанского
wwfilippow@mail.ru

Выполнено моделирование энергетического спектра слоистой структуры в сферических неоднородных квантовых точках. В работе представлен случай радиально-симметричного распределения слоев с различной величиной работы выхода электронов. Теоретический расчет реализован в рамках нерелятивистской теории квантовой механики.

Ключевые слова: энергетический спектр, квантовая точка, уравнение Шрёдингера.

В настоящее время наночастицы широкого диапазона строения, размеров и структуры находят все большее практическое использование в химической технологии, строительстве, машиностроении, электронике, медицине и других отраслях [1, 2]. Перспективным методом управления параметрами квантовых точек (КТ), а также стабилизации их структуры является нанесение различных защитных нанотекстур или химически активных пленок [3, 4].

С целью анализа влияния покрытия на энергетические свойства КТ рассмотрим одноэлектронное стационарное уравнение Шрёдингера для квантовой ямы со сферической симметрией. В приводимых ниже расчетах будем полагать распределение электронной плотности по угловым компонентам симметричным, следовательно анализируемое решение реально описывает одноэлектронное s состояние ($l=0$).

В рассматриваемом случае гамильтониан примет вид [5, 6]:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(r). \quad (1)$$

Соответственно, уравнение Шрёдингера удобно представить в виде:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - U(x, y, z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z). \quad (2)$$

Модель КТ, приведенная на рис. 1, физически близка реальному случаю, когда сферически симметричная однородная наночастица, накрывается тонким защитным (активным) нанослоем. При переходе из одного материала в другой учтем изменение физических свойств: m_1 и m_2 – эффективные массы электронов в слоях КТ (m_0 – масса свободного электрона); U_1 и U_2 – работы выхода контактирующих материалов (рис. 2).

В силу рассматриваемой симметрии, задачу для КТ, как это показано в работах [3, 4], удобно решать в сферической системе координат (r, φ, Θ) .

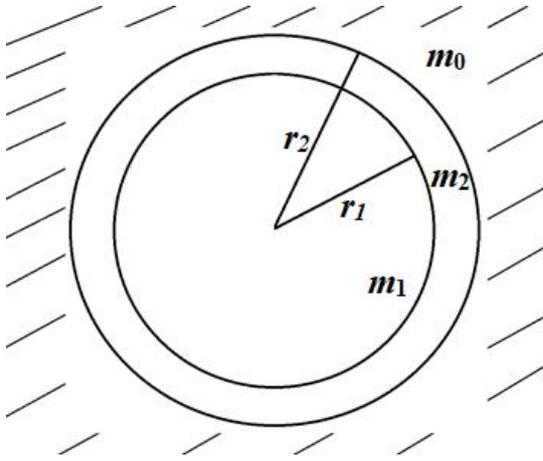


Рис. 1. Геометрическая структура неоднородной квантовой точки

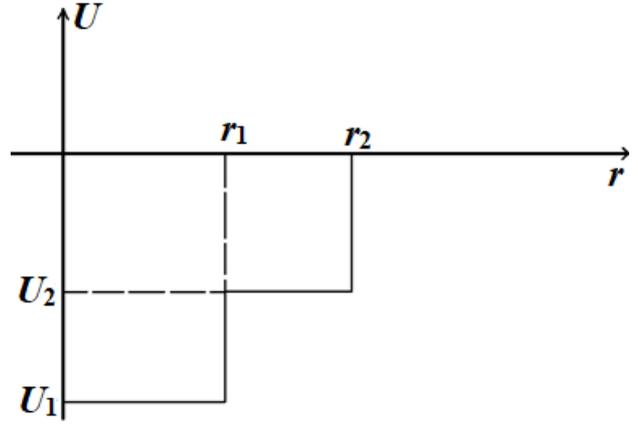


Рис. 2. Модельная энергетическая структура квантовой точки

В анализируемом случае, с учетом радиальной симметрии волновой функции $\psi = \psi(r)$, получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi_i}{dr} \right) + U_i(r)\psi_i = E\psi_i, \quad (3)$$

где $i=1, 2, 3$ для соответствующих сфер наночастицы.

Рассматриваемое уравнение удобно привести к виду:

$$\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi^2}{dr} \right) + (E - U_i(r))\psi_i = 0. \quad (4)$$

С учётом постановки физической задачи, уравнение распадается на три:

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi_1}{dr} + \frac{\hbar^2}{2m_1} (E - U_1)\psi_1 = 0, \\ \frac{d^2\psi_2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi_2}{dr} + \frac{\hbar^2}{2m_2} (E - U_2)\psi_2 = 0, \\ \frac{d^2\psi_3}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi_3}{dr} + \frac{\hbar^2}{2m_0} E\psi_3 = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Решения каждого из данных уравнений представляются в виде:

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 \frac{\sin k_1 r}{r} + B_1 \frac{\cos k_1 r}{r}, \\ \psi_2 = A_2 \frac{\sin k_2 r}{r} + B_2 \frac{\cos k_2 r}{r}, \\ \psi_3 = A_3 \frac{e^{k_3 r}}{r} + B_3 \frac{e^{-k_3 r}}{r}, \end{cases} \quad (6)$$

где введены обозначения:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_1(E - U_1)}{\hbar^2}}, \quad (7)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_2(E - U_2)}{h}}, \quad (8)$$

$$k_3 = \sqrt{\frac{2m_3(E - U_3)}{h}}. \quad (9)$$

Граничные условия, вытекающие из непрерывности волновой функции и плотности потока, в данном случае принимают вид:

$$\begin{cases} \psi_1(r=0) \neq 0, \\ \psi_3(r=\infty) = 0, \\ \psi_1(r_1) = \psi_2(r_1), \\ \psi_2(r_2) = \psi_3(r_2), \\ \frac{1}{m_1} \frac{d\psi_1}{dr}(r_1) = \frac{1}{m_2} \frac{d\psi_2}{dr}(r_1), \\ \frac{1}{m_2} \frac{d\psi_2}{dr}(r_2) = \frac{1}{m_0} \frac{d\psi_1}{dr}(r_2), \end{cases} \quad (10)$$

где

$$\frac{d\psi_1}{dr} = -\frac{A_1}{r^2} \sin k_1 r + \frac{A_1}{r} k_1 \cos k_1 r, \quad (11)$$

$$\frac{d\psi_2}{dr} = -\frac{A_2}{r^2} \sin k_2 r + \frac{A_2}{r} k_2 \cos k_2 r - \frac{B_2}{r^2} \cos k_2 r - \frac{B_2}{r} k_2 \sin k_2 r, \quad (12)$$

$$\frac{d\psi_3}{dr} = -\frac{B_3}{r^2} e^{-k_3 r} - \frac{B_3}{r} k_3 e^{-k_3 r} = -\frac{B_3}{r^2} e^{-k_3 r} (1 + k_3 r), \quad (13)$$

$$\frac{d\psi_4}{dr} = -\frac{B_4}{r^2} e^{-k_4 r} - \frac{B_4}{r} k_4 e^{-k_4 r} = -\frac{B_4}{r^2} e^{-k_4 r} (1 + k_4 r). \quad (14)$$

С учётом полученных выше решений для волновых функций ψ_1, ψ_2, ψ_3 , из первых двух условий (10) получаем: $B_1=0, A_3=0$. Для определения неизвестных коэффициентов A_1, A_2, B_2, B_3 получаем линейную систему четырех уравнений:

$$A_1 \frac{\sin k_1 r_1}{r_1} - A_2 \frac{\sin k_2 r_2}{r_1} - B_2 \frac{\cos k_2 r_2}{r_1} = 0, \quad (15)$$

$$A_2 \frac{\sin k_2 r_2}{r_2} - B_2 \frac{\sin k_2 r_2}{r_1} - B_3 \frac{\cos k_3 r_2}{r_1} = 0, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} A_1 \frac{1}{m_1 r_1^2} (k_1 r_1 \cos k_1 r_1 - \sin k_1 r_1) - A_2 \frac{1}{m_2 r_1^2} (k_1 r_1 \cos k_2 r_1 - \sin k_2 r_1) + \\ + B_2 \frac{1}{m_2 r_1^2} (\cos k_2 r_2 + k_2 r_1 \sin k_2 r_2) = 0, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} A_2 \frac{1}{m_2 r_2^2} (k_2 r_2 \cos k_2 r_2 - \sin k_2 r_2) - B_2 \frac{1}{m_2 r_2^2} (\cos k_2 r_2 + k_2 r_2 \sin k_2 r_2) + \\ + B_3 \frac{1}{m_0 r_2^2} e^{-k_3 r_3} (1 + k_2 r_2) = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

Приведенную систему уравнений удобно представить в виде:

$$\begin{cases} A_1 d_{11} + A_2 d_{12} + B_2 d_{13} + B_3 d_{14} = 0, \\ A_1 d_{21} + A_2 d_{22} + B_2 d_{23} + B_3 d_{24} = 0, \\ A_1 d_{31} + A_2 d_{32} + B_2 d_{33} + B_3 d_{34} = 0, \\ A_1 d_{41} + A_2 d_{42} + B_2 d_{43} + B_3 d_{44} = 0, \end{cases} \quad (19)$$

Условие для энергетических уровней получаем из требования равенства нулю определителя составленного из коэффициентов при A_1, A_2, B_2, B_3 : $\det\|d_{ij}\| = 0$ [6, 7]. Собственные значения в конкретном случае легко определимы с помощью математических пакетов, например MathCad или Matlab.

Таким образом, в данной работе представлена математическая модель, позволяющая изучить влияние соотношения эффективных масс и работ выхода материалов на энергетический спектр электронных состояний в сферических квантовых точках с изолирующим или активным покрытием. Предлагаемая теоретическая модель позволяет выполнять аналитический расчет энергетического спектра для КТ конкретного химического состава и управлять их свойствами на этапе практического формирования.

Литература

1. Азаренков Н. А. Наноструктурные покрытия и наноматериалы: Основы получения. Свойства. Области применения. Особенности современного наноструктурного / Н. А. Азаренков, В. М. Береснев, А. Д. Погребняк – М.: КД Либроком, 2013. – 368 с.
2. Елисеев А. А. Функциональные наноматериалы / А. А. Елисеев, А. В. Лукашин – Вологда: Инфра-Инженерия, 2010. – 456 с.
3. Ткач Н. В. Спектр и свойства сечения рассеяния электронов в открытых сферических квантовых точках / Н. В. Ткач, Ю. А. Сети // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43, № 3. – С. 357-363.
4. Ткач Н. В. Свойства электронного спектра в двухъямной закрытой сферической квантовой точке и его эволюция при изменении толщины внешней ямы / Н. В. Ткач, Ю. А. Сети // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, № 9. – С. 1111-1119.
5. Ландау Л. Д. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц – М.: Физматлит, 2004. – 800 с.
6. Матвеев А. Н. Атомная физика / А. Н. Матвеев – М.: Высшая школа, 1989. – 439 с.
7. Филиппов В. В. Моделирование энергетического спектра носителей заряда в туннельно-резонансных структурах / В. В. Филиппов, А. А. Заворотный, Е. Н. Бормонтов // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2011. – Т. 13, № 3. – С. 363-368.

PHYSICAL AND MATHEMATICAL MODELING OF THE ENERGY SPECTRUM SPHERICAL HETEROSTRUCTURES

V. V. Filippov, A. O. Zolotukhina

Lipetsk State Pedagogical University named after P. P. Semenov-Tyan-Shan

The energy spectrum of a layered structure in spherical layered quantum dots is simulated. The paper presents the case of a radially symmetric distribution of layers with different values of the work function of the electron yield. The theoretical calculation is implemented in the framework of the non-relativistic theory of quantum mechanics.

Keywords: energy spectrum, quantum dot, Schrodinger equation.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ 12-КРАУН-4 И 1-ТИО-12-КРАУН-4

А. В. Зиганшин¹, Н. П. Русакова¹, В. В. Туровцев², Ю. Д. Орлов¹

¹Тверской государственный университет

²Тверской государственный медицинский университет Минздрава России
sashazv1998@mail.ru

Методом V3LYP получено распределение электронной плотности для 12-краун-4 и 1-тио-12-краун-4. Для молекул вычислены групповые интегральные характеристики – заряд, энергия и объем в рамках «квантовой теории атомов в молекулах». В краун-эфирах найдены внутримолекулярные слабые взаимодействия.

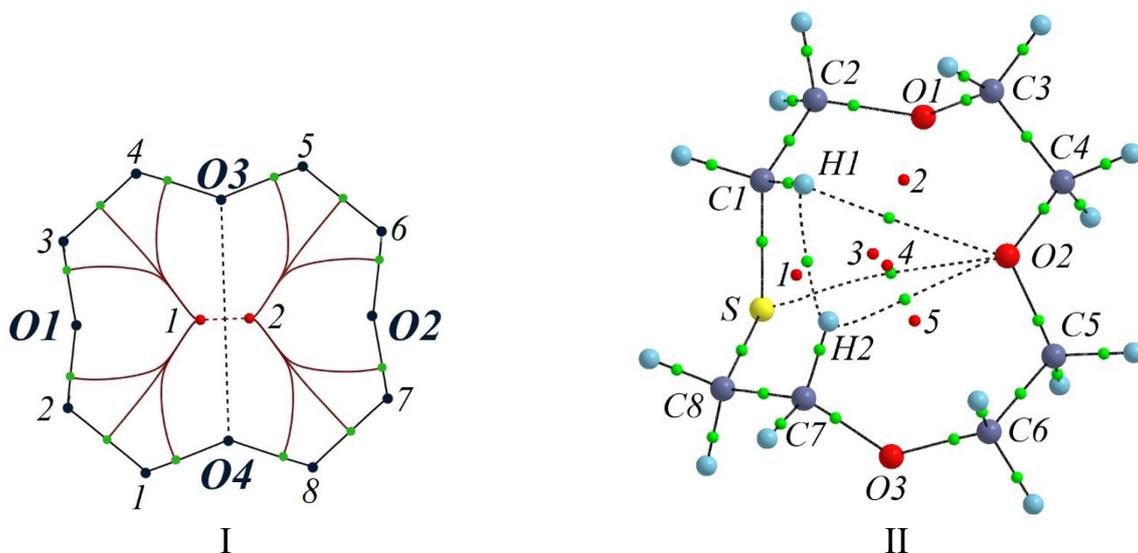
Ключевые слова: «квантовая теория атомов в молекулах», краун-эфиры, электронная плотность, внутримолекулярные слабые взаимодействия.

Математическое моделирование в качестве теоретического подхода широко используется в различных науках, в том числе и в химии. Составление адекватных моделей и уточнение существующих позволяет сократить материальные затраты при получении экспериментальных данных. В некоторых случаях, получить свойства вещества (например, электронные) можно только при помощи методов квантовой механики [1]. Применение таких методов является ресурсосберегающим для изучения свойств не только свободных радикалов, но и уже достаточно хорошо изученных веществ, таких как краун-эфиры.

Краун-эфиры представляют собой макрогетероциклические соединения. Цикл малого краун-эфира образован 12-ю атомами, из которых четыре – гетероатомы (O, N или S), связанные между собой -CH₂-CH₂- фрагментами [2].

Краун-эфиры применяются для добычи, очистки, и переработки металлов, в том числе редкоземельных. Используются в медицине в качестве лекарственных препаратов. А серосодержащие краун-эфиры обладают повышенной радиационной стойкостью и помогают решать проблему переработки радиоактивных отходов, участвуя в извлечении наиболее активных изотопов (стронций-90, цезий-137) [3]. Несмотря на это, данные по электронным свойствам краун-эфиров и их тиоаналогов отсутствуют. Целью работы стало получение и сравнение электронных свойств (групповые заряды, энергии и объемы) для 12-краун-4 и 1-тио-12-краун-4. Ранее для этих структур были рассмотрены внутримолекулярные слабые взаимодействия в [4].

Оптимизация молекул 12-краун-4 (I) и 1-тио-12-краун-4 (II) (см. рисунок) проводилась методом V3LYP в программе GAUSSIAN03 [5]. Заряды, объемы и энергии атомов были получены численным интегрированием по изоповерхности 0,001 с помощью «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) [6], с использованием пакета AIMALL [7]. Параметры атомов суммированы в характеристики групп – групповые заряды $q(R)$, энергии $E(R)$ и объемы $V(R)$.



Молекулярный граф 12-краун-4 с коричневыми линиями межатомных поверхностей в плоскостях циклов (I) и равновесная геометрия 1-тио-12-краун-4 (II); пунктирными линиями между атомами показаны внутримолекулярные слабые взаимодействия (ВМСВ), цифрами и красными малыми сферами обозначены критические точки циклов (КТ (3;+1)), зелеными малыми сферами критические точки связи (КТ(3;-1))

Наличие в молекулах I и II внутримолекулярных слабых взаимодействий определялось характером критической точки (3;-1) на связевом пути O3...O4 (I), O2...H1, O2...H2 и O2...S (II). Вид КТ 1, 2 (I), и 1 – 5 (II) получен расчетом Гесса-иана электронной плотности как (3;+1) – КТ цикла (см. рисунок). Присутствие внутри I и II слабых взаимодействий и КТ (3;-1) на них приводит выделению нескольких циклических образований с разным количеством атомных ядер (рисунок, табл. 1)

Таблица 1

Циклы на слабых взаимодействиях в 12-краун-4 (I) и 1-тио-12-краун-4 (II)

№ КТ	I	II
1	-C1 – C2 – O1 – C3 – C4 – O3 – O4-	-C1 – H1 - H2 - C7 - C8 - S-
2	-O3 – C5 – C6 - O2 – C7 – C8 – O4-	-C1 - H1- O2 – C4 – C3 – O1 – C2-
3		-C1 – H1 - O2 - S-
4		-H1- H2 - O2-
5		-C7 – H2 - O2 - C5 – C6 – O3-

Молекула I обладает элементами симметрии. Наличие двух плоскостей симметрии по противоположащим атомам кислорода (P_{O1-O2} и P_{O3-O4}) сопровождается выделением оси вращения 2-го порядка в КТ (3; -1). Распределение $\rho(r)$ групп CH₂ и составляющих их атомов симметрично относительно выделяемых P_{O1-O2} и P_{O3-O4}, что отражается в идентичности их электронных свойств q , E , V (табл. 2).

Между атомами кислорода, обладающими значением заряда $-q(O_3)=q(O_4)=-1,101$ а. е., присутствует ВМСВ, тогда как между O_1 и O_2 ($q(O_1)=q(O_2)=-1,103$ а. е.) ее нет. Несмотря на сходность зарядов (изменение в пределах расчетной погрешности) их объемы и энергии достаточно сильно отличаются (табл. 2). Заряды групп CH_2 , ближайших к O_3 и O_4 имеют меньшую величину (на 0,013 а.е.), по сравнению с CH_2 , соседними с O_1 и O_2 . (табл. 2). Энергия CH_2 существенно не отличается – все изменения происходят в пределах 10 кДж/моль. Значительные изменения претерпевают объемы атомных бассейнов CH_2 : $V(CH_2)$, находящихся рядом с O_3 и O_4 , больше на $0,25 \text{ \AA}^3$, чем $V(CH_2)$, соседствующих с O_1 и O_2 . Энергия атомов кислорода, связанных ВМСВ значительно ниже (на 40 кДж/моль), чем $E(O)$, не взаимодействующих между собой. А объем O_3 и O_4 меньше на $0,13 \text{ \AA}^3$ по сравнению с $V(O_1)$ и $V(O_2)$.

Таблица 2

Групповые электронные свойства ($q(R)$, $E(R)$, $V(R)$) 12-краун-4 (I) и 1-тио-12-краун-4 (II), где $R = O, S$.

	1R	1CH ₂	2CH ₂	2R	3CH ₂	4CH ₂	3R	5CH ₂	6CH ₂	4R	7CH ₂	8CH ₂
$q(R)$												
I	-1,101	0,544	0,557	-1,103	0,557	0,544	-1,101	0,544	0,557	-1,103	0,557	0,544
II	0,009	0,007	0,546	-1,100	0,569	0,531	-1,105	0,542	0,550	-1,095	0,575	-0,029
$E(R)$												
I	199330	102370	102360	199290	102360	102370	199330	102370	102360	199290	102360	102370
II	1047700	102950	102240	199020	102220	102270	199040	102260	102250	199020	102170	103030
$V(R)$												
I	14,69	22,18	21,93	14,82	21,93	22,18	14,69	22,18	21,93	14,82	21,93	22,18
II	28,75	23,31	21,16	14,94	21,83	22,23	14,29	22,05	21,74	14,87	21,79	22,55

Серым цветом выделены параметры серосодержащих групп.

Соединение II из-за присутствия серы является полностью асимметричным. S показывает себя донором электронной плотности для соседних CH_2 групп, что отражено в значительном уменьшении их $q(CH_2)$, увеличении $V(CH_2)$ и снижении $E(CH_2)$ (табл. 2). Незначительно изменение заряда атомов кислорода, расположенных от S через две CH_2 вдоль связевых путей цикла (повышается менее, чем на 0,01 а.е. по отношению к $q(O)$ для I)

Параметры $q(R)$, $E(R)$, $V(R)$ группы CH_2 в II в зависимости от удаления от S различаются (как между собой в II, так и между соответствующими CH_2 в I). Большинство CH_2 в II обладает более низким зарядом по сравнению с аналогично расположенной CH_2 в I, исключение составляет вторая CH_2 влево от S – ее q увеличен (табл. 2).

Литература

1. Цирельсон В. Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Бином, 2010. 496 с.

2. Дж. В. Сид, Дж. Л. Этвуд. Супрамолекулярная химия, Т.1, Т.2. М: Академкнига. 2007. 894 с.
3. Хираока М. Краун-соединения. Свойства и применения. Пер. с англ. М.: Мир. 1986. 363 с.
4. Зиганшин А. В., Русакова Н. П., Туровцев В. В. Особенности распределения электронной плотности в краун-эфирах и их тиоаналогах // Тезисы докладов XXVI региональных Каргинских чтений. Тверь: ТвГУ, 2020. С. 51.
5. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Pople et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1, SMP). Gaussian Inc. Pittsburgh PA. 2007.
6. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир, 2001. 528 с.
7. AIMAll (Version 11.09.18, Professional), Todd A. Keith, 2011 – Эл. ресурс. <http://aim.tkgristmill.com>

ELECTRONIC STRUCTURE 12-CROWN-4 AND 1-TIA-12-CROWN-4

A. V. Ziganshin¹, N. P. Rusakova¹, V. V. Turovtsev², Yu. D. Orlov¹

¹Tver State University

²Tver State Medical University

The electron density distribution for 12-crown-4 and 1-thio-12-crown-4 by the B3LYP method was obtained. The group integral characteristics for molecules (charges, energies and volumes) within the framework «of the quantum theory of atoms in a molecules» are calculated. Intramolecular weak interactions in crown ethers were found.

Keywords: "quantum theory of atoms in molecules", crown ethers, electron density, intramolecular weak interactions.

РЕОРГАНИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ ПОЛИПИРРОЛА ПРИ ДОПИРОВАНИИ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

А. С. Зюбин, Т. С. Зюбина, Д. В. Конев, О. И. Истакова, М. А. Воротынцев

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

С помощью квантово-химического моделирования в рамках B3LYP/6-31G* рассмотрено изменение формы полимерной цепочки полипиррола (PPy) при допировании анионами BF_4^- . Найдено, что при объединении цепочки с сильным акцептором (BF_4^-) конфигурация с транс-формой цепочки преобразуется в структуру с цис-конформерами, окружающими анионы допанта, в которой цепочка имеет форму меандра. При удалении акцептора из петлеобразной формы комплекса оставшаяся конфигурация соответствует локальному минимуму потенциальной поверхности, имеет не слишком высокую относительную энергию и поэтому может существовать некоторое время, не преобразуясь в основную структуру.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, сопряженные органические полимеры, полипиррол, допирование.

Введение

Сопряженные органические полимеры, к которым относится полипиррол (PPy), интенсивно изучаются как экспериментально, так и теоретически вследствие обширной области их возможного применения в качестве элементов сенсоров, аккумуляторов, материалов для поглощения радиоволн, антикоррозионных покрытий, солнечных батарей, электрохромных дисплеев, актуаторов (исполнительных устройств), искусственных мышц и т.д. [1-4]. Для появления проводимости такие полимеры необходимо допировать акцепторами или донорами электронной плотности, в зависимости от типа полимера [1]. При этом меняется не только их электронная, но и геометрическая структура [2-4]. Например, при отборе электронов из π -системы полипиррола (допирование акцепторами) его первоначально изогнутая цепочка стремится выпрямиться [3, 4]. Однако наличие отрицательно заряженных допантов должно приводить и к другим изменениям структуры вследствие достаточно сильных взаимодействий NH-связей с анионами. Целью данной работы является выяснение, какие изменения в строении цепочек полипиррола могут вызвать эти взаимодействия.

Методика расчетов

Для изучаемых систем моделирование в основном было выполнено в рамках кластерного приближения с использованием гибридного функционала плотности B3LYP [5, 6] с валентно-двухэкспонентным базисом 6-31G*, включающим поляризационные функции, с помощью программного комплекса GAUSSIAN [7]. В этом подходе полипиррол моделировался цепочками, включающими 7, 9 и 15 пятичленных циклических фрагментов NC_4H_3 . Такая цепоч-

ка может иметь дугообразную или волнообразную формы (рис. 1), энергетическая разница между которыми очень мала (~ 0.01 эВ). Чтобы проверить, не вызваны ли эти особенности граничными эффектами при использовании кластерного приближения, нами было выполнено также моделирование полипиррола с периодическими граничными условиями (программный комплекс VASP, функционал PBE [8, 9]) и с размножаемой ячейкой, включающей 14 структурных единиц. В рамках этой модели основной тоже является волнообразная структура, но линейная конфигурация лежит лишь на 0.04 эВ выше по энергии.

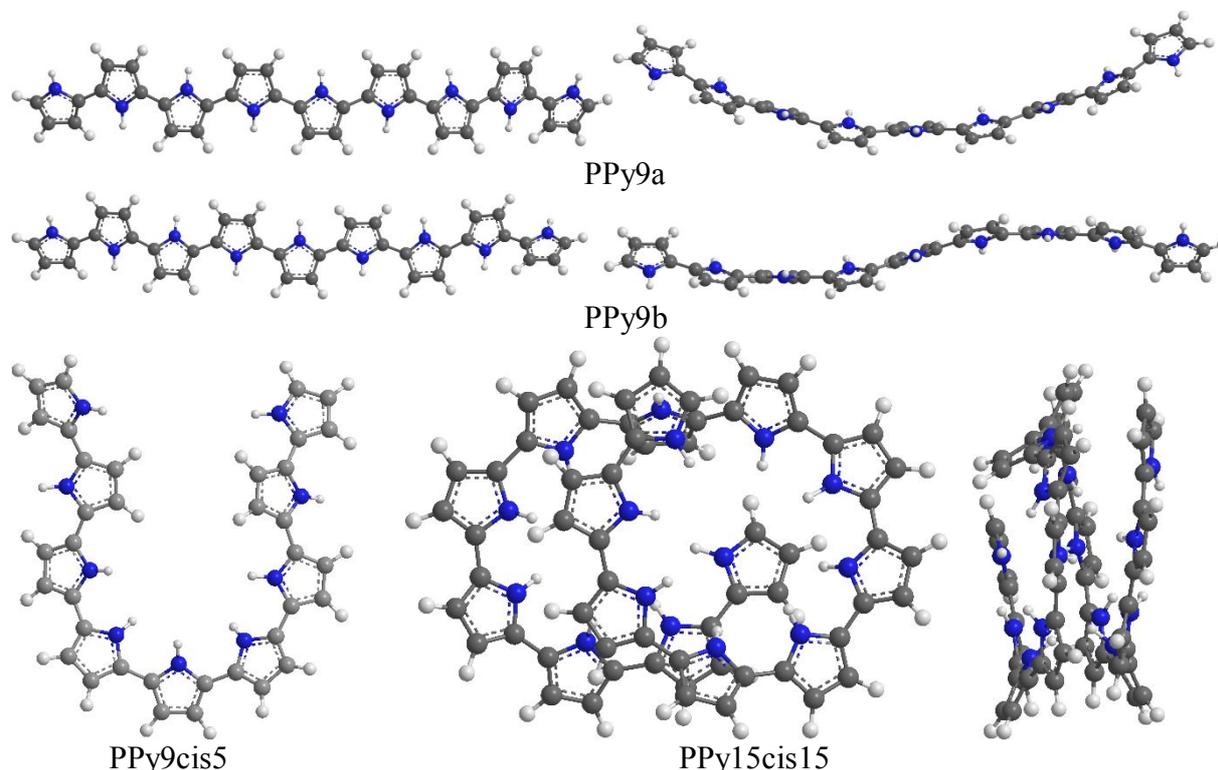


Рис. 1. Различные конформации полипиррольных цепочек

Обсуждение результатов

В наиболее энергетически низком состоянии полимерной цепочки полипиррола связи N-H в соседних циклах развернуты в противоположных направлениях, причем плоскости таких циклов слегка не параллельны. В такой конфигурации только одна NH-связь может эффективно взаимодействовать с анионом. Если развернуть часть циклов так, чтобы связи N-H были ориентированы к ближайшему аниону, то это может заметно понизить полную энергию системы. Чтобы проверить, каких затрат энергии требует такой разворот, на модели из семи звеньев (PPy7) было выполнено сканирование поверхности потенциальной энергии вдоль межплоскостного угла между соседними кольцами, т.е. разворот структурных фрагментов цепочки из транс- положения в цис. Согласно полученным результатам, барьер на этом пути невелик (~ 0.15 эВ), а энергетическая разница между цис- и транс- конформерами составляет ~ 0.05 эВ. При увеличении количества соседних фрагментов в цис- положениях (n-c) цепочка изгибается, при $n=5$ она приобретает U-образную форму, а если все фрагменты цепочки находятся в цис- положениях, то она преобразуется в скошенную, ис-

каженную спираль (рис. 1, структуры PPy9_cis5 и PPy15_cis15). По энергии эти конфигурации на 0.2 - 0.3 эВ выше транс- форм (табл. 1), что в пересчете на одно звено составляет немного более 0.02 - 0.04 эВ. Из полученных данных следует, что полипиррольная цепочка является очень гибкой, и под воздействием тепловых колебаний может существовать в виде широкого набора различных конфигураций, подобно эластомерам. Следует отметить, что эти изменения слабо влияют на энергетическую разницу ВЗМО - НСМО (dEHL), которая в этих системах лежит в интервале 3.36 - 3.24 эВ.

При объединении полипиррольной цепочки с сильным акцептором (галогеном или супергалогеном, например, BF₄) цепочка отдает акцепторному фрагменту существенную часть электронной плотности (например, в конфигурации PPy9_BF₄, рис. 2 ~ 0.7 e), при этом разница ВЗМО - НСМО падает до величины менее 1 эВ. Конфигурация с "прямой" цепочкой (PPy9_BF₄) оказывается наименее энергетически выгодной, при преобразовании цепочки в цис- конформеры и окружении аниона фрагментами с направленными на него связями N-H энергия системы сначала быстро падает (до n=5), а затем снижается слабо (табл. 1). При большом значении n (более 8) вокруг аниона начинает формироваться спираль, содержащая 8 структурных единиц в одном витке (рис. 2, PPy9cis9_BF₄, PPy15cis15_BF₄). В конденсированной фазе можно ожидать формирования "петель" типа цис-4 - цис-5, поскольку переход от "прямой" цепочки к этим формам ведет к существенному понижению энергии. Образование петель или спиралей с более высоким n (>5) слабо понижает энергию, и поэтому, вероятнее всего, будет тормозиться взаимодействием цепочек с окружением. Следует отметить, что при удалении акцептора из петлеобразной формы комплекса оставшаяся конфигурация соответствует локальному минимуму потенциальной поверхности, имеет не слишком высокую относительную энергию (0.02 - 0.04 эВ на одно звено), и поэтому может существовать некоторое время, не преобразуясь в основную структуру.

Таблица 1

Относительные энергии (в эВ) различных конфигураций полипиррольных цепочек. ΔE(SCF) – изменения энергии ССП, ΔE0 – ΔE с добавлением энергии нулевых колебаний, ΔH – изменение теплоты образования, ΔG – изменения энергии Гиббса (при нормальных условиях)

Система	ΔE(SCF)	ΔE0	ΔH	ΔG	Система	ΔE(SCF)	ΔE0	ΔH	ΔG
PPy9a	0.00	0.00	0.00	0.00	PPy9a_BF ₄	0.00	0.00	0.00	0.00
PPy9b	0.01	0.01	0.01	0.01	PPy9cis4_BF ₄	-1.38	-1.32	-1.34	-1.14
PPy9c	0.03	-	-	-	PPy9cis5_BF ₄	-1.65	-1.57	-1.60	-1.36
PPy9cis5	0.23	0.24	0.23	0.27	PPy9cis6_BF ₄	-1.67	-1.59	-1.62	-1.39
PPy15a	0.00	0.00	0.00	0.00	PPy9cis7_BF ₄	-1.70	-1.62	-1.66	-1.39
PPy15cis15	0.34	0.40	0.35	0.85	PPy9cis9_BF ₄	-1.89	-1.79	-1.83	-1.52
PPy15a_BF ₄	0.00	0.00	0.00	0.00	PPy15cis15_BF ₄	-1.90	-1.83	-1.87	-1.36

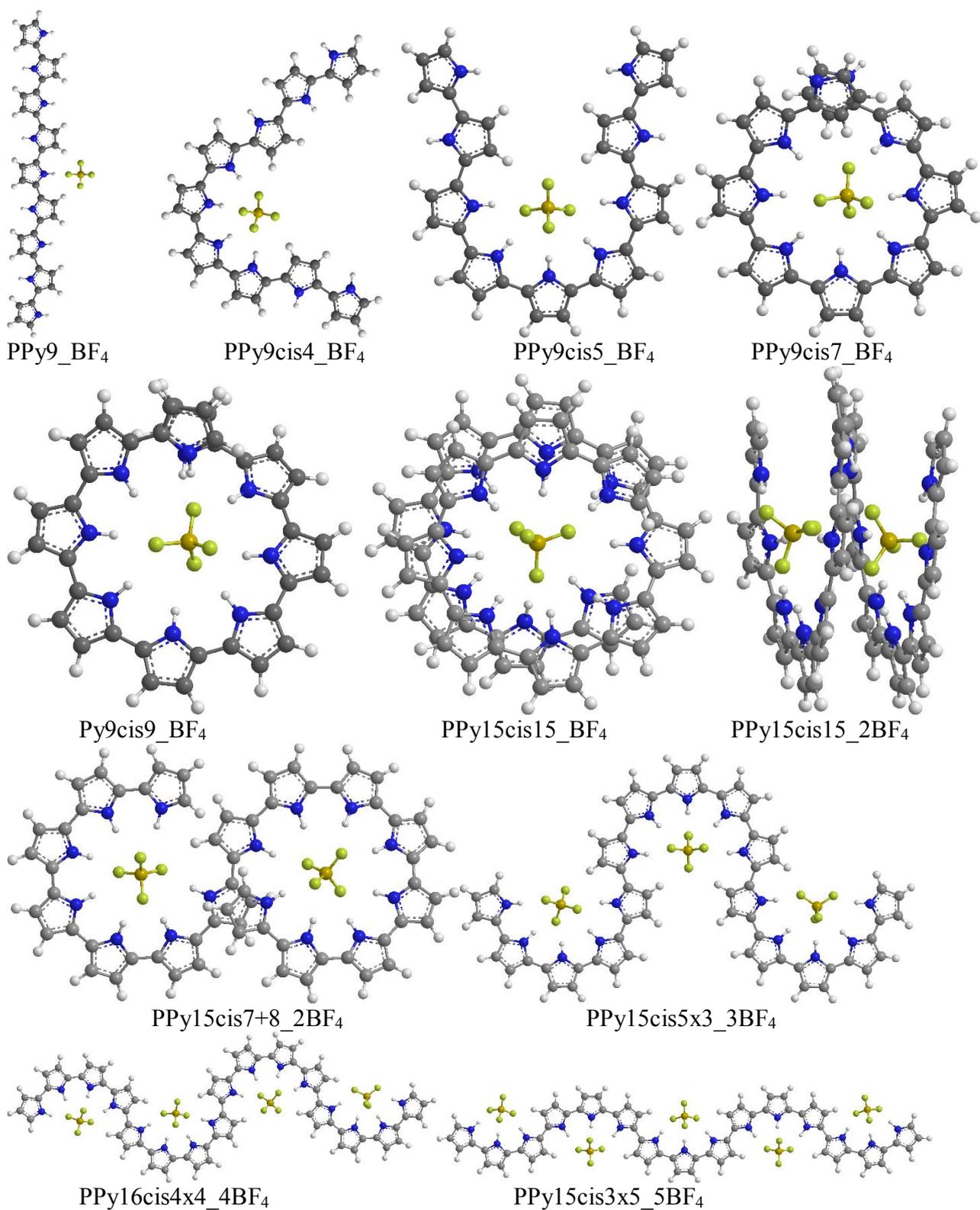


Рис. 2. Различные конформации полипиррольных цепочек с BF₄

При возрастании концентрации анионов и соответственно увеличению их количества на заданном фрагменте цепочки можно ожидать формирования петель, каждая из которых будет обволакивать анион максимально возможным количеством NH- связей. Чтобы оценить энергетические различия между такими структурами, были рассчитаны энергии передачи ионов из комплексов

РРy-nBF₄ в изолированные молекулы KBF₄ в пересчете на один анион BF₄⁻ (табл. 2). Такие энергии имеют сугубо модельный характер, поскольку в растворе молекулы с противоионом будут сольватированы, да и катионы могут быть другими. Однако изменение катиона и учет эффекта сольватации для пары катион-анион будет менять рассчитанные энергии для выбранного ряда на постоянную величину и не скажутся на тенденции их поведения в ряду.

В рамках данной модели передача аниона от полипиррола к катиону идет с понижением энергии, т.е. является энергетически выгодной. Легче всего анион отдает прямая цепочка, при формировании петли энергетический выигрыш при передаче аниона снижается (табл. 2).

При добавлении второй молекулы акцептора к полипиррольной цепочке может формироваться как спиралевидная структура, так и конфигурация с двумя кольцами (рис. 2, РРy15cis15_2BF₄ и РРy15cis7+8_2BF₄), энергетическая разница между которыми не превышает 0.1 эВ.

Таблица 2

Энергии (в эВ) передачи ионов из комплексов РРy-nBF₄ в изолированные молекулы KBF₄ в пересчете на один анион BF₄⁻ (обозначения как в табл. 1)

Система	ΔE0	ΔH	ΔG	Система	ΔE0	ΔH	ΔG
РРy9a_BF ₄	-2.18	-2.20	-2.31	РРy15a_BF ₄	-2.16	-2.18	-2.29
РРy9cis4_BF ₄	-0.86	-0.86	-1.17	РРy15cis15_BF ₄	-0.33	-0.31	-0.93
РРy9cis5_BF ₄	-0.61	-0.60	-0.95	РРy15cis15_2BF ₄	-0.27	-0.26	-0.77
РРy9cis6_BF ₄	-0.59	-0.58	-0.92	РРy15cis7+8_2BF ₄	-0.32	-0.31	-0.73
РРy9cis7_BF ₄	-0.56	-0.54	-0.92	РРy15cis5x3_3BF ₄	-0.73	-0.72	-1.03
РРy9cis9_BF ₄	-0.39	-0.37	-0.79	РРy15cis3x5_5BF ₄	-1.31	-1.31	-1.56
РРy8cis2x4_4BF ₄	-1.97	-1.98	-2.18	РРy16cis4x4_4BF ₄	-1.02	-1.02	-1.31
РРy8cis2x2_2BF ₄	-1.68	-1.69	-1.89				

При присоединении трех молекул BF₄ к цепочке РРy15 формируется структура РРy15cis5x3_3BF₄, в которой цепочка имеет форму меандра, при этом энергия взаимодействия с цепочкой, приходящаяся на один фрагмент BF₄, начинает снижаться (табл. 2). Спиралевидная структура, аналогичная РРy15cis15_2BF₄, тоже возможна, но на 0.3 эВ менее выгодна. При увеличении концентрации допанта, т.е. снижении количества звеньев NC₄H₃ на одну его молекулу и соответственно уменьшении числа NH-связей в одной петле меандра (рис. 2) энергия взаимодействия допанта с цепочкой понижается, хотя до соотношения 3/1 (cis3) остается значительной, и заметно падает лишь для cis2, в результате чего энергия передачи аниона к катиону приближается к значению, характерному для прямой цепочки (табл. 2, РРy8cis2x2_2BF₄).

На основании этих результатов можно ожидать, что в комплексах полипиррола с сильными акцепторами наиболее вероятно формирование меандров, поскольку такая трансформация цепочек требует наименьших изменений их первоначальных структур. При этом одна петля может включать 3 - 5 пиррольных кольца. Уменьшение размеров петли будет снижать энергию взаимодействия с акцептором, а увеличение – снижение количества присоединенных моле-

кул акцептора при слабом изменении энергии взаимодействия каждого из них с цепочкой. Первый этап насыщения полипиррола допантом должен происходить сравнительно медленно, поскольку для достижения оптимума требуется перестройка структуры полимера. После извлечения допанта перестроенная структура должна некоторое время сохраняться, и если временные интервалы между циклами не настолько велики, чтобы такая конфигурация вернулась к первоначальной форме вследствие тепловых колебаний, то последующие этапы внедрения допанта должны проходить существенно быстрее.

Данная работа выполнена на ВЦ ИПХФ РАН при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-01303 мол_а).

Литература

1. MacDiarmid, A. G. // *Angew. Chem., Int. Ed.* 2001. V. 40. P. 2581.
2. Brédas J., Themans B., Fripiat J., André J., Chance, R. // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 29. P. 6761.
3. Habib Ullah, Anwar-ul-Haq Ali Shah, Salma Bilal, Khurshid Ayub // *J. Phys. Chem. C.* 2014. V. 118. P. 17819.
4. Juan Chen, Xingfeng Zhu, Chenglin Luo, Yafei Dai. // *Int J Quantum Chem.* 2017. V. 117. e25453.
5. Becke A. D. // *J.Chem.Phys.* 1993. V.98. P. 5648.
6. Johnson B. J., Gill P. M. W., Pople J. A. // *J.Chem.Phys.* 1993. V. 98. P. 5612.
7. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et al., Gaussian 09, Revision B.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.
8. Kresse G., Furthmüller J. // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. P. 11169.
9. Kresse G., Joubert D. // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 59. P. 1758.

REORGANIZATION OF THE POLYPYRROLE STRUCTURE WITH DOPING: QUANTUM-CHEMICAL MODELING

A. S. Zyubin, T. S. Zyubina, D. V. Konev, O. I. Istakova, M. A. Vorotyntsev

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

Using quantum-chemical modeling within the framework of B3LYP / 6-31G*, the reorganization of the polypyrrole (PPY) chain of upon doping with BF₄⁻ anions is considered. It was found that combining the PPY chain with a strong acceptor (BF₄⁻), the configuration of the chain is transformed from trans- to cis-conformers surrounding the dopant anions, in which the chain has a meander shape. When the acceptor is removed from the loop-like form of the complex, the remaining configuration corresponds to a local minimum of the potential surface, has a not too high relative energy, and therefore can exist for some time without being transformed into the basic structure.

Keywords: quantum chemical modeling, density functional theory, conjugated organic polymers, polypyrrole, doping.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ
2,5-ДИ-МЕ-ПИРАЗИН-ДИ-N-ОКСИДА И ФЕРРОЦЕНА
НА ЭЛЕКТРОДАХ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Т. С. Зюбина¹, А. С. Зюбин¹, С. И. Кулаковская¹, А. В. Куликов^{1,2}, Д. В. Конев¹,
Л. Н. Свиридова², Е. В. Стенина², А. Г. Рябенко¹, Е. В. Золотухина¹

¹Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

²Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
zyubin@icp.ac.ru

Недавно было обнаружено, что в ацетонитриле (MeCN) ток окисления 2,5-ди-ме-пиразин-ди-N-оксида (Pyr1) на углеродных нанотрубках (CNT) в несколько раз превышает ток окисления ферроцена (Fc). С квантово-химической точки зрения это объясняется тем, что энергия адсорбции Pyr1 на CNT выше, чем Fc, что ведет к увеличению концентрации Pyr1 на поверхности CNT. Показана целесообразность использования кластерной модели в сочетании с уровнем расчета wB97XD/6-311G(d,p)BSSE//6-31G(d,p) для исследования молекул, слабо связанных с CNT.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, ацетонитрил, 2,5-ди-ме-пиразин-ди-N-оксид, нанотрубки, ферроцен.

Введение

Углеродные наноматериалы, в частности, одностенные нанотрубки (CNT), являются перспективным материалом для фундаментальных исследований благодаря своим уникальным структурным и физическим свойствам, большой площади поверхности и отличной электронной проводимости. Ранее мы обнаружили, что электрохимически образованные ароматические ди-N-оксидные катион-радикалы являются переносчиками активного кислорода, способного активировать связь C–H субстратов: спиртов, простых эфиров и циклогексана. В последнее время мы обнаружили, что каталитическая эффективность окисления органических соединений увеличивается в несколько раз при использовании бумажных электродов из CNT и ток окисления ароматического ди-N-оксида в несколько раз превышает ток окисления эталона Fc. Чтобы прояснить этот эффект, мы провели квантово-химическое моделирование адсорбции Pyr1 и Fc на электроде из углеродных нанотрубок. Нековалентные взаимодействия между CNT и молекулами сред играют заметную роль. Например, из-за сильных вандер-ваальсовых взаимодействий между CNT (до 500 эВ на 1 мкм длины), гладкой поверхности и высокой поляризуемости CNT образуют жгуты, в которых несколько CNT расположены параллельно друг другу. Принимая во внимание указанные особенности, мы провели квантово-химические расчеты энергии адсорбции Pyr1, Fc и MeCN на поверхности CNT с целью объяснить экспериментально наблюдаемое увеличение тока окисления ди-N-оксидов относительно тока окисления Fc. Была рассчитана энергия адсорбции упомянутых выше молекул на внешней поверхности нанотрубки и в канавках между двумя нанотрубками.

Методика расчетов

В этой статье мы моделировали экспериментально наблюдаемое окисление Pyr1 на пучках проводящих и непроводящих нанотрубок диаметром от 1,4 до 1,8 нм. Поэтому в качестве моделей мы рассматривали непроводящие $\text{CNT}(9,0)$ и проводящие $\text{CNT}(10, 10)$ с диаметрами 1,42 и 1,36 нм, соответственно, оптимизированные с использованием теории функциональной плотности PBE и периодических граничных условий с помощью программного пакета VASP. Полученные геометрические параметры в дальнейшем использовались для построения кластеров.

При моделировании физической адсорбции молекул низкой полярности (там, где ключевую роль играют дисперсионные взаимодействия) для больших систем наиболее удачен с точки зрения точности и затрат времени функционал wB97XD, реализованный в пакете программ GAUSSIAN-09, который мы использовали в расчетах.

Кластеры. Моделирование адсорбции Pyr1 , Fc и MeCN на поверхности CNT и графена с помощью функционала wB97XD проводилось в два этапа. Сначала мы рассмотрели три модели кластеров CNT: 1 – соответствующая фрагментам листа графена ($\text{C}_{24}\text{H}_{12}$), 2 – участок нанотрубки ($\text{C}_{120}\text{H}_{40}$) и 3 – фрагмент поверхности нанотрубки ($\text{C}_{54}\text{H}_{18}$) (рис. 1). На рис. 1 показаны: струк-

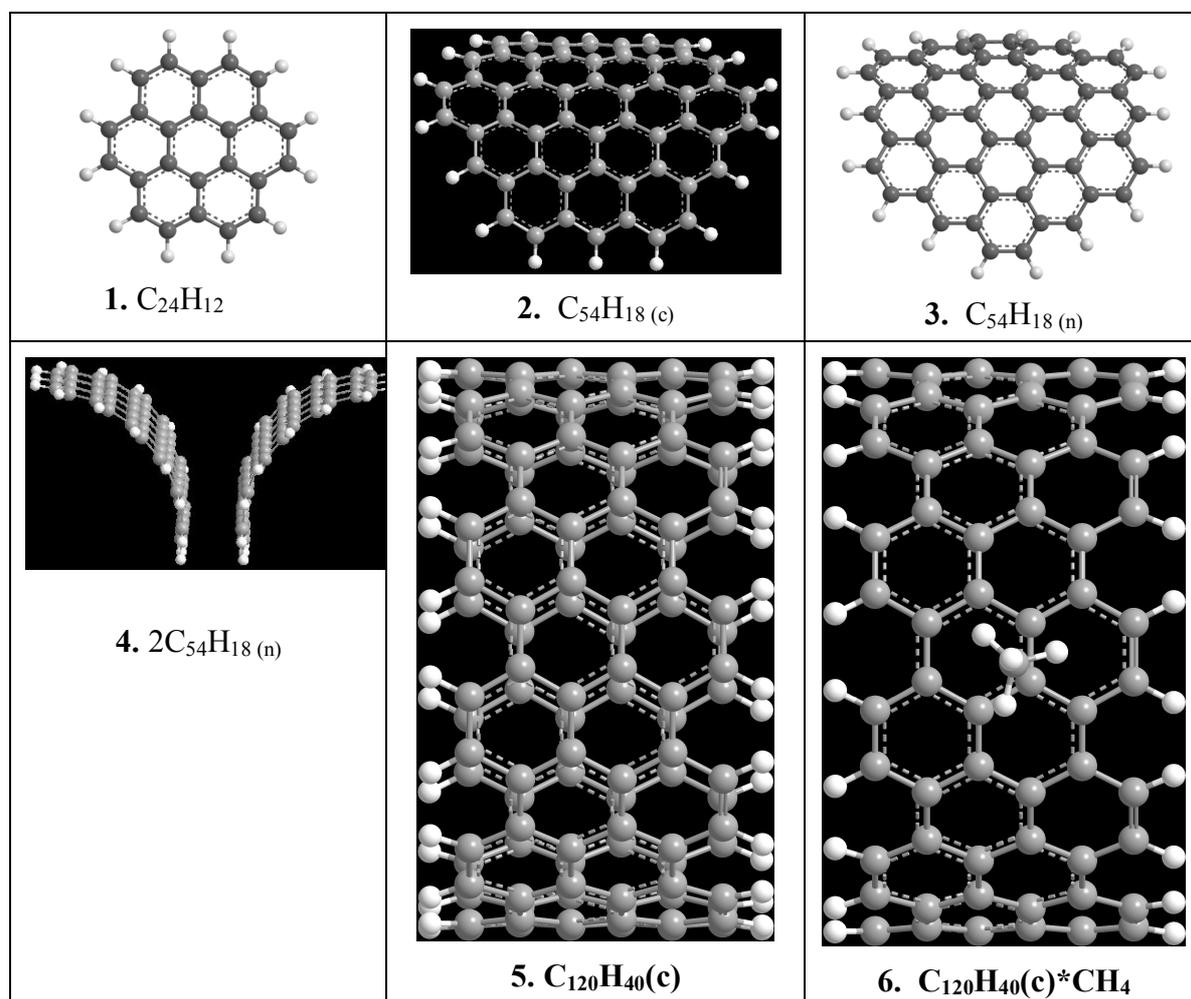


Рис. 1

тура **1** – $C_{24}H_{12}$, фрагмент поверхности графена; структуры **2** и **3** – $C_{54}H_{18}$, фрагменты одиночных проводящих (индекс с) и непроводящих (индекс n) углеродных нанотрубок; структура **4** – два изогнутых кластера $C_{54}H_{18}$ на расстоянии 3.2 \AA между ними, модель канавки между двумя слипшимися нанотрубками; структура **5** – $C_{120}H_{40}$ секция проводящей нанотрубки; структура **6** – $C_{120}H_{40} * CH_4$, метан на участке проводящей нанотрубки.

Координаты атомов углерода в модельных системах были взяты из оптимизированных структур графена и нанотрубок, полученные в рамках PBE/PAW, оборванные граничные связи закрывались атомами H. Во-вторых, была произведена оптимизация геометрии комбинированной системы (модельный кластер с адсорбированной молекулой, Pyr1, Fc или MeCN) с фиксированной координатой модельных кластеров (для сохранения формы поверхности). При оптимизации геометрии положения атомов углерода и водорода кластеров фиксируются на тех, которые получены из свободных (9,0) и (10,10) трубок, и оптимизируется только положение Pyr1, Fc или MeCN. Все расчеты выполнены с использованием вычислительного уровня wB97XD / 6-31G (d, p). Поскольку связь оказывается слабой, мы корректируем энергии с учетом ошибки суперпозиции базисного набора (BSSE). На рис. 1 показаны кластеры, которые мы использовали ниже при моделировании адсорбции Pyr1, Fc и MeCN: Правомерность моделирования поверхности УНТ изогнутыми кластерами доказана путем моделирования адсорбции метана на срезе УНТ $C_{120}H_{40}$ (структура б). Энергия адсорбции метана на кластере $C_{54}H_{18}$ (с) совпадает (в пределах 0,01-0,02 ккал / моль) с таковыми для фрагмента нанотрубки $C_{120}H_{40}$ (с). Поэтому дальнейшие исследования мы провели в кластерном приближении.

Выбор базиса. Уровень теории оптимизации подтверждается тестами с использованием базисных наборов 6-31G (d, p), 6-311G (d, p) и 6-311G ++ (2d, p). На примере метана изучен эффект увеличения базисного ряда: энергия адсорбции увеличивается с 3,2 до 3,5 ккал/моль при смене базиса 6-31G (d, p) на больший базис 6-311G (d, p). При дальнейшем увеличении базиса до 6-311G ++ (2d, p) энергия адсорбции остается в интервале 3,4-3,5 ккал/моль, что близко (в пределах 0,2 ккал/моль) к экспериментальному значению. В этом приближении замена графена на нанотрубку снижает (на 0.4 ккал/моль) энергию адсорбции метана до 3.1 ккал/моль, что близко (в пределах 0.2 ккал/моль) к экспериментальному значению. В свете вышеизложенного, для изучения адсорбции Pyr1, Fc и MeCN мы выбрали кластеры $C_{54}H_{18}$ для моделирования нанотрубок. Оптимизация геометрических параметров проводилась с базисом 6-31G (d, p), а энергетические параметры получены с базисом 6-311G (d, p) с учетом ошибки суперпозиции базисных наборов BSSE (wB97XD / 6-311G (d, p) BSSE// 6-31G (d, p)).

Структуры. На рис. 2 и 3 показаны некоторые из рассчитанных наиболее стабильных изомеров. Структуры **7** – **12** моделируют адсорбцию Pyr1, Fc и 4MeCN на поверхности проводящих $C_{54}H_{18}$ (с) и непроводящих $C_{54}H_{18}$ (n) нанотрубок (рис. 2). Pyr1, Fc, димеры 2Pyr1 и тримеры 3MeCN, адсорбированные на двойных кластерах $2C_{54}H_{18}$ (n) и $2C_{54}H_{18}$ (с), моделирующих поверхность двух CNT(9.0) и CNT(10.10), расположенных на расстоянии 3.2 \AA . На рис. 3 (конст-

рукции 14 - 19) на примере комплексов $C_{54}H_{18} (c)*X$ и $C_{54}H_{18} (n)*X$ (где $X = \text{Pyr}_1$ и Fc) показано, что энергии адсорбции (E_{ad}) исследуемых молекул на проводящих (индекс c) и непроводящих (индекс n) CNT близки (в пределах 0.1 – 0.3 ккал/моль, см. таблицу).

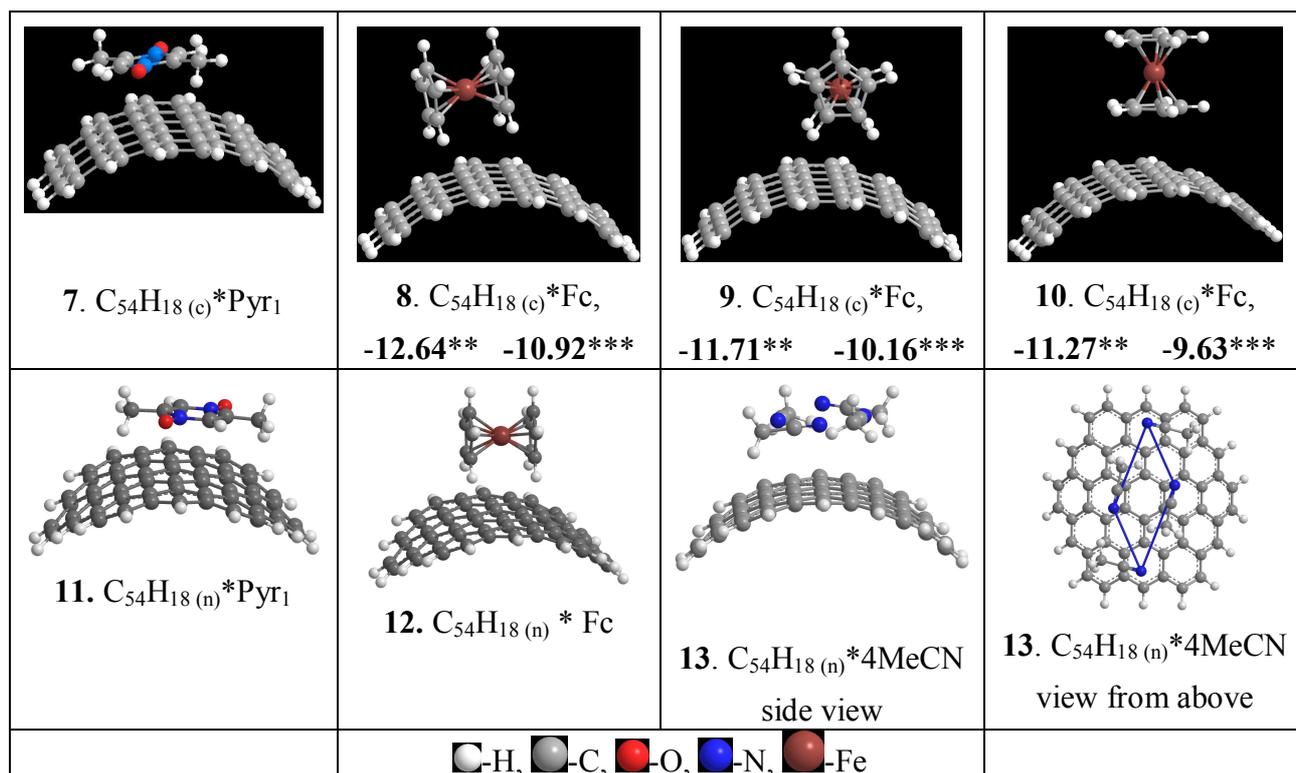


Рис. 2

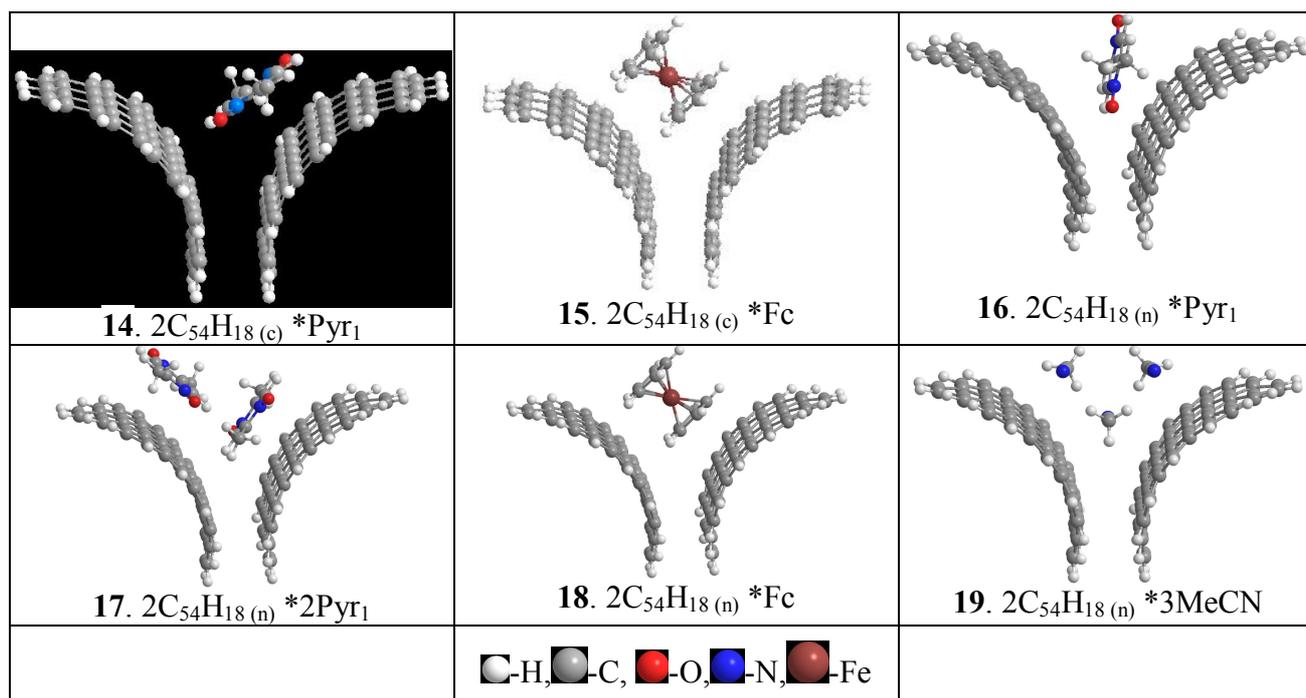


Рис. 3

Энергии адсорбции (E_{ad} , ккал / моль) молекул Pyr1, Fc и MeCN на структурах, моделирующих одиночные углеродные нанотрубки и бороздки между двумя углеродными нанотрубками. BSSE - эффект суперпозиции базисов. Проводящие (c) и непроводящие (n) CNT (10,10) и CNT (9,0) имитировали кластеры $C_{54}H_{18}$ (c) и $C_{54}H_{18}$ (n) соответственно

кластер	E_{ad}	E_{ad} -BSSE	E_{ad}	E_{ad} -BSSE	E_{ad}	E_{ad} -BSSE
	Pyr1		Fc		MeCN	
$C_{54}H_{18(c)} * X$	18.2	14.5	12.6	10.9	6.8	5.9
$C_{54}H_{18(n)} * X$	19.2	15.4	12.5	10.8	6.8	5.8
$C_{54}H_{18(c)} * 2X$	48.8	39.5				
$C_{54}H_{18(n)} * 2X$					19.02	16.57
$C_{54}H_{18(n)} * 3X$					30.6	26.6
$C_{54}H_{18(n)} * 4X$					42.3	36.8
$(2C_{54}H_{18(c)}) * X$	25.6	20.5	23.0	20.0		
$(2C_{54}H_{18(n)}) * X$	26.4	20.8	23.4	20.2		
$(2C_{54}H_{18(n)}) * 2X$	55.3	44.2			24.0	20.5
$(2C_{54}H_{18(n)}) * 3X$					37.2	32.1

Вывод

Было обнаружено, что окисление Fc на нанотрубках является обратимым одноэлектронным процессом, управляемым диффузией (поэтому Fc использовали в качестве эталона). Окисление Pyr1 на бумажных электродах из нанотрубок является необратимым процессом, за которым следует необратимая химическая реакция катион-радикала Pyr1 с растворителем MeCN. Было показано, что ток окисления Pyr1 на CNT в несколько раз превышает ток окисления эталона Fc.

Квантово-химическое моделирование с использованием приближения wB97XD/6-311G (d, p)BSSE//6-31G (d, p) с учетом эффекта суперпозиции базисов (BSSE) хорошо описывает адсорбцию Pyr1, Fc и MeCN на поверхности углеродных нанотрубок. Было обнаружено, что эта адсорбция слабо зависит от проводимости углеродных нанотрубок. Энергия адсорбции уменьшается в ряду Pyr1 (15.4 ккал / моль), Fc (10.8 ккал / моль), MeCN (5.8 ккал / моль) и увеличивается для адсорбции в канавке между двумя нанотрубками.

Из проведенного квантово-химического моделирования следует, что адсорбция Pyr1 возможна как на поверхности нанотрубки, так и между двумя нанотрубками, тогда как адсорбция Fc возможна только на поверхности нанотрубки. Таким образом, превышение энергии адсорбции Pyr1 на 5 ккал / моль по сравнению с Fc на поверхности нанотрубки и возможность его адсорбции, в отличие от Fc, между двумя нанотрубками, приводит к увеличению его концентрации на поверхности и увеличивает в несколько раз ток окисления Pyr1 по сравнению с Fc.

В соответствии с квантово-химическим моделированием параллельное расположение плоской части адсорбированной молекулы Pyr1 на поверхности нанотрубки является энергетически выгодным. Это подтверждает предположе-

ние, сделанное на основании полученных данных о зависимости дифференциальной емкости от потенциала на электроде из нанотрубок.

Экспериментальные результаты подтверждают целесообразность использования кластерной модели в сочетании с уровнем расчета wB97XD/6-311G(d, p)BSSE // 6-31G(d, p) для исследования молекул, слабо связанных с нанотрубками.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием, № государственной регистрации АААА-А19-119061890019-5.

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF OXIDATION OF 2,5-DI-ME-PYRAZINE-DI-N-OXIDE AND FERROCENE ON ELECTRODES FROM CARBON NANOTUBES

T. S. Zyubina¹, A. S. Zyubin¹, S. I. Kulakovskaya¹, A. V. Kulikov^{1,2}, D. V. Konev¹,
L. N. Sviridova², E. V. Stenina², A. G. Ryabenko¹, E. V. Zolotukhina¹

¹Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

²M. V. Lomonosov Moscow State University

It was recently discovered that in acetonitrile (MeCN) the oxidation current of 2,5-di-Me-pyrazine-di-N-oxide (Pyr1) on carbon nanotubes (CNT) is several times higher than the oxidation current of ferrocene (Fc). From a quantum chemical point of view, this is explained by the fact that the adsorption energy of Pyr1 on CNT is higher than that of Fc, which leads to an increase in the Pyr1 concentration on the CNT surface. The experimental results support the use of a cluster model in conjunction with the wB97XD/6-311G(d,p)BSSE//6-31G(d,p) level of theory for the study of molecules that are weakly bound to CNTs.

Keywords: quantum chemical modeling, density functional, acetonitrile, 2,5-di-Me-pyrazine-di-N-oxide, nanotubes, ferrocene.

ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА АДАМСА ПУТЕМ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНТЕРПОЛЯЦИИ С ПОМОЩЬЮ СИСТЕМ РАВНОМЕРНЫХ СДВИГОВ

Е. А. Киселев, В. А. Ушаков

Воронежский государственный университет
evg-kisel2006@yandex.ru

В данной работе предлагается новый численный метод решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, разрешенных относительно производной. Его идея аналогична методу Адамса: используется процедура интерполяции, но вместо полиномов применяется система равномерных сдвигов одной функции. Разработаны два варианта метода – явная и неявная схема. Рассмотрены несколько частных случаев.

Ключевые слова: метод Адамса, задача Коши, система равномерных сдвигов, интерполяция, численный метод.

Введение

Системы равномерных сдвигов в настоящее время применяются достаточно широко, причем особенно хорошо на данный момент изучены алгоритмы интерполяции [1-5]. В одном из простейших вариантов задача формулируется следующим образом. Имеется некоторая заданная функция $\varphi(x) \in L_2(R)$ и отвечающая ей система равномерных сдвигов $\varphi(x - kh)$, $k \in \mathbb{Z}$, $h > 0$. С постоянным шагом h выбираются узловые точки $x_k = kh$, $k \in \mathbb{Z}$. Требуется построить функцию

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \varphi(x - kh), \quad (1)$$

принимаящую в точках x_k заданные значения f_k . Величины c_k – неопределенные коэффициенты, которые необходимо найти.

Технология интерполяция полезна для решения многих важных задач. Одной из них является приближенное решение дифференциальных уравнений, например, методом Адамса [6]. Целью данной работы является обобщение метода Адамса путем использования процедуры интерполяции по системам равномерных сдвигов.

1. Процедура интерполяции

Удобным инструментом для решения интерполяционной задачи является узловая функция.

Определение. [2, 3] Функция $\tilde{\varphi}(x)$, являющаяся линейной комбинацией сдвигов $\varphi(x - kh)$, $k \in \mathbb{Z}$

$$\tilde{\varphi}(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} d_k \varphi(x - kh), \quad (2)$$

называется узловой, если она удовлетворяет набору соотношений

$$\tilde{\varphi}(kh) = \delta_{0k}, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (3)$$

где δ_{0k} – символ Кронекера.

Если в нашем распоряжении имеется $\tilde{\varphi}(x)$, то интерполирующая функция $f(x)$ легко может быть построена по следующей формуле:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} f_k \tilde{\varphi}(x - kh). \quad (4)$$

Узловая функция известна, например, для систем равномерных сдвигов функции Гаусса [2, 3], функции Лоренца (распределение Коши или функция Брейта-Вигнера) [4], контура Фойгта [5] и B -сплайнов [1, 7]. В последнем случае $\tilde{\varphi}(x)$ называется фундаментальным сплайном. Если рассматривать функцию Гаусса, то для нее справедливо следующее утверждение.

Утверждение 1. [2, 3] Функция $\tilde{\varphi}(x)$, определяемая равенством

$$\tilde{\varphi}(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} d_{G,k}(\sigma) \exp\left(-\frac{(x/h - k)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (5)$$

где

$$d_{G,k}(\sigma) = \frac{1}{C(\sigma)} \exp\left(\frac{k^2}{2\sigma^2}\right) \sum_{m=|k|}^{\infty} (-1)^m \exp\left(-\frac{(m+0.5)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (6)$$

$$C(\sigma) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (4m+1) \exp\left(-\frac{(2m+0.5)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (7)$$

удовлетворяет соотношению (3), т. е. является узловой.

Для функции Лоренца известен следующий результат.

Утверждение 2. [4] Функция $\tilde{\varphi}(x)$, определяемая равенством

$$\tilde{\varphi}(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} d_{L,k}(\sigma) \frac{\sigma^2}{\sigma^2 + (x/h - k)^2}, \quad (8)$$

где

$$d_{L,k}(\sigma) = \frac{(-1)^k sh(\sigma\pi)}{\sigma\pi^2} \int_0^{\pi} \frac{\cos(kt)}{ch(\sigma t)} dt, \quad (9)$$

удовлетворяет соотношению (3).

Эти два случая далее будут рассмотрены в качестве примера.

2. Общий случай

Рассмотрим следующую задачу Коши:

$$y'(x) = F(x, y(x)), y(x_0) = y_0, \quad (10)$$

где $F(x, y)$ – некоторая известная функция, обладающая всеми свойствами, необходимыми для существования и единственности решения $y(x)$ в рассматриваемой области [6].

Рассмотрим точки $x_k = x_0 + kh$, $k = 0, 1, 2, \dots$, обозначив $y(x_k) = y_k$. Предположим, что нам известны значения y_0, y_1, \dots, y_i . Для нахождения y_{i+1} как и в методе Адамса [6] воспользуемся соотношением

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x, y(x)) dx. \quad (11)$$

Далее заменим $F(x, y(x))$ интерполирующей функцией $f(x)$, но вместо полиномов будем строить $f(x)$ на основе сдвигов $\varphi(x - kh)$, $k \in \mathbb{Z}$.

Рассмотрим сначала явную схему. Выберем некоторое натуральное число M и по формуле (4) построим интерполирующую функцию $f(x)$, совпадающую с $F(x, y(x))$ в точках x_{i-k} , $k = 0, 1, \dots, M-1$:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{M-1} F(x_{i-k}, y_{i-k}) \tilde{\varphi}(x - (i-k)h). \quad (12)$$

Подставив (12) в (11), придем к соотношению

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{k=0}^{M-1} u_k F(x_{i-k}, y_{i-k}), \quad (13)$$

где числовые коэффициенты u_k определяются следующим равенством:

$$u_k = \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \tilde{\varphi}(x - (i-k)h) dx. \quad (14)$$

Выполнив замену переменных $x = (t+i)h$, получим соотношение

$$u_k = \int_0^1 \tilde{\varphi}((t+k)h) dt. \quad (15)$$

Наконец, подставим в формулу (15) выражение (2):

$$u_k = \sum_{m=-\infty}^{\infty} d_m \int_0^1 \varphi((t+k-m)h) dt. \quad (16)$$

Рассмотрим теперь вариант неявной схемы. Для этого снова обратимся к формуле (11), но используем интерполирующую функцию, построенную по значениям $F(x_{i-k}, y_{i-k})$, $k = -1, 0, 1, \dots, M-2$:

$$f(x) = \sum_{k=-1}^{M-2} F(x_{i-k}, y_{i-k}) \tilde{\varphi}(x - (i-k)h). \quad (17)$$

Рассуждая аналогично, получим соотношение

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{k=-1}^{M-2} u_k F(x_{i-k}, y_{i-k}), \quad (18)$$

где коэффициенты u_k как и раньше определяются формулой (16). Это обстоятельство, которое имеет место, поскольку для интерполяции использовалась система равномерных сдвигов, является достаточно удобным.

Рассмотрим некоторые общие свойства коэффициентов u_k . Во-первых, в отличие от метода Адамса, при добавлении новых точек (увеличении M) не нужно заново пересчитывать все значения u_k . Во-вторых, если функция $\tilde{\varphi}(x)$ – четная, то $u_{-k} = u_{k-1}$, поэтому в неявной схеме $u_{-1} = u_0$. Это нетрудно доказать с помощью формулы (15):

$$u_{-k} = \int_0^1 \tilde{\varphi}((t-k)h)dt = \int_0^1 \tilde{\varphi}((-t+k)h)dt. \quad (19)$$

Чтобы получить требуемое утверждение, осталось выполнить замену переменных $t = -y + 1$:

$$u_{-k} = -\int_1^0 \tilde{\varphi}((y-1+k)h)dy = \int_0^1 \tilde{\varphi}((y+k-1)h)dy = u_{k-1}. \quad (20)$$

3. Системы равномерных сдвигов функций Гаусса и Лоренца

Рассмотрим сначала случай функции Гаусса. Воспользуемся формулами (5), (6) и (16), в которых для удобства вместо u_k будем использовать обозначение $u_{G,k}$:

$$u_{G,k} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} d_{G,m}(\sigma) \int_0^1 \exp\left(-\frac{(t+k-m)^2}{2\sigma^2}\right) dt. \quad (21)$$

Данное выражение можно преобразовать к следующему виду:

$$u_{G,k} = \sigma \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} d_{G,m}(\sigma) \left(\operatorname{erf}\left(\frac{1+k-m}{\sigma\sqrt{2}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{k-m}{\sigma\sqrt{2}}\right) \right). \quad (22)$$

где $\operatorname{erf}(x)$ – функция ошибок [8]

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt. \quad (23)$$

Перейдем к функции Лоренца. Коэффициенты u_k в этом случае мы обозначим $u_{L,k}$. Вместо формулы (21) получим следующее выражение:

$$u_{L,k} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} d_{L,m}(\sigma) \int_0^1 \frac{\sigma^2}{\sigma^2 + (t+k-m)^2} dt. \quad (24)$$

Выполнив интегрирование, придем к соотношению

$$u_{L,k} = \sigma \sum_{m=-\infty}^{\infty} d_{L,m}(\sigma) \left(\operatorname{arctg}\left(\frac{1+k-m}{\sigma}\right) - \operatorname{arctg}\left(\frac{k-m}{\sigma}\right) \right). \quad (25)$$

Ниже в таблице приведены значения коэффициентов u_k для двух рассмотренных случаев при $\sigma = 1$.

Значения коэффициентов u_k при $\sigma = 1$

k	0	1	2	3	4	5
$u_{G,k}$	0.585	-0.126	0.0639	-0.0366	0.0217	-0.0131
$u_{L,k}$	0.551	-0.0646	0.0134	$-2.69 \cdot 10^{-3}$	$6.21 \cdot 10^{-4}$	$-8.56 \cdot 10^{-5}$

Заключение

В данной работе предложена новая модификация метода Адамса с использованием интерполяции по системам равномерных сдвигов. Получены соотношения для коэффициентов, которые необходимы для построения расчет-

ных формул. Рассмотрены варианты явной и неявной схемы. Разумеется, как и в случае с классическим методом Адамса, их можно сочетать друг с другом.

В качестве примера были рассмотрены два частных случая, в которых для интерполяции использовались сдвиги функций Гаусса и Лоренца, но формула (16) носит более универсальный характер. Ключевым моментом является только наличие соотношений, позволяющих рассчитать коэффициенты узловой функции d_k .

В дальнейшем практический интерес представляет выбор оптимального семейства сдвигов, позволяющего добиться наибольшей эффективности метода и его сравнение с классическим вариантом метода Адамса, но это требует отдельного исследования.

Литература

1. Prautzsch H. Bezier and B-Spline Techniques / H. Prautzsch, W. Boehm, M. Paluszny. – Berlin, Heidelberg: Springer, Mathematics and Visualization, 2002. – 304 p.
2. Maz'ya V. Approximate Approximations / V. Maz'ya, G. Schmidt. – New York: AMS Mathematical Surveys and Monographs, 2007. – V. 141. – 350 p.
3. Журавлев М. В. О вычислительных особенностях интерполяции с помощью систем целочисленных сдвигов гауссовых функций / М. В. Журавлев, Л. А. Минин, С. М. Ситник // Научные ведомости БелГУ. – 2009. – № 13(68). – Вып. 17/2. – С. 89-99.
4. О константах Рисса для некоторых систем целочисленных сдвигов / Е.А. Киселев [и др.] // Математические заметки. – 2014. – Т. 96, вып. 2. – С. 239-250.
5. Киселев Е. А. Системы целочисленных сдвигов, порожденные сверткой функций Гаусса и Лоренца / Е. А. Киселев // Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика. – 2016. – № 4. – С. 41-49.
6. Бахвалов Н. С. Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. – Москва: Наука, 1987. – 598 с.
7. Чуи Ч. Введение в вэйвлеты / Ч. Чуи; пер. с англ. Я. М. Жилейкина. – Москва: Мир, 2001 – 412 с.
8. Абрамовиц М. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган; пер. с англ. В. А. Диткина и Л. Н. Кармазиной. – Москва: Наука, 1979. – 832 с.

GENERALIZATION OF THE ADAMS METHOD BY USING INTERPOLATION WITH UNIFORM SHIFT SYSTEMS

E. A. Kiselev, V. A. Ushakov

Voronezh State University

In this paper we propose a new numerical method for solving the Cauchy problem for ordinary differential equations of the first order, solved with respect to the derivative. Its idea is similar to Adams' method: an interpolation procedure is used, but instead of polynomials, a system of uniform shifts of one function is applied. Two versions of the method have been developed - an explicit and an implicit scheme. Several special cases are considered.

Keywords: Adams method, Cauchy problem, system of uniform shifts, interpolation, numerical method.

ИССЛЕДОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ АСИМПТОТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАБОТЫ ОТВЕТСТВЕННОГО УЗЛА РАДИОТЕХНИЧЕСКОГО УСТРОЙСТВА С РЕЗЕРВНЫМИ БЛОКАМИ В СЛУЧАЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ОПАСНОСТИ ВНЕЗАПНОГО ОТКАЗА

Ю. В. Корыпаева

ВУНЦ ВВС «ВВА им. проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
malena1975@mail.ru

Для решения системы уравнений Колмогорова в задаче дублирования ответственного узла радиотехнического устройства несколькими резервными блоками в случае потенциальной опасности внезапного отключения устройства применяется асимптотический метод пограничных функций. Для рассматриваемой задачи найдены основные характеристики надежности, проведен сравнительный анализ с соответствующими характеристиками для системы без резервирования.

Ключевые слова: резервирование, цепи Маркова с конечным числом состояний, сингулярные возмущения, асимптотические разложения.

В работе решается задача резервирования в ситуации вероятных внезапных отказов, вызванных объективными факторами, например, опасностью возникновения короткого замыкания. В математической модели это явление отражено в появлении малого параметра $\varepsilon > 0$ в знаменателях интенсивностей отказов, а стремление ε к нулю интерпретирует ситуацию, при которой интенсивность отказа радиотехнического устройства резко возрастает в силу объективных внешних факторов. При составлении уравнений Колмогорова малый параметр ε появляется в качестве множителя перед производными. В связи с этим систему, полученную при моделировании рассматриваемой задачи справедливо отнести к классу сингулярно возмущенных систем. В настоящее время разработаны разнообразные методы решения задач подобного вида, и они считаются достаточно хорошо изученными.

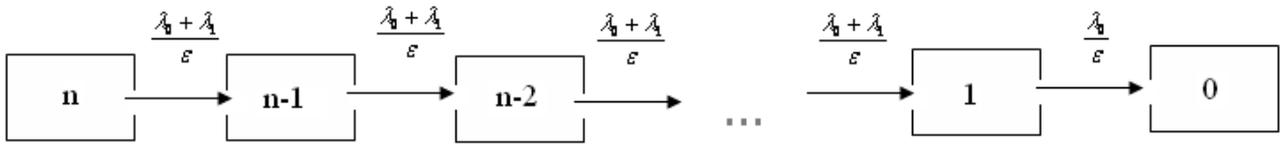
Дублируется важный узел некоторого агрегата, системы. Интенсивность отказов основного устройства – λ_0/ε (в ед. времени), $\varepsilon > 0$ – малый параметр. Имеются $n - 1$ резервных блоков: первый в облегченном резерве, с интенсивностью отказов λ_1/ε (в ед. времени), а остальные – в недогруженном состоянии. После отказа любого из дублирующих блоков один из оставшихся будет функционировать как основной, а некоторый другой будет в облегченном резерве.

Блок, который остается в итоге последним, функционирует как основной до выхода из строя, затем считается, что данный агрегат прекратил свое существование (утратил работоспособность). Необходимо вычислить основные характеристики надежности устройства и провести сравнение их с аналогичными характеристиками для системы без дублирования.

В рассматриваемом примере явление внезапного отказа (по причине изношенности, повышенной влажности, высокой опасности короткого замыкания и т. п.) устройства с дублирующими блоками выражается в появлении малого параметра $\varepsilon > 0$ в знаменателях интенсивностей отказов.

Далее будем использовать обозначения: $\lambda_1 = \lambda_0/\varepsilon$ – интенсивность отказа основного устройства, $\lambda_2 = \lambda_1/\varepsilon$ – интенсивность отказа первого резервного блока, $\lambda_2 = \dots = \lambda_{n-1} = 0$ – интенсивность отказа остальных резервных блоков.

Граф всех возможных состояний системы имеет вид (в прямоугольниках указано количество работающих в данный момент времени приборов):



Система уравнений Колмогорова для рассматриваемой задачи и соответствующие начальные условия имеют вид ([1]):

$$\begin{cases} \frac{dp_n(t)}{dt} = -\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\varepsilon} p_n(t), \\ \frac{dp_{i-1}(t)}{dt} = -\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\varepsilon} p_{i-1}(t) + \frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\varepsilon} p_i(t), \quad i = \overline{3, n}, \\ \frac{dp_1(t)}{dt} = -\frac{\lambda_0}{\varepsilon} p_1(t) + \frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\varepsilon} p_2(t), \\ p_0(t) = 1 - p_1(t) - \dots - p_n(t), \end{cases} \quad (1)$$

$$p_i(0) = 0, \quad i = \overline{1, n-1}, \quad p_n(0) = 1. \quad (2)$$

Здесь $p_i(t), i = \overline{1, n}$, – вероятности того, что функционирует i блоков, $p_0(t)$ – вероятность потери работоспособности агрегата, $p(t) = 1 - p_0(t) = p_1(t) + \dots + p_n(t)$ – функция надежности.

Система (1) может быть также записана в виде сингулярно возмущенной системы с малым параметром при производных:

$$\begin{cases} \varepsilon \frac{dp_n(t)}{dt} = -(\lambda_0 + \lambda_1) p_n(t), \\ \varepsilon \frac{dp_{i-1}(t)}{dt} = -(\lambda_0 + \lambda_1) p_{i-1}(t) + (\lambda_0 + \lambda_1) p_i(t), \quad i = \overline{3, n}, \\ \varepsilon \frac{dp_1(t)}{dt} = -\lambda_0 p_1(t) + (\lambda_0 + \lambda_1) p_2(t), \\ p_0(t) = 1 - p_1(t) - \dots - p_n(t), \end{cases} \quad (3)$$

Будем искать приближенное асимптотическое решение задачи (2) с условиями (3) с помощью асимптотического метода пограничных функций (Васильева А. Б., Бутузов В. Ф., [2]). Согласно этому подходу искомое решение возмущенной системы (3) с начальными условиями (2) следует искать в виде:

$$p_i(t, \varepsilon) = \bar{p}_i(t, \varepsilon) + \Pi p_i(\tau, \varepsilon), \tau = \frac{t}{\varepsilon}, \quad (4)$$

где $\bar{p}_i(t, \varepsilon) = \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \bar{p}_{ij}(t)$ – регулярный ряд, $\Pi p_i(\tau, \varepsilon) = \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \Pi_j p_i(\tau)$ – погранслойный ряд. Погранслойный ряд введен в рассмотрение в связи с тем, что при использовании только регулярного ряда не удается обеспечить выполнение условий (2) [2].

В каждое из уравнений системы (3) формально подставляем разложения (4) и, с учетом того, что $\tau = \frac{t}{\varepsilon}$, а $\frac{d}{dt} \Pi_j p_n(\tau) = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \frac{d}{d\tau} \Pi_j p_n(\tau)$, начинаем приравнивать коэффициенты при одинаковых степенях ε в обеих частях полученных равенств, отдельно зависящие от t и от τ .

Получим следующие асимптотические решения системы (3), которые полностью совпадают с точным решением:

$$p_n(t) = e^{-Lt}, p_{n-1}(t) = Lt e^{-Lt}, p_{n-i}(t) = \frac{L^i t^i e^{-Lt}}{i!}, i = \overline{0, n-2},$$

$$p_1(t) = \frac{L^{n-1} t^{n-1} e^{-\frac{\lambda_0}{\varepsilon} t}}{\lambda_1^{n-1}} - L^{n-1} \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\varepsilon^k t^{n-k-1} e^{-Lt}}{(n-k-1)! \lambda_1^k}. \quad (5)$$

Пользуясь полученными решениями, найдем вероятность потери работоспособности агрегата $p_0(t)$:

$$p_0(t) = 1 - \frac{L^{n-1} t^{n-1} e^{-\frac{\lambda_0}{\varepsilon} t}}{\lambda_1^{n-1}} - \left(1 - \frac{L^{n-1} \varepsilon t^{n-2}}{(n-2)! \lambda_1} \right) e^{-Lt} -$$

$$- \left(\frac{L^{n-2} t^{n-2}}{(n-2)!} - \frac{L^{n-1} \varepsilon^{n-1}}{\lambda_1^{n-1}} \right) e^{-Lt} - \sum_{k=2}^{n-2} \left(\frac{L^{k-1} t^{k-1}}{(k-1)!} - \frac{L^{n-1} \varepsilon^k t^{n-k-1}}{(n-k-1)! \lambda_1^k} \right) e^{-Lt} \quad (6)$$

Замечание. При корректном решении вероятность потери работоспособности $p_0(t)$ должна быть монотонно возрастающей функцией (в этом легко убедиться), а $dp_0(t)/dt$ – это функция плотности распределения вероятностей.

Далее, будем учитывать, что $1 - p_0(t)$ – это вероятность рабочего состояния в момент времени t , а $M(\tau) = \int_0^{+\infty} t p_0'(t) dt = \int_0^{+\infty} t dp_0(t)$ – математическое ожидание времени жизни [3].

Далее, вычислим математическое ожидание времени выхода из строя последнего устройства (среднее время жизни изучаемого объекта):

$$M(\tau) = \int_0^{+\infty} t p_0'(t) dt = \frac{\varepsilon^2}{\lambda_0} \cdot \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^{n-2} + \frac{\varepsilon \cdot (n-1)}{\lambda_0 + \lambda_1} - \frac{\varepsilon}{\lambda_1} \cdot \sum_{k=1}^{n-2} \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^{k-1}. \quad (7)$$

Чтобы понять, является ли $M(\tau)$ возрастающей функцией, оценим разность значений при n и при $n+1$. Легко убедиться, что при $\varepsilon > 1 - \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0 + \lambda_1} \right)^{n-1}$

эта разность положительна и математическое ожидание среднего времени жизни агрегата будет возрастать с увеличением количества резервирующих узлов n . Однако при малых, близких к нулю, значениях ε математическое ожидание среднего времени жизни агрегата возрастать не будет и резервирование в этом случае себя не оправдывает.

Дисперсия времени жизни устройства является одной из основных характеристик надежности. Отметим, что величина $\sigma = \sqrt{D(\tau)}$ дает среднее квадратическое отклонение случайного времени τ выхода из строя последнего устройства от $M(\tau)$. Отметим, что применять дисперсию, как характеристику надежности, есть смысл лишь в случае, когда $\sigma > M(\tau)$ [3]. Получим:

$$\begin{aligned}
 D(\tau) &= \int_0^{+\infty} t^2 p_0'(t) dt - (M(\tau))^2 = 2\varepsilon^2 \cdot \frac{(\lambda_0 + \lambda_1)^{n-3}}{\lambda_1^{n-1}} \cdot \left(\frac{2\lambda_0\lambda_1 + \lambda_1^2}{\lambda_0^2} \right) - \\
 &- \frac{2\varepsilon^2}{\lambda_1(\lambda_0 + \lambda_1)^2} \cdot (\lambda_0 n - \lambda_0 - \lambda_1) - \frac{2\varepsilon^2}{(\lambda_0 + \lambda_1)^2} \cdot \sum_{k=2}^{n-2} \left(k - \frac{(n-k)\varepsilon}{\lambda_1^k} \right) - \\
 &- \left(\frac{\varepsilon^2}{\lambda_0} \cdot \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^{n-2} + \frac{\varepsilon(n-1)}{(\lambda_0 + \lambda_1)} - \frac{\varepsilon}{\lambda_1} - \frac{\varepsilon}{(\lambda_0 + \lambda_1)} \cdot \sum_{k=2}^{n-2} \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^k \right)^2.
 \end{aligned} \tag{8}$$

Важной характеристикой надежности радиотехнического устройства является опасность отказа агрегата [3]. Эта величина отражает надежность объекта в каждый момент времени и может быть интерпретирована как плотностью условной вероятности отказа в данный момент времени, при условии, что до этого момента агрегат работал бесперебойно. Получим:

$$\begin{aligned}
 \lambda(t) &= \frac{p_0'(t)}{1 - p_0(t)} = \left\{ \varepsilon^{n-2} \cdot \lambda_0 \cdot \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^{n-1} \cdot e^{\frac{\lambda_1 t}{\varepsilon}} + \frac{(\lambda_0 + \lambda_1)^{n-1} t^{n-3}}{(n-3)!} \cdot \left(\frac{\varepsilon}{\lambda_1} - 1 \right) - \right. \\
 &- \varepsilon \cdot \frac{(\lambda_0 + \lambda_1)^{n-1} t^{n-2}}{(n-2)!} \cdot (\lambda_0 + \lambda_1 - 1) - \varepsilon^{n-2} \cdot (\lambda_0 + \lambda_1) \cdot \left(\left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^{n-1} - 1 \right) - \\
 &- \sum_{k=2}^{n-2} \left(\frac{\varepsilon^{n-k-2} (\lambda_0 + \lambda_1)^{k-1} t^{k-2}}{(k-1)!} \cdot \left(k - 1 - \frac{(\lambda_0 + \lambda_1)t}{\varepsilon} \right) - \right. \\
 &- \frac{\varepsilon^k \cdot \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^k \cdot (\lambda_0 + \lambda_1)^{n-k-1} t^{n-k-2}}{(n-k-1)!} \cdot \left(n - k - 1 - \frac{(\lambda_0 + \lambda_1)t}{\varepsilon} \right) \left. \right) / \\
 &/ \left\{ \sum_{k=0}^{n-2} \frac{\varepsilon^{n-k-1} (\lambda_0 + \lambda_1)^k t^k}{k!} + \varepsilon^{n-1} \cdot \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^{n-1} \cdot e^{\frac{\lambda_1 t}{\varepsilon}} - \right. \\
 &- L^{n-1} \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\varepsilon^k t^{n-k-1}}{(n-k-1)!} \cdot \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\lambda_1} \right)^k \cdot (\lambda_0 + \lambda_1)^{n-k-1} \left. \right\}.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Получены аналогичные характеристики системы без резервных блоков: вероятность потери работоспособности – $\tilde{p}_0(t) = 1 - e^{-\frac{\lambda_0 t}{\varepsilon}}$, функция плотности вероятности отказов – $\frac{d\tilde{p}_0(t)}{dt} = \frac{\lambda_0}{\varepsilon} e^{-\frac{\lambda_0 t}{\varepsilon}}$, математическое ожидание времени выхода из строя устройства – $\tilde{M}(\tau) = \int_0^{+\infty} t \tilde{p}'_0(t) dt = \frac{\varepsilon}{\lambda_0}$, дисперсия времени жизни агрегата – $\tilde{D}(\tau) = \int_0^{+\infty} t^2 p'_0(t) dt - (\tilde{M}(\tau))^2 = \left(\frac{\varepsilon}{\lambda_0}\right)^2$, опасность отказа агрегата – $\tilde{\lambda}(t) = -\frac{\tilde{p}'_1(t)}{\tilde{p}_1(t)} = \frac{\lambda_0}{\varepsilon}$.

При необходимости, в каждом отдельном случае (при определенном количестве дублирующих блоков) можно вычислить, во сколько раз изменилась та или иная характеристика надежности агрегата с дублированием по отношению к соответствующим характеристикам для системы без дублирования.

Литература

1. Казаков В. А. Введение в теорию Марковских процессов и некоторые радиотехнические задачи / В. А. Казаков. – М.: Сов. радио, 1973. – 232 с.
2. Васильева А. Б. Контрастные структуры в сингулярно возмущенных задачах / А. Б. Васильева, В. Ф. Бутузов, Н. Н. Нефедов // Фундамент. и прикл. матем. 1998. Т. 4. Вып. 3. С. 799-851.
3. Гнеденко Б. В. Математические методы в теории надежности / Б. В. Гнеденко, Ю. К. Беляев, А. Д. Соловьев. – М.: Наука, 1965. – 524 с.

RESEARCH USING ASYMPTOTIC METHODS OF A MATHEMATICAL MODEL OF OPERATION OF THE RESPONSIBLE UNIT OF A RADIO DEVICE WITH BACKUP UNITS IN THE CASE OF A POTENTIAL HAZARD OF SUDDEN FAILURE

J. V. Korypaeva

Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

To solve the Kolmogorov system of equations in the problem of duplicating a critical node of a radio engineering device with several backup units, in the event of a potential danger of a sudden shutdown of the device, the asymptotic method of boundary functions is used. For the problem under consideration, the main characteristics of reliability are found, a comparative analysis with the corresponding characteristics for a system without redundancy is carried out.

Keywords: reservation, Markov chains with finite number of States, singular perturbations, asymptotic expansions.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ КОЛЕБАНИЙ В LCR-ЦЕПИ И ПОИСК ФУНКЦИИ ТОКА

Ю. В. Корыпаева, О. С. Дудкин, А. А. Есен

ВУНЦ ВВС «ВВА имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
malena1975@mail.ru

Строится математическая модель для отыскания функции тока для заданной электрической LCR-цепи. Находится точное решение поставленной задачи, строятся графики решений для различных значений участвующих параметров. Исследуется предельное поведение решения при стремящейся к нулю индуктивности.

Ключевые слова: дифференциальные уравнения, электрическая цепь, малые параметры, сингулярные возмущения.

Одной из наиболее активно развивающихся областей теории дифференциальных уравнений (ДУ) является теория динамических систем (качественная теория ДУ). В первой половине двадцатого века в процессе изучения основных уравнений математической физики была проведена классификация уравнений и систем с частными производными. И. Г. Петровским проведено разделение классов эллиптических, параболических и гиперболических уравнений и систем. Все эти виды задач являются хорошо изученными и существуют различные методы их решения.

При построении математической модели того или иного явления в физике, химии, биологии и других областях, важно соблюдать компромисс между ее максимальной адекватностью изучаемому процессу и возможностью найти аналитическое или численное решение полученной математической задачи. При этом огромную роль приобретают наличие и выполнение теорем существования решений для соответствующего класса ДУ.

К сожалению, не всегда есть возможность найти аналитическое решение полученных при моделировании систем ДУ. Более того, это происходит в подавляющем большинстве случаев. В подобных ситуациях на помощь исследователю приходят обширные возможности численных методов решения ДУ с применением ЭВМ. Кроме того, вычислительный эксперимент порой способствует выявлению тех или иных особых свойств решений, которые позднее дадут толчок или станут фундаментом для дальнейших теоретических исследований.

Рассмотрим одну из задач, которая приводит к ДУ 2-го порядка.

На рис. 1 изображена электрическая цепь. К источнику э.д.с. $E(t)$ подключен контур, который состоит из последовательно соединенных катушки индуктивности L , сопротивления R и конденсатора емкости C [1].

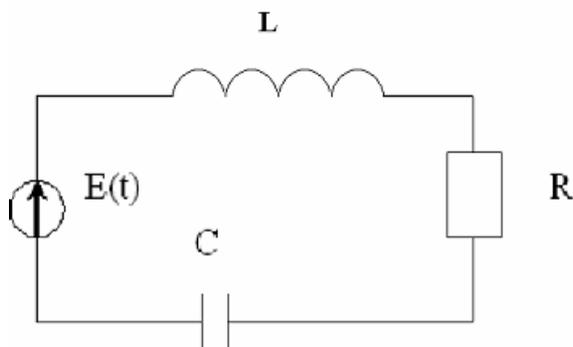


Рис. 1

Найти ток J в цепи как функцию времени t , если в начальный момент времени ток в контуре и заряд конденсатора были равны нулю.

По закону Кирхгофа электродвижущая сила в цепи равна сумме падений напряжений на индуктивности, сопротивлении и емкости:

$$E(t) = U_L(t) + U_R(t) + U_C(t), \quad \text{связанных с током } J \quad \text{равенствами}$$

$$U_L(t) = LJ'(t), U_R(t) = RJ(t), U_C(t) = \frac{1}{C} \int_0^t J(\tau) d\tau.$$

Равенство для $U_C(t)$ получается из соотношения, отражающего связь между током и зарядом конденсатора $Q(t)$: $J(t) = Q'(t) \Rightarrow Q(t) = \int_0^t J(\tau) d\tau + Q_0$, а так

как $U_C = \frac{Q}{C}$, то $U_C = \frac{1}{C} \int_0^t J(\tau) d\tau + \frac{Q_0}{C}$, причем по условию задачи $Q_0 = 0$.

Получим формулу, отражающую связь для тока в цепи в любой момент времени с параметрами L, C, R и э.д.с.: $E(t) = LJ'(t) + RJ(t) + \frac{1}{C} \int_0^t J(\tau) d\tau$.

Далее, продифференцируем обе части последнего равенства по переменной t и получим линейное ДУ второго порядка с постоянными коэффициентами, содержащее искомую функцию J :

$$LJ'' + RJ' + \frac{1}{C}J = E'(t). \quad (1)$$

Теперь рассмотрим следующие два случая.

Случай 1. $E(t) = E = \text{const}, E' = 0$. Если умножить обе части уравнения (1) на L^{-1} , то получаем однородное ДУ:

$$J'' + \frac{R}{L}J' + \frac{1}{LC}J = 0. \quad (2)$$

Заметим, что согласно условию $J(0) = 0$ и в силу $LJ'(0) = E$, а значит $J'(0) = E/L$, и потому начальные условия примут следующий вид:

$$J(0) = 0, J'(0) = E/L. \quad (3)$$

Следовательно, поиск функции тока J в цепи сводится к решению задачи Коши для линейного ДУ (2) с начальными условиями (3).

Для характеристического многочлена уравнения (2) получим корни

$$k_{1,2} = -\frac{R}{2L} \pm \sqrt{\frac{R^2C - 4L}{4L^2C}}.$$

В случае $R^2C - 4L > 0$ оба корня характеристического многочлена вещественны, а значит любое решение уравнения (2) будет представлять собой непериодическую функцию вида $J(t) = C_1 e^{k_1 t} + C_2 e^{k_2 t}$.

В случае $R^2C - 4L = 0$ оба корня характеристического многочлена вещественны и равны между собой, потому любое решение уравнения (2) будет представлять собой непериодическую функцию вида $J(t) = (C_1 x + C_2) e^{k_1 t}$.

Оба эти случая описывают ситуации с апериодическим током в цепи (никаких электрических колебаний в цепи не произойдет).

В случае, когда $R^2C - 4L < 0$, получим $\operatorname{Re} k_1 = \operatorname{Re} k_2 = -\frac{R}{2L} = -\delta$, $\operatorname{Im} k_1 = \operatorname{Im} k_2 = \sqrt{\frac{4L - R^2C}{4L^2C}} = \omega_1$, и общее решение уравнения (2) будет иметь вид

$$J(t) = e^{-\delta t} (C_1 \cos \omega_1 t + C_2 \sin \omega_1 t). \quad (4)$$

Чтобы найти значения коэффициентов C_1 и C_2 , продифференцируем равенство (4) по t :

$$J'(t) = e^{-\delta t} [-\delta(C_1 \cos \omega_1 t + C_2 \sin \omega_1 t) + \omega_1(-C_1 \sin \omega_1 t + C_2 \cos \omega_1 t)].$$

С учетом начальных условий получим, что $J(0) = C_1 = 0$, $J'(0) = -\delta C_1 + \omega_1 C_2 = \frac{E}{L}$. Тогда $C_2 = \frac{E}{L\omega_1}$ и искомое решение

$$J(t) = \frac{E}{L\omega_1} e^{-\delta t} \sin \omega_1 t.$$

Случай 2. Пусть $E(t) = E \sin \omega t \Rightarrow E'(t) = E\omega \cos \omega t \quad (\forall t > 0)$.

Тогда уравнение (2) переходит в линейное неоднородное уравнение

$$LJ'' + RJ' + \frac{1}{C}J = E\omega \cos \omega t. \quad (5)$$

В рассматриваемом случае начальные условия примут вид

$$J(0) = 0, J'(0) = 0. \quad (6)$$

Однородное уравнение (2) соответствует данному неоднородному уравнению (5), его решение

$$J_{00}(t) = e^{-\delta t} (C_1 \cos \omega_1 t + C_2 \sin \omega_1 t).$$

Требуется найти частное решение $J_{\text{чн}}$ неоднородного уравнения. В правой части ДУ (5) стоит функция специального вида и, поскольку корни характеристического многочлена имеют ненулевую вещественную часть, то частное решение $J_{\text{чн}}$ следует искать в виде $J_{\text{чн}}(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t$.

Далее, $J_{\text{чн}}(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t$, $J'_{\text{чн}}(t) = -A\omega \sin \omega t + B\omega \cos \omega t$, $J''_{\text{чн}}(t) = -A\omega^2 \cos \omega t - B\omega^2 \sin \omega t$. Подставляем в (12) и приравняем коэффициенты при $\cos \omega t$, $\sin \omega t$. Получим систему:

$$\begin{cases} -A\omega^2 + \frac{BR\omega}{L} + \frac{A}{CL} = \frac{E\omega}{L}, \\ -B\omega^2 - \frac{AR\omega}{L} + \frac{B}{CL} = 0. \end{cases}$$

Ее решение

$$A = \frac{EL\omega \left(\frac{1}{CL} - \omega^2 \right)}{\left(\frac{1}{CL} - \omega^2 \right)^2 \cdot L^2 + \omega^2 R^2}, \quad B = \frac{E\omega^2 R}{\left(\frac{1}{CL} - \omega^2 \right)^2 \cdot L^2 + \omega^2 R^2}. \quad (7)$$

Таким образом, $J(t) = e^{-\delta t} (C_1 \cos \omega_1 t + C_2 \sin \omega_1 t) + A \cos \omega t + B \sin \omega t$.

Если воспользоваться начальными условиями (6), то находим $c_1 = -A$, $c_2 = \frac{A\delta - B\omega}{\omega_1}$, поэтому окончательно функция тока в рассматриваемой цепи будет определяться выражением:

$$J(t) = e^{-\delta t} \left(-B \cos \omega_1 t - \frac{B(\omega + \delta)}{\omega_1} \sin \omega_1 t \right) + A \cos \omega t + B \sin \omega t, \quad (8)$$

где числа A и B определены соотношениями (7).

График $J(t)$ для разных значений входящих параметров изображен на рис. 2, на более длинном интервале – на рис. 3.

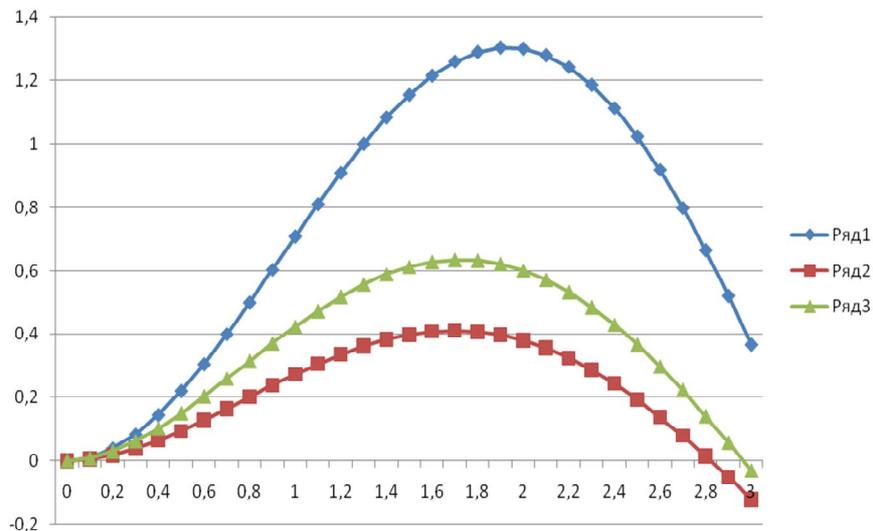


Рис. 2

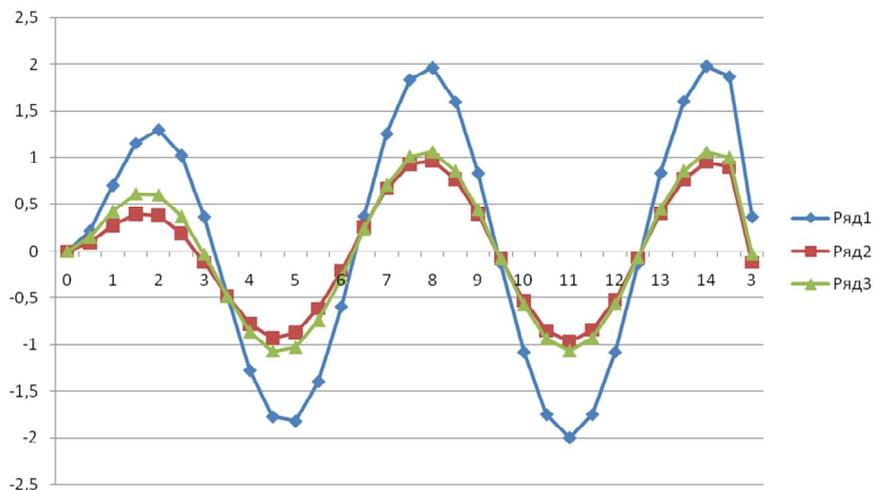


Рис. 3

Анализируя математическую модель, построенную по электрической цепи на рис. 1, в случае, когда индуктивность будет близка к нулю, получим, что уравнения (2) и (5) будут являться сингулярно возмущенными (малый параметр при старшей производной). Числа A и B так же будут близкими к нулю, параметр δ будет стремиться к бесконечности, а это в совокупности повлечет за собой тот факт, что в этом случае ток $J(t)$ в цепи будет, затухая, стремиться к нулю. Иными словами при малых индуктивностях имеем малые токи (прямая зависимость). Данная ситуация справедлива для обоих рассмотренных случаев.

Литература

1. Попов В. П. Основы теории цепей: учебник для вузов / В. П. Попов. – 6-е изд., испр. – М.: Высш. шк., 2007. – 575 с.

MATHEMATICAL MODELING OF THE PROBLEM OF ELECTROMAGNETIC OSCILLATIONS IN THE LCR-CIRCUIT AND SEARCH FOR THE CURRENT FUNCTION

J. V. Korypaeva, O. S. Dudkin, A. A. Esen

Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N. E. Zhukovsky and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

A mathematical model is built to find the current function for a given electrical LCR circuit. An exact solution to the problem is found, and graphs of solutions are constructed for various values of the parameters involved. The limiting behavior of the solution is investigated when the inductance tends to zero.

Keywords: differential equations, electric circuit, small parameters, singular perturbations.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЗНАЧЕНИЙ АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ В МЕТЕОРОЛОГИИ С ПОМОЩЬЮ АНАЛИЗА ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ

Ю. В. Корыпаева, Е. В. Лебедев, А. А. Есен

ВУНЦ ВВС «ВВА имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
malena1975@mail.ru

В работе рассматривается применение метода Хольта-Винтерса для анализа с целью дальнейшего прогнозирования динамики временных рядов значений атмосферного давления в метеорологии. Приводятся основная идея и формулы алгоритма прогнозирования по данному методу, его реализация в MS Excel 2007, изучается точность прогнозирования, обсуждаются достоинства и недостатки применения выбранного метода.

Ключевые слова: временные ряды, прогнозирование, метод Хольта-Винтерса, точность прогнозирования.

Изучение динамики различных показателей в течение времени с целью последующего прогнозирования является одной из самых важных и актуальных проблем математической статистики. Одним из методов для решения подобных задач является анализ временных рядов. Мы можем встретить данные такого рода в самых разнообразных областях человеческой деятельности: в метеорологии, в экономике и т.д. [1].

Анализ временного ряда обычно подразумевает выделение трех компонент: тренд (тенденцию развития), сезонность (влияние периодичности явлений) и шум (случайные факторы) [2].

Одной из главных целей статистического анализа временных рядов является изучение соотношения между закономерностью и случайностью в формировании значений уровней ряда и количественную оценку меры их влияния.

В настоящей работе рассматривается дискретный временной ряд ежедневно фиксируемых значений атмосферного давления в Воронеже в декабре и январе 2019-20 г.

В начале, для полученных данных произведена проверка соответствия следующим требованиям: сопоставимость (совпадение единиц измерения, неизменный шаг наблюдений, временной промежутков), однородность (отсутствие сильных скачков тенденций, нетипичных для данного ряда наблюдений), устойчивость тенденции (превосходство закономерности над случайностью в динамике значений ряда), полнота (наличии минимально допустимого объема выборки).

Для обнаружения аномальных значений наблюдаемого атмосферного давления был использован критерий Ирвина и соответствующие таблицы значений [3]. Рассматриваемая выборка не является аномальной.

Для выяснения наличия тренда использовался критерий «восходящих» и «нисходящих» серий. С помощью этого критерия можно установить постепенное смещение среднего значения в исследуемом распределении (не только мо-

нотонного, но и более общего, например, периодического характера). Для этого исследуется последовательность знаков – плюсов и минусов, в таблице соответственно пишется 1 или –1. Знак «плюс» ставится в случае, когда $x_{t+1} - x_t > 0$, а «минус» при $x_{t+1} - x_t < 0$. Если $x_{t+1} - x_t = 0$, то в таблице пишется 0 (x_t – наблюдения, исходные данные). Если выборка случайна, то в образованной последовательности знаков общее число серий не может быть слишком малым, а их протяженность – слишком большой.

При уровне значимости $0,05 \leq \alpha \leq 0,0975$ критерий имеет вид

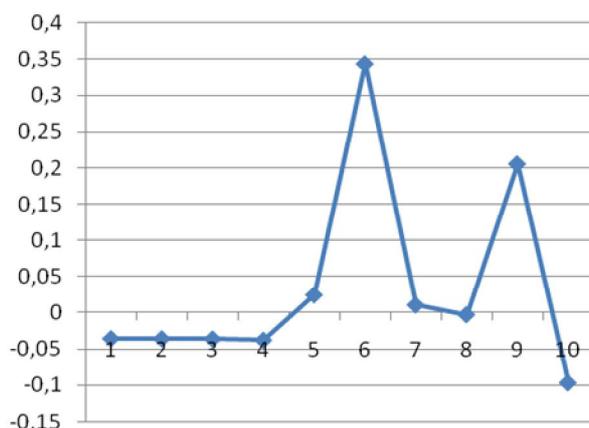
$$\begin{cases} v(n) > \left[\frac{2n-1}{3} - 1,96\sqrt{\frac{16n-29}{90}} \right], \\ K_{\max} < K_0(n), \end{cases} \quad (1)$$

где $v(n)$ – общее число серий, K_{\max} – протяженность самой длинной серии, n – количество наблюдений, а величина $K_0(n)=5, n \leq 26$; $K_0(n)=6, 26 \leq n \leq 153$; $K_0(n)=7, 153 \leq n \leq 1170$.

Если хотя бы одно из неравенств (1) нарушается, то гипотеза о неизменности среднего значения временного ряда отвергается.

Легко проверить, что в рассматриваемой задаче прогнозирования $v(n)=23, K_{\max}=4$, система неравенств (1) имеет вид: $v(n) > 15, K_{\max} < 6$. Оба условия выполняются, гипотеза о неизменности среднего значения временного ряда считается верной.

Для уточнения динамики показателей атмосферного давления было использовано понятие автокорреляции и построена коррелограмма (на горизонтальной оси отмечены величины лагов).



Изучение автокорреляционной функции и вида коррелограммы позволяет определить лаг, при котором автокорреляция наиболее высокая, т.е. можно определить структуру ряда. В рассматриваемом случае самым высоким оказался коэффициент автокорреляции первого порядка, поэтому можно считать, что исследуемый ряд содержит только линейный тренд.

Для осуществления прогноза по исходным данным авторами выбран мультипликативный метод Хольта-Винтерса [4]. Эта модель прогноза содержит три параметра и основана на экспоненциальном сглаживании ряда исходных значений, учете тренда и сезонности (периодичности).

Охарактеризуем кратко общую идею нахождения значений сглаженного уровня, тренда и периодичности. Сглаженный уровень – это базовый уровень значений (s), тренд – это показатель скорости роста (t), разница между сглаженными значениями текущего и предыдущего периода. Для изучения периодичности (p) мы разбиваем данные на периоды длины k и выделяем влияние каждого элемента ($1, 2, \dots, k$) периода на сглаженный уровень. Для более точных расчётов вводится показатель обратной связи.

В рассматриваемом случае взяты стартовые значения $s_1 = x_1$, $t_1 = 0$, $p_1 = 0$. Далее используем формулы мультипликативного метода Хольта-Винтерса:

$$\begin{aligned} s_\tau &= \alpha \cdot (x_\tau - p_{\tau-k}) + (1 - \alpha) \cdot (s_{\tau-1} - t_{\tau-1}), \\ t_\tau &= \beta \cdot (s_\tau - s_{\tau-1}) + (1 - \beta) \cdot t_{\tau-1}, \\ p_\tau &= \gamma \cdot (x_\tau - s_\tau) + (1 - \gamma) \cdot p_{\tau-k}, \\ px_{\tau+h} &= x_\tau + ht_\tau + p_{\tau-k+h}. \end{aligned} \quad (2)$$

Для прогнозирования (px) применялась формула:

$$px_{\tau+h} = x_\tau + ht_\tau + p_{\tau-k+h}. \quad (3)$$

В результате с помощью MS Excel 2007 получены следующие значения для сглаживания, тренда, периодичности при значениях параметров $\alpha = 0.4$, $\beta = 0.1$, $\gamma = 0.5$ (табл. 1).

Функция тренда легко определяется по методу наименьших квадратов. В рассматриваемом случае она имеет вид:

$$Tr(t) = -0,05161t + 749,2452. \quad (4)$$

Результаты прогнозирования в MS Excel 2007 на первые 5 дней января и реально наблюдаемые показатели (можно оценить точность прогноза) находятся в табл. 2.

Мультипликативный метод Хольта-Винтерса, который был выбран для прогнозирования значений атмосферного давления, содержит три параметра и основан на экспоненциальном сглаживании исходных значений, учете тренда и периодичности. Тренд в сочетании с экспоненциальным сглаживанием позволяет выявить направление динамики значений ряда и нивелировать мелкие колебания в ряду динамики значений давления для поиска частных скачков. Сезонность позволяет построить прогноз на будущие периоды с учетом данной сезонности, что наглядно показывает построенный прогноз. Данный метод позволяет строить прогнозы на достаточно длительные временные промежутки. Учет нескольких факторов прогнозирования позволяет сделать прогноз достаточно точным [4].

Таблица 1

Значения для сглаживания, тренда, периодичности

Период	Значения давления	$S\tau$	$t\tau$	$p\tau$
1	747	747	0	0
2	753	749,4	0,24	1,8
3	742	745,864	-0,1376	-1,032
4	750	747,8486	0,074624	0,55968
5	749	748,130	0,09530624	0,714797
6	749	748,249	0,09769866	0,732740
7	747	747,515	0,01450844	0,108813
8	745	746,474	-0,09102896	-0,68272
9	748	747,303	0,00095098	0,007132
10	751	748,780	0,14850692	1,113802
11	752	749,711	0,22683342	1,701251
12	755	751,282	0,36125804	2,709435
13	751	750,302	0,2271351	1,703513
14	749	749,236	0,09781282	0,733596
15	746	747,707	-0,06489638	-0,48672
16	748	747,980	-0,03111329	-0,23335
17	752	749,663	0,14026617	1,051996
18	749	749,061	0,06606937	0,495520
19	749	748,878	0,04116755	0,308756
20	754	750,828	0,2320503	1,740377
21	749	749,540	0,08003311	0,600248
22	744	747,132	-0,16877337	-1,26580
23	744	746,284	-0,23666437	-1,77498
24	746	746,739	-0,1675651	-1,25674
25	746	746,845	-0,14013272	-1,05099
26	743	745,644	-0,24629769	-1,84723
27	743	745,177	-0,26829528	-2,01222
28	749	747,350	-0,02416274	-0,18122
29	758	751,668	0,41004353	3,075326
30	756	752,417	0,44390367	3,329278
31	737	745,185	-0,32369444	-2,42771

Таблица 2

Прогноз и реальные показатели в январе 2020 г.

Дата	Прогноз $px_{\tau+h}$	Реальность
1	750,040111	741
2	749,716416	749
3	749,392722	750
4	749,069027	743
5	748,745333	746

Литература

1. Кириллов В. И. Квалиметрия и системный анализ : учеб. пособие / В. И. Кириллов. – Минск: Новое знание; М.: Инфра-М, 2011. 440 с.
2. Пузанова И. А. Интегрированное планирование цепей поставок: учебник для бакалавриата и магистратуры / И. А. Пузанова; под ред. Б. А. Аникина. – М.: Юрайт, 2014. 320 с.
3. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. – М.: Финансы и статистика, 1986. 366 с.
4. Прогноз по методу экспоненциального сглаживания с трендом и сезонностью Хольта-Винтерса [Электронный ресурс]. – URL: <http://4analytics.ru/prognozirovanie/prognoz-ro-metodu-eksponencialnogo-sglajvaniya-s-trendom-i-sezonnostyu-xolta-vintersa> (дата обращения 12.10.2020).

FORECASTING THE VALUES OF ATMOSPHERIC PRESSURE IN METEOROLOGY USING THE ANALYSIS OF TIME SERIES

J. V. Korypaeva, E. V. Lebedev, A. A. Esen

Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N. E. Zhukovsky
and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

The paper considers the application of the Holt-Winters method for analysis with the aim of further predicting the dynamics of time series of atmospheric pressure values in meteorology. The main idea and formulas of the forecasting algorithm for this method, its implementation in MS Excel 2007 are given, the forecasting accuracy is studied, the advantages and disadvantages of using the selected method are discussed.

Keywords: time series, forecasting, holt-winters method, forecasting accuracy.

ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ РЕЛАКСАЦИИ В ДРЕВЕСИНЕ СТВОЛОВ ДЕРЕВЬЕВ

Н. С. Камалова, Н. Ю. Евсикова, Н. Н. Матвеев, В. И. Лисицын

Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г. Ф. Морозова
rcamel@yandex.ru

В докладе обсуждается проблема исследования состояния древесных растений с помощью электроизмерительных приборов. Анализ результатов мониторинга разности потенциалов вдоль стволов деревьев предполагает зависимость величины разности потенциалов от протекания релаксационных процессов в веществе древесины стволов под влиянием изменения температуры окружающей среды.

Ключевые слова: релаксационные процессы, гетероструктуры, ток ионов солей, принцип работы электроизмерительных приборов.

Диагностика состояния древесных растений в настоящее время носит вербальный характер из-за отсутствия измерительных приборов, которые могли бы это делать с контролируемой точностью. В данной области периодически появляются инновационные разработки, однако, их интерпретация остается темой дискуссий. И говорить о контролируемой точности измерений можно только при использовании электроизмерительных приборов, принцип работы которых имеет ясную физическую интерпретацию. В докладе рассматривается комплексный процесс релаксации древесины стволов при изменении температуры окружающей среды с целью моделирования принципа работы такого электроизмерительного прибора, поскольку наблюдения показали, что вдоль стволов деревьев при изменении температуры окружающей среды возникает разность потенциалов, которая плавно изменяется в течение суток [1-3]. Рисунок демонстрирует типичную корреляцию между величиной изменения температуры окружающей среды и разностью потенциалов в течение светового дня.

Если с большой долей вероятности предположить, что разность потенциалов связана с релаксационными процессами в веществе древесины ствола [4], то в рамках классических представлений можно получить соотношение для моделирования процессов изменения состояния древесного растения при изменении внешних факторов.

Логично считать, что разность потенциалов вдоль ствола зависит от плотности тока ионов j в порах, суммарной площади пор σ и сопротивления R :

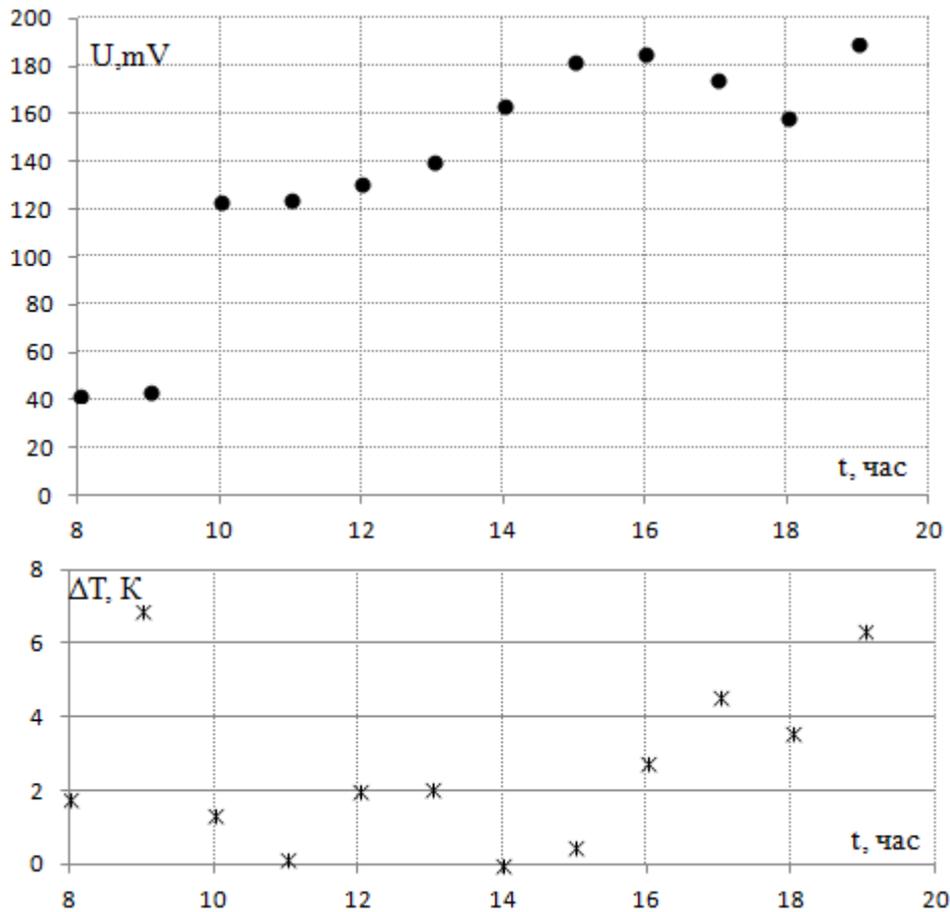
$$U = j\sigma R, \quad (1)$$

где плотность тока определяется концентрацией ионов n в растворе, их подвижностью μ и зарядом q_i :

$$j = n\mu q_i. \quad (2)$$

Тогда относительное изменение плотности тока и разности потенциалов будет определяться при малом изменении состояния пор относительным изменением концентрации ионов

$$\frac{dU}{U} = \frac{dj}{j} = \frac{dn}{n}. \quad (3)$$



Динамика разности потенциалов вдоль ствола березы в течение суток и соответствующее изменение температуры окружающей среды [1-3]

Предположение о том, что рассматриваемый процесс является релаксационным, дает возможность оценивать относительное изменение концентрации при переходе в новое состояние как

$$\frac{dn}{n} = \frac{dt}{\tau}, \quad (4)$$

где τ – время релаксации процесса. Так как перегородки в порах частично проходимы для ионов, а общее количество ионов в порах ограничено [4], то величина η , обратная времени релаксации, не является постоянной и уменьшается с ростом концентрации ионов. Пусть для η справедливо соотношение:

$$\eta = \eta_0 - \kappa n, \quad (5)$$

где κ – величина, характеризующая это уменьшение. С учетом (5) соотношение (4) преобразуется в дифференциальное уравнение с начальным условием $n = n_0$:

$$\frac{dn}{n} = (\eta_0 - \kappa n) dt. \quad (6)$$

Решение уравнения (6) совместно с (3) позволяет получить соотношение зависимости разности потенциалов от времени при изменении внешних условий:

$$U = \frac{U_0 e^{\eta_0 t}}{1 + \zeta n_0 (e^{\eta_0 t} - 1)}. \quad (7)$$

Здесь параметры U_0 , $\zeta = \eta_0/\kappa$ и η_0 зависят от особенностей протекания процессов релаксации, характеристик древесины и условий произрастания дерева. Таким образом, измерение разности потенциалов в стволах деревьев в сочетании с моделированием по базовому соотношению (7) позволит определять эти параметры для различных пород деревьев, условий произрастания и особенностей гетероструктуры стволов. Моделирование можно осуществлять, например, путем минимизации среднеквадратичного отклонения экспериментальных данных от теоретической зависимости (7).

В заключение хотелось бы отметить, что подобный подход будет стимулировать внедрение электроизмерительных технологий в область исследования равновесных состояний не только деревьев, но и более сложных структур биологического происхождения в зависимости от влияния факторов окружающей среды.

Исследования проведены в рамках локального гранта ФГБОУ ВО «Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г. Ф. Морозова», выделенного на проект «Разработка принципа работы цифрового устройства для измерения разности потенциалов в ксилеме стволов древесных растений».

Литература

1. Термополяризационный механизм сокодвижения в период весеннего равноденствия / Н. Н. Матвеев, Н. С. Камалова, Н. Ю. Евсикова, В. И. Лисицын // Лесотехнический журнал. – 2014. – Т. 4, № 4 (16). – С. 26-36.
2. Сканирование электрического поля в стволах древесных растений как метод выявления жизненного состояния / Н. Ю. Евсикова, Н. Н. Матвеев, О. М. Корчагин, Н. С. Камалова, В. Ю. Заплетин // Известия высших учебных заведений. Лесной журнал. – 2008. – № 6. – С. 43-49.
3. The possible mechanism for the water transport in the tree trunks in early spring / N. N. Matveev, A. A. Rychkov, N. S. Kamalova, N. Yu. Evsikova // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. - 2019. - Vol. 226. - 012047. - International Jubilee Scientific and Practical Conference "Innovative Directions of Development of the Forestry Complex" (FORESTRY-2018), Voronezh, Russian Federation, 4-5 October 2018. - URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1755-1315/226/1/012047/pdf>. - DOI: 10.1088/1755-1315/226/1/012047.
4. Лисицын, В. И. Мониторинг надмолекулярной структуры биокompозита с помощью формализованного моделирования / В. И. Лисицын, Н. Н. Матвеев, Н. С. Камалова // В сборнике: Физико-математическое моделирование систем. Материалы XIX Международного семинара. – 2018. – С. 141-144.

ON ONE METHOD OF RESEARCHING THE RELAXATION PROCESSES IN THE WOOD OF TREE TRUNKS

N. S. Kamalova, N. Yu. Evsikova, N. N. Matveev, V. I. Lisicyn

Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G. F. Morozov

The report discusses the problem of studying the state of woody plants with the help of electrical measuring instruments. Analysis of the potential difference along tree trunks monitoring results suggests the dependence of the potential difference value on the course of relaxation processes in the substance of the tree trunks under the influence of changes in the ambient temperature.

Keywords: relaxation processes, heterostructures, salt ion current, principle of electrical measuring devices operation.

РАСЧЕТ СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ ОПОРЫ МОРСКОГО БАЗИРОВАНИЯ

А. А. Котова, Р. А. Бардакова, А. А. Матросов

Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону
anzhelickakotowa@yandex.ru, regina-137@inbox.ru, amatrosov@donstu.ru

В работе рассматривается опора нефтяной платформы морского базирования. На опору действуют различного рода нагрузки: ветровая, волновая, сейсмическая нагрузка и воздействие подводных течений. Выполнен конечно-элементный анализ собственных частот опоры под действием перечисленных нагрузок.

Ключевые слова: опора, конечно-элементный анализ, нагрузки, колебания, собственные частоты.

Опоры нефтедобывающих платформ, располагающиеся в открытом море, подвержены воздействию разнородных нагрузок [1-13]:

- ветровая нагрузка на надпалубные сооружения, передаваемая на опору;
- ветровая нагрузка на часть опоры, находящейся над поверхностью воды;
- воздействие волн на верхнюю часть опоры;
- воздействие поверхностных и придонных течений на нижнюю часть опоры;
- сейсмическое воздействие непосредственно на фундамент опоры;
- навалное давление льда (для нефтяных платформ, располагающихся в северных районах).

Расчет напряжений и деформаций, возникающих в подобных сооружениях, является достаточно сложной задачей [1-13, 16].

В данной работе в линейной постановке:

$$\sigma_{ij,j} = \rho \ddot{u}_i$$

решается задача определения характера напряженно-деформированного состояния опоры, находящейся под действием ряда перечисленных выше нагрузок. Рассматриваются опоры класса мелководных платформ (длина опоры до 50 м).

Рассматриваемая опора является полый конусообразной колонной, суживающейся кверху, и предназначена для хранения добываемого нефтяного продукта. Колонна представляет собой трехслойную кольцевую трубу, у которой наружный и внутренний слои стальные, а средний слой – бетонный. Высота опоры 40 м, верхний диаметр 25 м, нижний 45 м. Примем, что опора имеет жесткую заделку с плитой основания, покоящуюся на грунте.

Определим нормальное значение гармоническое составляющей ветровой нагрузки, действующей на опору, находящейся над поверхностью воды, по формуле

$$\omega_p^n = \omega_0^n k(z) c \varepsilon v,$$

где $\omega_0^n k(z) c$ – детерминистическая составляющая; $k(z)$ – коэффициент, учитывающий изменение ветрового давления для высоты z ; c – аэродинамический

коэффициент; ε – коэффициент пульсации давления ветра на высоте z над поверхностью воды; ν – коэффициент пространственной корреляции пульсаций давления ветра.

Рассмотрим подводные течения, как нестационарный процесс сложной структуры. Обозначим $\chi_0(t)$ и введем два новых квазидетерменических процесса [4]:

$$x_1(t) = \sum_{k=0}^n b_k \cos k \omega t + c_k \sin k \omega t,$$

где a_k, b_k, c_k ($k = 0, 1, 2, \dots, n$) – постоянные статистические независимые случайные коэффициенты. Будем считать, что процессы $\chi_0(t), \chi_1(t)$ статически независимы.

Волны действуют с различными частотами и амплитудами над поверхностью воды. Силовое воздействие волны на участок опоры описывается формулой [1]:

$$F_0 = \rho S (\omega_n^e + \omega_n) + 1/2 C_\chi \rho D |v_n^e| v_n^e,$$

где v_n^e и ω_n^e – проекции относительных скорости и ускорения воды на плоскость, перпендикулярную колонне; ω_n – проекция абсолютного ускорения воды на ту же плоскость; C_χ – коэффициент сопротивления ($C_\chi=1,2$); $S = \pi L(R + r)$ – площадь боковой поверхности колонны.

Численные расчеты для рассматриваемой опоры будут выполнены с использованием программного комплекса конечно-элементного анализа ANSYS 19 R2 [14, 16].

Считаем, что основание опоры покоится на плотном глинистом грунте [8]. Для расчетов примем [9]: скорости продольной и поперечной волны в грунте $V_p = 3500$ (м/с) и $V_s = 2000$ (м/с); плотность $\rho = 2600$ (кг/м³).

Основание опоры может быть подвержено сейсмическому воздействию, которое приводит как к возникновению напряжений и деформаций в колонне, так и вызывает движение нефти, находящейся внутри колонны. Это движение в свою очередь вызывает дополнительное воздействие на стенки колонны. Это гидродинамическое давление P_x найдем по формуле [9]

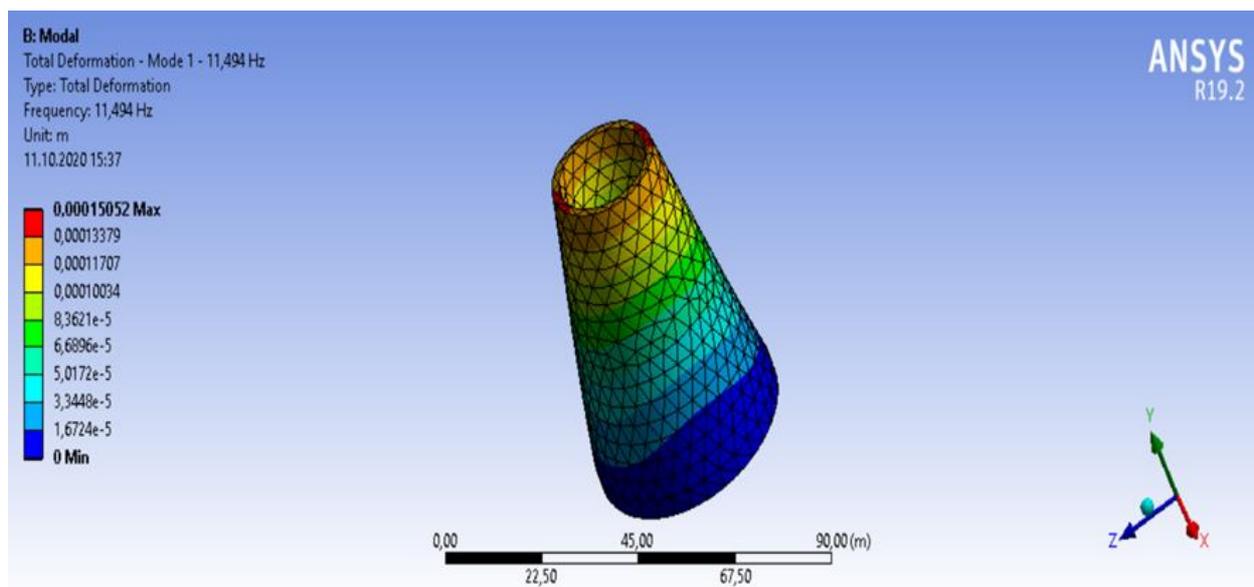
$$P_x = g m_{ж} A_{\max}^{(x)} k_{ж},$$

где g – ускорение свободного падения; $m_{ж}$ – масса жидкости (нефти); $A_{\max}^{(x)}$ – пиковое значение сейсмического ускорения; $k_{ж}$ – коэффициент приведения массы жидкости [9].

Оценим собственную частоту нашей конструкции предположив, что наши колебания направлены вертикально. Рассмотрим вертикальную частоту колебаний [13]:

$$f_z = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_z}{m}} = 28,8 \text{ Гц},$$

где k_z – жесткость всей опорной конструкции; $m_{ж}$ – масса системы (масса колонны плюс масса нефти). В программном комплексе конечно-элементного анализа ANSYS 19 R2 в первом приближении зададим сейсмическое воздействие как случайную нагрузку.



Первая мода колебаний колонны

В работе с помощью конечно-элементного анализа определены первые 10 собственных мод колебаний колонны. На рисунке представлена первая мода колебаний. Выяснено, что под действием случайных нагрузок резонанс в колонне не наступает.

Литература

1. Шеховцов В. А. Обоснование прочности и устойчивости трубобетонных конструкций опорных блоков морских стационарных платформ при квазистатических и периодических внешних воздействиях: автореф. д-ра техн. наук – СПб., 2010. – 37 с.
2. Куликов А. Н. Расчет сооружений на сейсмические воздействия и ветровую нагрузку с пульсационной составляющей. – Волгоград: ВолгГАСУ, 2008. – 91 с.
3. Кисляков Е. А., Матросов А. А. Расчет напряжений цилиндрических опор // Состояние и перспективы развития сельскохозяйственного машиностроения: Сборник статей 11-й международной научно-практической конференции в рамках 21-й международной агропромышленной выставки "Интерагромаш-2018". – Ростов-на-Дону, 2018. – С. 306-308.
4. Гусев А. С., Светлицкий В. А. Расчет конструкций при случайных воздействиях. – М.: Машиностроение, 1984. – 240 с.
5. Бардакова Р. А., Котова А. А., Матросов А. А. Конечно-элементный анализ напряжений опоры морской платформы // Состояние и перспективы развития агропромышленного комплекса: Юбилейный сборник научных трудов XIII межд. науч.-практ. конф., посвященной 90-летию Донского государственного технического университета, в рамках XXIII Агропромышленного форума юга России и выставки "Интерагромаш", 26-28 февраля 2020. Том 1. – ДГТУ, 2020. – С. 376-378.
6. Kislyakov E. A., Matrosov A. A. The Calculation of the Stress-Strain State Supports Construction of Sea-Based // 2018 International Conference on "Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications" (PHENMA 2018), Busan, South Korea, August 9-11, 2018. – P. 196.

7. СП 20.13330.2016 Нагрузки и воздействия. – М: Изд-во стандартов, 2016. – 156 с.
8. Кисляков Е. А., Матросов А. А. Определение напряженно-деформированного состояния опор нефтяной платформы под действием случайных нагрузок // XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. Аннотации докладов, 19-24 августа 2019 г. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2019. – С. 184.
9. Бирбраер А. Н. Расчет конструкции на сейсмостойкость. – СПб.: Наука, 1998. – 255 с.
10. Кисляков Е. А., Матросов А. А. Расчет опоры кольцевого сечения нефтедобывающей морской стационарной платформы на ледовые нагрузки // Инновационные технологии в науке и образовании «ИТНО-2018»: Материалы VI Междунар. науч.-практич. конф., Дивноморское, 5-9 сентября 2018 г. / Ростов-на-Дону, ДГТУ-Принт, 2018. – С. 191-193.
11. Гордеев В. Н., Лантух-Лященко А. И., Пашинский В. А., Перельмутер А. В., Пичугин С. Ф. Нагрузки и воздействия на здания и сооружения. – М.: Издательство Ассоциации строительных вузов, 2007. – 482 с.
12. Попов Н. А. Рекомендации по расчету на действие пульсации ветровой нагрузки. – М.: ЦНИИСК, 2000 – 45 с.
13. Тяпин А. Г. Применение комбинированного асимптотического метода для расчета высотного здания на сейсмическое воздействие: роль взаимодействия с основанием // Сейсмостойкое строительство. Безопасность сооружений. 2018, № 5. – С. 24-28.
14. Кисляков Е. А., Матросов А. А. Конечно-элементный расчет НДС опоры платформы под действием сейсмических нагрузок // Состояние и перспективы развития агропромышленного комплекса: Сборник научных трудов XII-й Международной научно-практической конференции в рамках XXII Агропромышленного форума юга России и выставки "Интерагромаш", 27 февраля – 1 марта 2019 г. / Ростов-на-Дону, 2019. – С. 517-520.
15. СП 38.13330.2012 Нагрузки и воздействия на гидротехнические сооружения (волновые, ледовые и от судов). – М: Изд-во стандартов, 2012. – 116 с.
16. Кисляков Е. А. Матросов А. А. Применение стохастических методов к прочностным расчетам несущих блоков МСП // Интеллектуальные технологии и проблемы математического моделирования: Материалы Всерос. науч. конф. (Дивноморское, 24-26 сентября 2018 г.). / Ростов-на-Дону, ДГТУ, 2018. – С. 39-40.

CALCULATION OF NATURAL FREQUENCIES OF OFFSHORE SUPPORT

A. A. Kotova, R. A. Bardakova, A. A. Matrosov

Don State Technical University, Rostov-on-Don

The work considers the support of the offshore oil platform. Various kinds of loads act on the support: wind, wave, seismic load and the effect of underwater currents. Finite element analysis of eigenfrequency of support under action of the above loads is performed.

Keywords: support, finite element analysis, loads, oscillations, natural frequencies.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ АЛЛИЛЬНОГО РАДИКАЛА
И ЕГО ФТОРЗАМЕЩЕННЫХА. В. Котомкин^{1,2}, Н. П. Русакова¹, Е. М. Чернова¹, В. В. Туровцев²,
Ю. Д. Орлов¹, О. М. Корпусов²¹Тверской государственной университетprospectpobedy@mail.ru²Тверской государственной медицинский университет

Заряды $q(R)$, энергии $E(R)$, объемы $V(R)$ и распределения спиновой плотности $\sigma(R)$ групп радикалов $\text{CH}_2 \simeq \text{CH} \simeq \text{CH}_2$, $\text{CHF} \simeq \text{CH} \simeq \text{CH}_2$, $\text{CH}_2 \simeq \text{CF} \simeq \text{CH}_2$ получены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» и проведено их сравнение. Рассмотрена локализация $\sigma(R)$ и показано её распределение в равных долях по концевым группам.

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

Свободные органические радикалы выступают в качестве интермедиатов при промышленном синтезе множества материалов. Современные технологии синтеза требуют знаний термодинамических свойств всех компонентов реакций, однако для радикалов высокая реакционная способность и малое время существования осложняет экспериментальное определение свойств.

Физико-химические свойства радикалов могут быть получены из распределения электронной плотности $\rho(r)$, которое может быть найдено как экспериментально, так и рассчитано с помощью методов квантовой механики. Процедуры «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) [1] позволяют разбить соединение на «топологические» атомы (Ω) и приписать каждому Ω вклад в общее экстенсивное физическое свойство. «Топологические» атомы могут быть объединены в «топологические группы» (R), где свойства R суммируются из свойств Ω . Однако вклады R , имеющих одинаковую структурную формулу в разных соединениях, не всегда можно считать одинаковыми (т.е. переносимыми). Надежным критерием переносимости R между соединениями служит одинаковое распределение их парциальной электронной плотности $\rho_R(r)$.

Сравнение $\rho_R(r)$ разных фрагментов удобнее всего проводить по таким интегральным электронным параметрам, как заряд $q(R)$, энергия $E(R)$ и объем $V(R)$. Описание электронного строения радикалов требует учета спиновой плотности $\sigma(R)$, равной разности $\rho(r)$ электронов с α и β спиновыми функциями в электронном бассейне R , проинтегрированными по объему бассейна. Анализ $\sigma(R)$ дает возможность указать положение радикального центра как фрагмента с наибольшей концентрацией плотности неспаренного электрона ($\sigma(R) \geq 0,5$) и отнести атому радикального центра свободную валентность. Учет электронного строения молекул и свободных радикалов в феноменологических моделях по-

зволяет повысить эффективность аддитивных методов оценки свойств соединений и расширить рамки их применимости.

Одними из наиболее интересных объектов квантовохимического исследования являются сопряженные свободные радикалы, в которых атом с классической свободной валентностью находится рядом с кратной связью. Электронные свойства гомологического ряда аллильных радикалов вида $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CHCHCH}_2$, где $0 \leq n \leq 5$, рассмотрены в работе [2], распределение спиновой плотности аллила $\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ рассчитано в [3], фторсодержащих соединений с замкнутой оболочкой в [4]. Однако данных по электронному строению фторсодержащих аллильных радикалов в литературе нет. Цель работы – исследование и сравнение электронного строения аллильного радикала и его фторзамещенных.

Равновесная геометрия и $\rho(r)$ аллильного радикала $\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$, а также его фторзамещенных $\text{CHF} \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$ и $\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$ (табл. 1) найдены с помощью программы Gaussian 03 [5] методом B3LYP в базисе 6-311++G(3df,3pd) 6d 10f. Заряды $q(\Omega)$, энергии $E(\Omega)$, объемы $V(\Omega)$ и спиновые плотности топологических атомов Ω найдены численным интегрированием по атомным бассейнам Ω в границах изоповерхностей $\rho(r) = 0,001$ а.е. с помощью программы AimAll [6] и суммированы в параметры групп $\sigma(R)$, где $R = \text{CH}_2, \text{CH}, \text{CHF}, \text{CF}$. Погрешность расчета парциальных зарядов $q(R)$ и энергий $E(R)$ составила не более 0,001 а.е., для объемов $V(R)$ не более $0,1 \text{ \AA}^3$, а для спиновых плотностей $\sigma(R)$ не более 0,01.

Электронные свойства R изученных радикалов представлены в табл. 2; так как свойства обоих концевых групп CH_2 одинаковы и в $\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$, и в $\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$, то в табл. 2 приведены данные только для одной CH_2 каждого соединения.

Центральные группы всех рассмотренных радикалов имеют избыточную плотность β электронов, а избыточная электронная плотность α электронов в равной степени делится между концевыми группами (табл. 2). При этом распределение $\sigma(R)$ не изменяется при замене одного из атомов водорода на фтор.

Добавление в аллильный радикал фтора приводит к значительному перетеканию в его сторону электронной плотности (без изменения спиновой плотности R). Это следует из парциальных зарядов (табл. 2). Так, $q(\text{CH}_2)$ и $q(\text{CH})$ в $\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CHF}$ более положительны, чем в $\text{CH}_2 \approx \text{CH} \approx \text{CH}_2$, в то же время при нахождении в центральной группе $\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$ фтор оказывает большее влияние на соседние группы, и абсолютное значение $q(\text{CF})$ превосходит $q(\text{CHF})$ в два раза (табл. 2).

Индуктивное влияние фтора во фтораллильных радикалах так же проявляется в снижении объемов V и абсолютных значений энергии E групп по сравнению с соответствующими фрагментами аллильного радикала (табл. 2).

Анализ электронного строения аллильного радикала и его фторзамещенных показывает, что замена одного из атомов Н на F приводит к существенному перераспределению $\rho(r)$ в соединении. Это проявляется в стягивании ко фтору отрицательного заряда, а также в снижении объема и энергии соседних групп.

Сравнение $q(\Omega)$, $E(\Omega)$, $V(\Omega)$ показывает, что наибольшее влияние фтор оказывает, находясь в центральном положении ($\text{CH}_2 \approx \text{CF} \approx \text{CH}_2$). Из всего этого следует, что вклады свойств отдельных фрагментов фтораллилов не являются переносимыми. При этом наличие фтора не оказывает влияния на делокализацию неспаренного электрона. Полученное распределение $\sigma(R)$ в сопряженных радикалах не позволяет отнести радикальный центр конкретным фрагментам.

Таблица 1

Аллильный радикал и его фторзамещенные

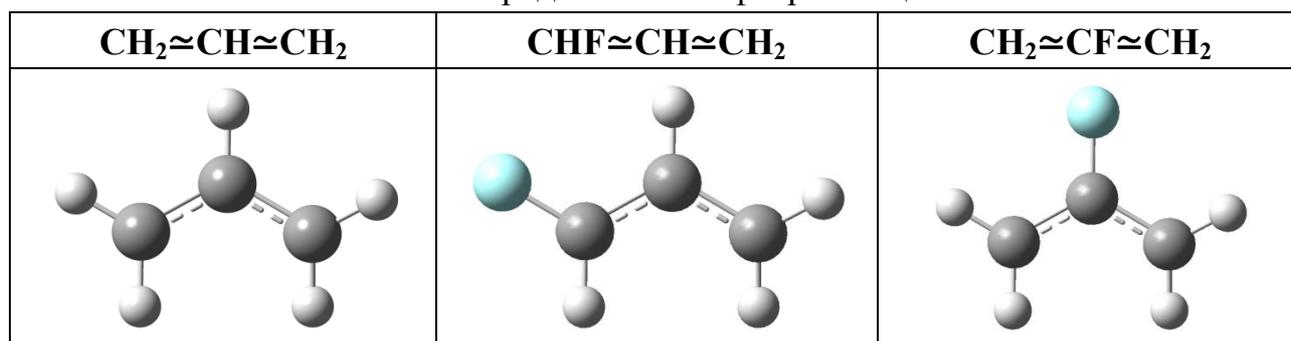


Таблица 2

Электронные свойства групп аллильного радикала и его фторзамещенных

	Спиновая плотность групп $\sigma(R)$			
	CH₂	CH	CF	CHF
CH₂≈CH≈CH₂	0,56	-0,12		
CH₂≈CH≈CHF	0,55	-0,12		0,57
CH₂≈CF≈CH₂	0,56		-0,11	
	Заряды групп $q(R)$, в а.е.			
	CH₂	CH	CF	CHF
CH₂≈CH≈CH₂	-0,012	0,025		
CH₂≈CH≈CHF	0,008	0,075		-0,083
CH₂≈CF≈CH₂	0,084		-0,167	
	Объем групп $V(R)$, в Å ³			
	CH₂	CH	CF	CHF
CH₂≈CH≈CH₂	29,88	19,76		
CH₂≈CH≈CHF	29,82	19,27		34,87
CH₂≈CF≈CH₂	29,06		25,86	
	Энергия групп $-E(R)$, в а.е.			
	CH₂	CH	CF	CHF
CH₂≈CH≈CH₂	39,300	38,710		
CH₂≈CH≈CHF	39,233	38,658		138,694
CH₂≈CF≈CH₂	39,226		138,136	

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. Chevreaux H. // Chemical Physics Letters, 2004, N. 400, pp. 59–61
4. Котомкин А. В., Русакова Н. П., Туровцев В. В., Орлов Ю. Д. // Вестник ТвГУ. Серия: Физика. 2014. № 1. С. 35-42.
5. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 03 (Revision E 0,1 SMP), Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007,
6. AIMAll (Version 11.09.18. Professional), Todd A. Keith, 2010 (<http://aim.tkgristmill.com>)

ELECTRON STRUCTURE OF THE ALLYL AND FLUOROALLYL RADICALS

A. V. Kotomkin^{1,2}, N. P. Rusakova¹, E. M. Chernova¹, V. V. Turovtsev²,
Yu. D. Orlov¹, O. M. Korpusov²

¹Tver State University

²Tver State Medical University

Charge $q(R)$, energy $E(R)$, volume $V(R)$ and spin density distribution $\sigma(R)$ in $\text{CH}_2 \simeq \text{CH} \simeq \text{CH}_2$, $\text{CHF} \simeq \text{CH} \simeq \text{CH}_2$ and $\text{CH}_2 \simeq \text{CF} \simeq \text{CH}_2$ radicals was obtained by the "quantum theory of atoms in molecules". The localization of $\sigma(R)$ was considered and its equally splitting between the end groups was shown.

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

ВЕКТОРИЗАЦИЯ МЕТОДА «ЧАСТИЦА-ЧАСТИЦА» ДЛЯ УЧЕТА КУЛОНОВСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

П. О. Медакин, А. Г. Шеин, А. И. Пономарев

Волгоградский государственный технический университет
pawel.med@yandex.ru

В работе рассматривается векторизация метода частица-частица для учета пространственного заряда в задачах динамики пучков и потоков заряженных частиц. Показано, что векторизация вычислений позволяет существенно повысить производительность. Проведено сравнение и оценка временных затрат с учетом ускорения за счет распараллеливания на ядра процессора, автовекторизации и векторизации с помощью интринсиков.

Ключевые слова: векторизация вычислений, автовекторизация, интринсик, OpenMP, «частица-частица».

В большом количестве задач современной физической электроники требуется проведение численных расчетов динамики пучков и потоков заряженных частиц. К таким задачам, например, относится разработка и модернизация масс-анализаторов, ионной и электронной оптики, а также СВЧ генераторов и усилителей. При этом на точность работы данных приборов существенное влияние оказывает нелинейный параметр – поле пространственного заряда.

Реальные физические модели динамики заряженных частиц включают огромное количество взаимодействующих друг с другом элементов, поэтому актуальной остается проблема повышения производительности вычислений.

Выбор модели учета пространственного заряда производится с помощью двух главных критериев: вычислительная сложность и точность расчетов. Наиболее распространенными методами, использующимися в задачах динамики потоков и пучков заряженных частиц, являются методы «частица-частица» и «частица-ячейка».

Данная работа посвящена векторизации метода «частица-частица». В соответствии с названием, в методе «частица-частица» (PP) взаимодействующие объекты представляются в виде отдельных частиц, при этом учитываются воздействия со стороны каждой частицы на исследуемую. Модель позволяет описывать взаимодействия, описываемые произвольными уравнениями, с высокой степенью достоверности между любыми объектами. Основным недостатком метода является большая вычислительная сложность, так как необходимо учесть взаимодействие между каждой парой частиц, сложность алгоритма получается квадратичной. Однако, чтобы снизить сложность расчетов и увеличить производительность, зачастую метод модифицируется для каждой отдельной задачи и/или используются программные методы ускорения вычислений [1-4].

В качестве тестовой задачи будем рассматривать разлет многокомпонентного ионного пучка с заданной первоначальной плотностью пространственного заряда в течение одной наносекунды с шагом $\Delta t = 10^{-12}$ с.

Уравнение движения имеет следующий вид:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F},$$

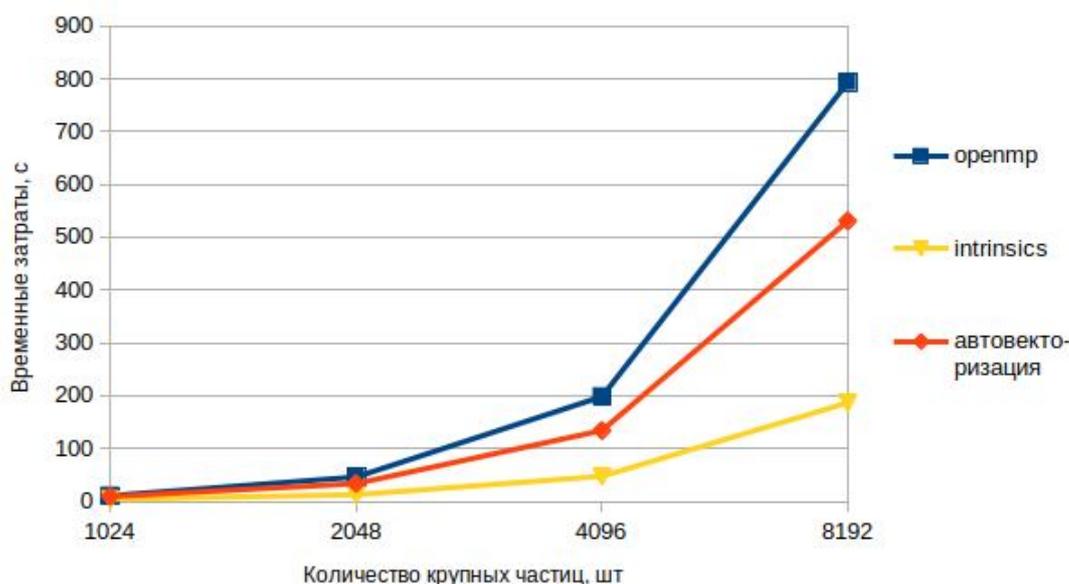
где F – силы кулоновского взаимодействия между частицами. Для численного решения дифференциального уравнения используется классический для данного рода задач метод Рунге – Кутты четвертого порядка.

В силу того, что расчет кулоновских взаимодействий и интегрирование уравнений движения для отдельных частиц проходит независимо друг от друга их можно провести в различных потоках или процессах, что позволит не только использовать многоядерность современных процессоров, но и использовать векторные операции.

Векторизация может быть организована различными способами [5]:

- ассемблерные вставки;
- векторные операции и типы данных в языке программирования (intrinsics);
- директивы компилятора;
- автовекторизация;
- векторизованные библиотеки;

Сравним и оценим временные затраты численной реализации задачи с учетом ускорения за счет: распараллеливания на ядра процессора, автовекторизации и векторизации с помощью интринсиков. Для организации многопоточности будем использовать технологию OpenMP, автовекторизации – инструкции к компилятору gcc. Векторизацию с помощью интринсиков осуществляем с помощью набора инструкций SSE, AVX и AVX2 с длиной регистра 256 бит [6].



Сравнение временных затрат решения задачи о разлете ионного пучка с учетом ускорения за счет распараллеливания на ядра процессора, автовекторизации и векторизации с помощью интринсиков

На рисунке представлены временные затраты работы трех вариантов программы в зависимости от количества обчитываемых крупных частиц. Видно,

что векторизация позволяет существенно (около 4 раз) уменьшить время расчета.

Литература

1. Рошаль, А. С. Моделирование заряженных пучков / А. С. Рошаль. – Москва: Атомиздат, 1979. – 224 с.
2. Белоцерковский, О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред / О. М. Белоцерковский. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва: Физматлит, 1994. – 448с.
3. Хокни, Р. Численное моделирование методом частиц: пер. с англ. / Р. Хокни, Дж. Иствуд. – Москва: Мир, 1987. – 640 с.
4. Григорьев, Ю. Н. Численное моделирование методом частицы в ячейках / Ю. Н. Григорьев, В. А. Вшивков, М. П. Федорук. – Новосибирск: Издательство СО РАН, 2004. – 360 с.
5. О векторизации алгоритма Монте-Карло / Д. В. Завьялов [и др.] // Математ. физика и компьютер. моделирование. – 2020. – Т. 23. – № 1. – С. 13-21.
6. Intrinsic Guide <https://software.intel.com>

VECTORIZATION OF THE METHOD OF «PARTICLE-PARTICLE» FOR ACCOUNTING FOR COULOMB INTERACTIONS

P. O. Medakin, A. G. Shein, A. I. Ponomarev

Volgograd State Technical University

In this paper, we consider a vectorization of the method of particle-particle to account for the spatial charge in problems of beam dynamics and charged particle flow. It is shown that vectorization of calculations can significantly improve performance. A comparison and estimation of time costs is made, taking into account acceleration due to parallelization to processor cores, autovectorization, and vectorization using intrinsics.

Keywords: vectorization of calculations, autovectorization, intrinsics, OpenMP, “particle-particle”.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ КАПЕЛЬ ВОДОНЕФТЯНОЙ ЭМУЛЬСИИ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Ю. Г. Смирнов

Ухтинский государственный технический университет
yusmirnov@ugtu.net

Выполнено теоретическое рассмотрение поведения изолированной сферической капли эмульсии типа вода в нефти во внешнем электрическом поле. На основе численного моделирования получена зависимость собственной частоты осцилляции эмульсионной капли от ее радиуса при изменении напряженности внешнего электрического поля.

Ключевые слова: численное моделирование, водонефтяная эмульсия, осцилляция, электрическое поле.

Решению задачи о поведении изолированной проводящей жидкой капли во внешнем электрическом поле были посвящены работы многих исследователей, занимающихся фундаментальными и прикладными проблемами в различных областях науки и техники: от деления атомных ядер (капельная модель ядра), до физики облаков, проблемах сепарации и массообмена и т.д. [1, 2].

Данная модель в принципе может быть также применена и к теоретическому описанию поведения эмульсионных капель при электрокоалесценции водонефтяной эмульсии в процессе обезвоживания нефти в электродегидраторках [3].

Используя данный подход, в качестве физической модели будем считать, что водонефтяная эмульсия при отсутствии внешнего электрического поля представляет собой совокупность невязких проводящих капель воды сферической формы, плавающих в непроводящей жидкости.

Положим, что плотность содержимого капли будет равна ρ , плотность вмещающей жидкости (нефти) – ρ_0 , диэлектрическая проницаемость среды – ϵ . Радиус капли – r , коэффициент поверхностного натяжения – σ .

Как показано в работах [1, 2], во внешнем электрическом поле (при воздействии на систему в виде ступенчатого скачка напряженности) такие капли осциллируют с собственной частотой ω_c .

При этом считается, что силой тяжести можно пренебречь по сравнению с силой поверхностного натяжения. Математически данное условие означает, что число Бонда (критерий подобия в гидродинамике, определяющий соотношение между силой тяжести и силой поверхностного натяжения)

$$Bo = \frac{gr^2(\rho - \rho_0)}{\sigma} \ll 1. \quad (1)$$

Здесь g – ускорение свободного падения.

Число Бонда применяется для характеристики формы капель жидкости, движущихся в объёме другой жидкости.

Подставляя в формулу (1) фактические значения для водонефтяной эмульсии, получим для эмульсионных капель радиусом менее 20 мкм число Бонда $Bo = 10^{-6} \ll 1$.

Фенг и Бёрд [2] показали, что при условии $Vo = 0$ для проводящих капель сферической формы не несущих поверхностный заряд в случае ступенчатого скачка внешнего электрического поля ($E_1 = 0, E_2 \ll E_c$, где E_c – критическая напряженность электрического поля), справедлива формула:

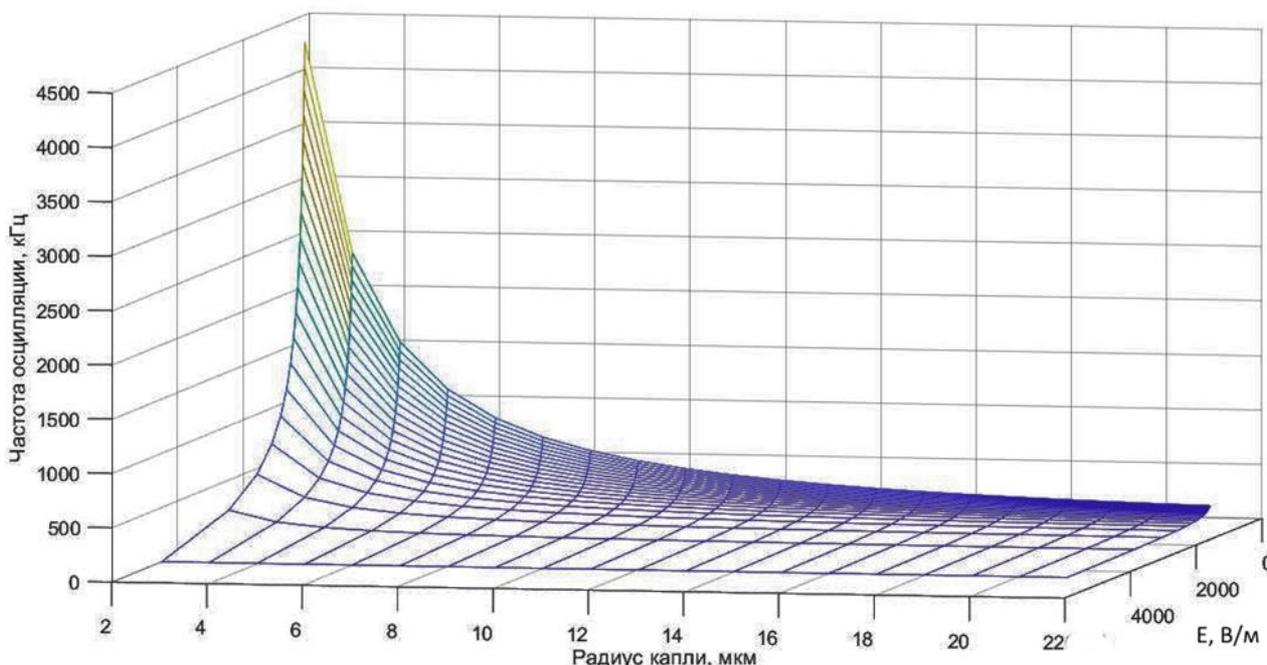
$$\omega_c = \sqrt{\frac{8\sigma}{\rho r^3} \left(1 - 1.382 \frac{\epsilon r E^2}{\sigma}\right)}. \quad (2)$$

При увеличении напряженности внешнего электрического поля и приближении ее к значению

$$E_c = \sqrt{\frac{\sigma}{1.382 \epsilon r}} = 0,85 \sqrt{\frac{\sigma}{\epsilon r}} \quad (3)$$

частота осцилляций ω_c стремится к нулю. Капли под влиянием сильного поля деформируются и происходит их разрыв.

Рассчитанная в пакете Matlab зависимость собственной частоты осцилляции капли эмульсии от ее радиуса при изменении напряженности внешнего электрического поля приведена на рисунке.



Зависимость собственной частоты осцилляции эмульсионной капли от ее радиуса при изменении напряженности внешнего электрического поля E

Для моделирования использовались следующие параметры водонефтяной эмульсии: $\sigma = 0,015$ Н/м, $\rho = 1000$ кг/м³.

Как видно из полученного рисунка, укрупнение капель эмульсии приводит к снижению собственной частоты их осцилляции.

Как известно [4-6], при глубоком обезвоживании нефти особенно эффективно процесс укрупнения эмульсионных капель происходит при их поляризации в электрическом поле и последующем соударении друг с другом под действием сил электрического притяжения (электрокоалесценция).

В сильном электрическом поле крупные капли деформируются и вытягиваются вдоль направления поля, что может привести к их разрыву. Указанный эффект может произойти, когда действие сил электрического поля на поляризационные заряды на поверхности капель превысит силы поверхностного натяжения, препятствующие разрыву капель.

При поле E , приближающемся к его критическому значению E_c , капли эмульсии деформируются и становятся менее упругими. При этом снижается частота их осцилляции. Крупные капли в сильном электрическом поле подвергаются деформации, вытягиваются вдоль направления поля, что в конечном счете может привести к их разрыву. Такой эффект происходит в том случае, когда действие сил электрического поля на поляризационные заряды на поверхности капель начинает превышать силы поверхностного натяжения.

Как следует из приведенных выше результатов, избежать отрицательного явления разрыва укрупняющихся в результате электрокоалесценции эмульсионных капель возможно, если осуществлять постоянный мониторинг частоты их осцилляции, что позволит контролировать динамику укрупнения эмульсионных капель и выбрать оптимальный режим электрокоалесценции для эффективного обезвоживания нефти.

Литература

1. Basaran Osman A., Patzek Tadeusz W., Benner Robert E., Jr. and Scriven L. E. Nonlinear Oscillations and Breakup of Conducting, Inviscid Drops in an Externally Applied Electric Field // *Ind. Eng. Chem. Res.* 1996, V.34.– pp. 3454-3465.
2. Feng, J. Q., Beard, K. V. Small-amplitude oscillations of electrostatically levitated drops. *Proc. R. SOC. London*, 1990, A 430.– pp.133-150.
3. Баткин И. С., Смирнов Ю. Г. Моделирование процесса мониторинга параметров эмульсии в электрическом поле в реальном времени // *Физико-математическое моделирование систем: Матер. IX Международного семинара. Воронеж, 30 ноября - 1 декабря 2012 г., Воронеж: ВГТУ, 2012, ч.3.– С.7-11.*
4. Eow John S., Ghadiri Mojtaba, Sharif Adel O., Williams Trevor J. Electrostatic enhancement of coalescence of water droplets in oil: a review of the current understanding // *Chemical Engineering Journal*, 2001. V.84. – pp.173–192.
5. Gestblom B., Fordedal H. and Sjöblom J. W/O Emulsions in High Electric Fields as Studied by Means of Dielectric Spectroscopy // *Journal of Dispersion Science & Technology*. 1994. V.15. – pp. 449-464.
6. Гуреев А. А. Абызгильдин А. Ю., Капустин В. М., Зацепин В. В. Разделение водонефтяных эмульсий: Учебное пособие. – М.: ГУП Изд-во «Нефть и газ» РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 2002. – 95 с.

NUMERICAL SIMULATION OF WATER-OIL EMULSION DROPLETS OSCILLATION IN AN ELECTRIC FIELD

Yu. G. Smirnov

Ukhta State Technical University

The theoretical consideration of the behavior of an isolated spherical drop of water-in-oil emulsion in an external electric field is carried out. On the basis of numerical simulation, the dependence of the fundamental frequency of oscillations of an emulsion droplet on its radius is obtained when the strength of the external electric field changes.

Keywords: numerical modeling, water-oil emulsion, oscillation, electric field.

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКОЕ ДЕЙСТВИЕ НА ПРОВОДНИК ФРОНТОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ИМПУЛЬСА

В. И. Стащенко¹, О. Б. Скворцов^{1,2}, О. А. Троицкий¹

¹Институт машиноведения им. А. А. Благонравова РАН, Москва

²Научно-технический центр «Завод балансировочных машин», Москва
vis20-11@rambler.ru

Изучены вибрации, созданные в образцах как одиночными электрическими импульсами, так и чередующейся полярности. Установлено, что вибрации формируются в поверхностном слое проводника в начальные моменты изменения приложенного электрического импульса. Они меняют свое направление при изменении направления приложенного электрического импульса. Наблюдаемые процессы явно зависят от полярности электрического импульса.

Ключевые слова: электрический импульс, вибрация, деформации, поверхностный слой, скин-эффект, пинч-эффект.

Прохождение импульсов тока высокой плотности по проводнику сопровождается звуковыми ударами. Сила ударов и их частота определяется амплитудой и частотой тока. Механические ударные процессы связаны с преобразованием энергии приложенного электрического импульса в энергию упругих или пластических деформаций проводника. Силовые действия электрического импульса на проводник, ведет к упругим напряжениям в нем [1]. Силовое действие электрического импульса на проводник часто считается результатом действия пинч-эффекта [1-3]. Пинч- и скин-эффекты изучены теоретически в рамках общей расчетной схемы, при этом считается, что они связаны с взаимодействием тока через проводник и магнитным полем этого тока [1, 2].

Скин-эффект объясняется возникновением вихревого электрического поля электромагнитной индукции E (самоиндукции), которое компенсирует приложенное внешнее электрическое поле приложенное к проводнику. Электродвижущая сила самоиндукции (ЭДС) \mathcal{E} пропорциональна скорости изменения магнитной индукции $dB/dt = \mu\mu_0 dH/dt$ ($\mathcal{E} \sim L dB/dt$). Максимальная величина ЭДС, противодействующая внешнему электрическому полю, вызывающему изменение магнитной индукции наблюдается в центре проводника, а минимальная величина на его поверхности. Поле ЭДС самоиндукции усиливает ток у поверхности (ускоряя электроны проводимости) и ослабляет его на оси проводника. Ток сначала появляется на поверхности проводника, а затем постепенно нарастает в более глубоких слоях и в последнюю очередь на оси проводника [4]. Поскольку за время скин-эффекта большая центральная часть проводника слабо участвует в переносе электрических зарядов, то и упругие деформации во время действия скин-эффекта в основном возникают лишь в поверхностном слое проводника.

Пинч-эффект продолжается в течение всего времени действия электрического импульса, а действие скин-эффекта ограничено временем изменения электрических и магнитных полей. Силы и деформации связанные с пинч-эффектом не зависят от полярности электрического импульса и пропорциональны квадрату величины тока. Механизмы, формирующие динамические деформации в металле при действии электрических импульсов до конца не изучены [1-3]. Гипотезы, описывающие механизмы возникновения деформаций при пинч-эффекте предполагают неполярный характер действия тока и не должны зависеть от знака приложенного электрического напряжения [1, 2].

Целью работы было установление связей скин- и пинч-эффектов с механическим откликом проводника на действие электрических импульсов.

Результаты экспериментов и их обсуждение

При воздействии импульсов тока длительностью более нескольких сотен микросекунд, фронт и спад импульса тока вызывали практически независимые колебательные процессы в стержне из меди марки М1 диаметром 3 мм, что иллюстрируется зависимостями, представленными на рис. 1.

Запись сигналов вибрации и магнитного поля при пропускании тока через проводник производилась с малогабаритных высокочастотных трехкомпонентных пьезоэлектрических акселерометров АП20 и MEMS датчиков Холла DRV5053 в полосе частот до 50 КГц, с последующим анализом механического действия импульсного тока при исключении влияния электрических наводок и помех на измерительные цепи [5]. Датчики вибрации крепились на образце с помощью клея через изолирующую прокладку.

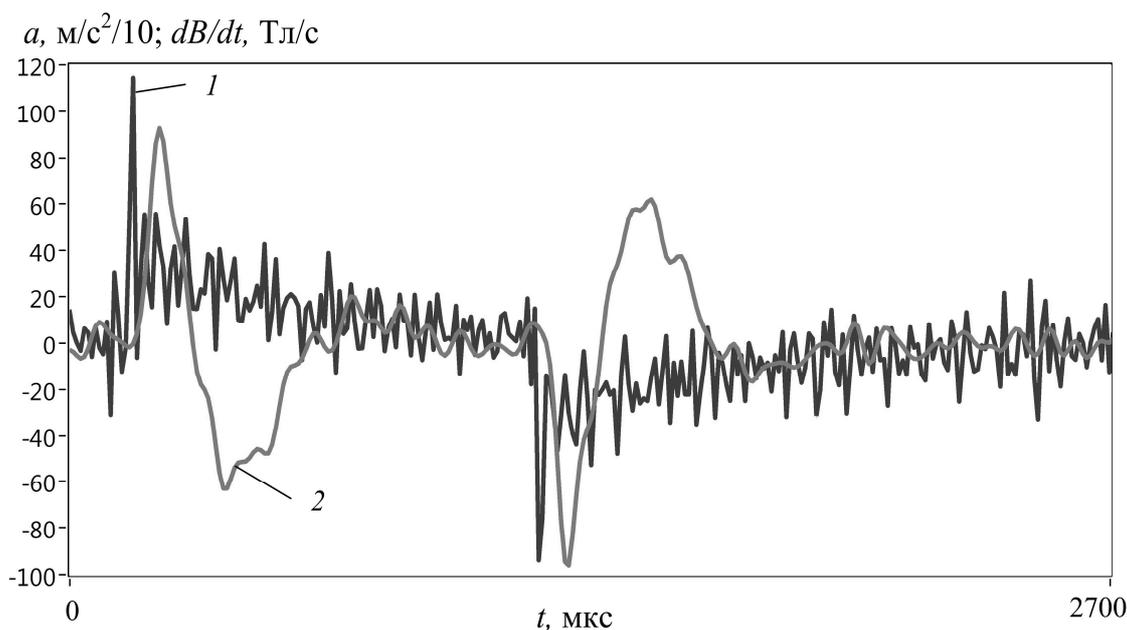


Рис. 1. Производная магнитного потока (1) и ускорение поперечной вибрации (2) при воздействии импульса тока амплитудой 1000 А длительностью 1006 мкс на медный проводник диаметром 3 мм длиной 150 мм

Экспериментальные результаты показали, что изменения в колебательном процессе, возникающие после воздействия переднего фронта импульса успевают практически затухнуть до момента прихода заднего фронта. Амплитуда и размах поперечной составляющей вибрационного ускорения слабо зависят от длительности электрического импульса. Сокращение длительности электрического импульса вызывает существенное увеличение амплитуды и размаха поперечной вибрации, а затем быстрое их уменьшение, что связано с интерференцией вибрационных процессов генерируемых в начальные моменты переднего и заднего фронтов электрического импульса [6, 7].

Синхронная запись сигнала магнитной индукции и сигналов ускорения осевых и поперечных составляющих вибрации дал возможность установить, что в возбуждении колебаний проводника существенен кратковременный (менее 10 мкс) быстрый рост и быстрый спада механического силового импульса, поскольку после его окончания колебания представляют собой затухающие колебания, не зависящие от протекающих электрических процессов. Именно «короткая» начальная часть переднего, и заднего фронтов оказывает сильное воздействие на возбуждаемые колебания. Намного меньше и слабее влияет на вибрации основная часть электрического импульса.

На рис. 2 приведены зависимости поперечной составляющей вибрационного ускорения a сигналов и кольцевой компоненты магнитной индукции B поля вокруг проводника из стали.

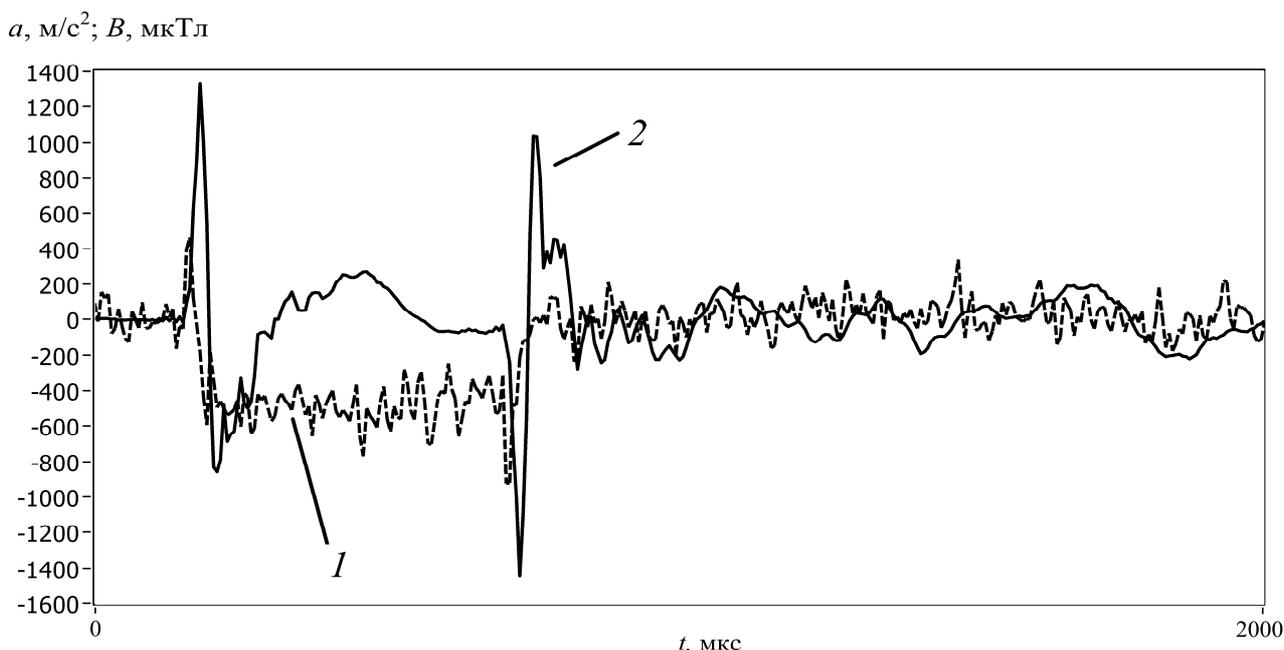


Рис. 2. Временные зависимости сигналов от датчиков магнитной индукции (1) и вибрации (2) и для образца из стали диаметром 3 мм и длиной 150 м

Полученные данные свидетельствуют и о том, что для ферромагнетиков, например, стали скин-эффект проявляется значительно сильнее, чем для металлов, используемых в качестве проводников - медь, серебро, алюминий.

На рис. 3 представлены зависимости механического вибрационного отклика от величины размаха плотности тока, которые близкие линейным. Величина магнитной индукции вблизи проводника линейно связана с величиной тока через этот проводник.

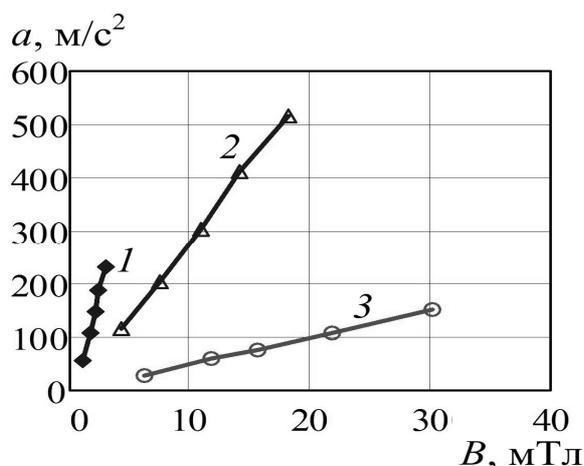


Рис. 3. Зависимость размаха ускорения от размаха магнитной индукции (амплитуды тока), созданной электрическим током в образцах диаметром 3 мм длиной 150 мм: 1 – сталь (марки ст. 70), 2 – латунь (Л68), 3 – медь (М1)

Исследовалось также действие электрических импульсов чередующейся полярностей одинаковой амплитуды. Изменение полярности электрического импульса, приводило к изменению знака генерируемого вибрационного процесса, показывая, что возникающие действующие динамические силы как осевого, так и поперечного направления меняют знак в зависимости от полярности приложенного электрического импульса.

В отдельных опытах были установлены особенности действия электрического импульса на проводник. В проводнике возникают изгибные колебания под действием сил, быстро меняющихся во времени, появляющихся в начальный момент переднего (одного направления) и заднего (противоположного направления) фронтов электрического импульса. При этом все направления менялись на противоположные при изменении направления приложенного электрического импульса.

Наблюдаемые эффекты нельзя объяснить пинч-эффектом. Появление поперечных изгибных колебаний проводника под действием электрических импульсов также не может быть объяснено как действием силы Ампера [8], так и пондеромоторными эффектами, поскольку они малы, а их обнаружение представляет сложную техническую задачу [9].

Линейная зависимость динамического механического отклика от амплитуды приложенного электрического импульса не зависит от полярности, а также указывает на то, что такие процессы как динамический нагрев или пинч-эффект не являются определяющими для наблюдаемых динамических деформаций. Зависимость от полярности наблюдаемых эффектов ограничивает возможность объяснения полученных данных на основе влияния поверхностной поляризации металла или скин-эффекта.

Согласно полученным данным (рис. 1, 2), силы, вызывающие вибрацию на фронтах импульса, формируются быстрыми изменениями электромагнитного поля. Кратковременное действие таких сил приводит к механическому удару, сопровождаемому упругой деформацией с последующим возникновением затухающих колебаний.

Тем не менее, при более высоких уровнях электрического воздействия, сопровождающимся пластической деформацией, вклад пинч-эффекта, теплового эффекта и т.д. может стать более заметным, поскольку определяющие их силы пропорциональны квадрату амплитуды электрического воздействия.

Заключение

Экспериментально установлены новые закономерности механического действия электрических импульсов на металлические проводники:

- линейная зависимость амплитуды вибрационного отклика от амплитуды электрического импульса;
- зависимость полярности создаваемых механических деформаций от полярности приложенного электрического импульса;
- изгибный характер деформаций в осесимметричных образцах под действием электрического импульса;
- механические колебания в поверхностном слое проводника формируются в основном начальные моменты изменения приложенного электрического импульса.

Полученные данные не позволяют рассматривать экспериментально наблюдаемые динамические процессы как прямое следствие действий пинч, скин, пондеромоторного, магнитогидродинамического, тепловых эффектов или эффекта близости на проводник с током.

Литература

1. Батаронов И. Л., Рощупкин А. М. Электропластическая деформация металлов и динамический пинч-эффект // Изв. вузов. Черная металлургия. – 1993. – № 8. – С. 57-61.
2. Батаронов И. Л. Механизмы электропластичности // Соросовский образовательный журнал. – 1999. – № 10. – С. 93-99.
3. Рощупкин А. М., Батаронов И. Л. Физические основы электропластической деформации металлов // Изв. Вузов. Физика. – 1996. – Т. 39. – № 3. – С. 57-65.
4. Китаев А. В. Магнитное поле проводников и их поверхностный эффект / А. В. Китаев // Вестник Нац. техн. ун-та "ХПИ" : сб. науч. тр. Темат. вып. : Проблемы автоматизированного электропривода. Теория и практика. – Харьков : НТУ "ХПИ", 2010. – № 28. – С. 489-490.
5. Скворцов О. Б. Контроль вибрации с применением аппаратуры NationalInstruments // Сборник трудов XII международной научно-практической конференции "Инженерные и научные приложения на базе технологий NationalInstruments 2013. NI Days XII ежегодная конференция компании NationalInstruments", Москва, ДМК. 2013. – С. 78-80.
6. Троицкий О. А., Стащенко В. И., Савенко В. С., Скворцов О. Б., Самуйлов С. Д., Правоторова Е. А., Терещук В. С. Воздействия импульсами тока и СВЧ-изучением на конструкционные материалы. Электродинамические и электрохимические эффекты в проводниках // М.: Издательство «Ким Л. А.», 2019. – 278 с.

7. Скворцов О. Б., Сташенко В. И., Троицкий О. А. Динамические эффекты в проводниках при воздействии импульсных токов // Вестник Сибирского государственного индустриального университета. – 2020. – № 1(31). – С. 27-34.

8. Галанин М. П., Сорокин Д. Л. Расчёт квазистационарных электромагнитных полей в областях, содержащих несвязные проводящие подобласти // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2017. – № 19. – 24 с.

9. Пондеромоторное действие электромагнитного поля (теория и приложения) / Под ред. Р. А. Валитова. М.: Советское радио, 1975. – 232 с.

ELECTRODYNAMIC ACTION ON THE CONDUCTOR OF ELECTRIC PULSE FRONTS

V. I. Stashenko¹, O. B. Skvortsov^{1,2}, O. A. Troitsky¹

¹A. A. Blagonravov Institute of Machine Science of the Russian Academy of Sciences, Moscow

²Scientific and Technical Center "Balancing Machine Plant", Moscow

The vibrations created in the samples by both single electric pulses and alternating polarities are studied. It is established that vibrations are formed in the surface layer of the conductor at the initial moments of change of the applied electric pulse. They change their direction when the direction of the applied electric pulse changes. The observed phenomena clearly depend on the polarity of the electric pulse.

Keywords: electric pulse, vibration, deformations, surface layer, skin effect, pinch effect.

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ОТЛИВКИ НА ОСНОВЕ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И СКМ LVMFlow

Т. И. Сушко, И. И. Чернышев, Т. В. Пашнева

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия
имени проф. Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина», Воронеж
Tat120675@yandex.ru

Одним из проблемных вопросов в литейной практике остается анализ причин, приводящих к некачественным отливкам с дефектной структурой, поэтому необходима оценка применительно к литейному производству на основе системы синтеза и системы анализа технологии, которую возможно провести посредством САД-систем SolidWorks и LVMFlow. Математическая модель представляет собой сложную систему дифференциальных уравнений, различающихся как граничными и начальными условиями, так и технологическими и геометрическими параметрами отливки и формы. Компьютерное моделирование посредством LVMFlow оценивает динамику заполнения формы и позволяет на стадии разработки выделить перспективные варианты ЛС для данной отливки с требуемым ее качеством и стойкостью оснастки. Цель данной работы показать пример оценки качественных параметров отливки «Вкладыш» на основе твердотельного моделирования и СКМ LVMFlow.

Ключевые слова: математическая модель, модель отливки.

Основой инженерной деятельности металлурга является создание конструктивных элементов отливки на базе систематизация опыта, экспериментальной отработки, инженерная интуиции и обработки огромного количества информации в малый промежуток времени. Благодаря внедрению в инженерную практику информационных технологий, оптимальное проектирование готовой детали значительно облегчило инженерный анализ конструкций и сроки их разработки. Трехмерное моделирование дублирует реальный технологический процесс изготовления отливки, характеризующийся последовательностью выполняемых действий и алгоритмом создания детали. Графически задаются как ее размеры, так и геометрические взаимосвязи между конструктивными элементами отливки, литниковой системы (ЛС), модели, а выявление возможных дефектов (усадка и пористость) достигается путем компьютерного моделирования посредством специализированных программ [1]. Создание системы сквозного проектирования технологии и оснастки является весьма актуальной задачей литейного производства.

Деталь «Вкладыш» из оловянной бронзы БрО5Ц5С5 состоит из двух разнотолщинных половинок полых цилиндров с размером стенок 65 мм у большего и 40 мм у меньшего оснований с общей высотой отливки – 740 мм. Наружные диаметры отливки составляют – 690 (верхняя часть) и 640 мм (нижняя часть), внутренний диаметр – 560 мм. Трехмерная модель отливки и половинки кокиля для ее изготовления в сплаве из оловянной бронзы представлена на рис. 1. Для

создания трехмерных моделей отливки и элементов кокиля в качестве базовой была выбрана русифицированная версия SolidWorks Russia, обладающая возможностями для оформления чертежей и функционирующая на платформе Windows версии XP и выше, адаптированная к ЕСКД.

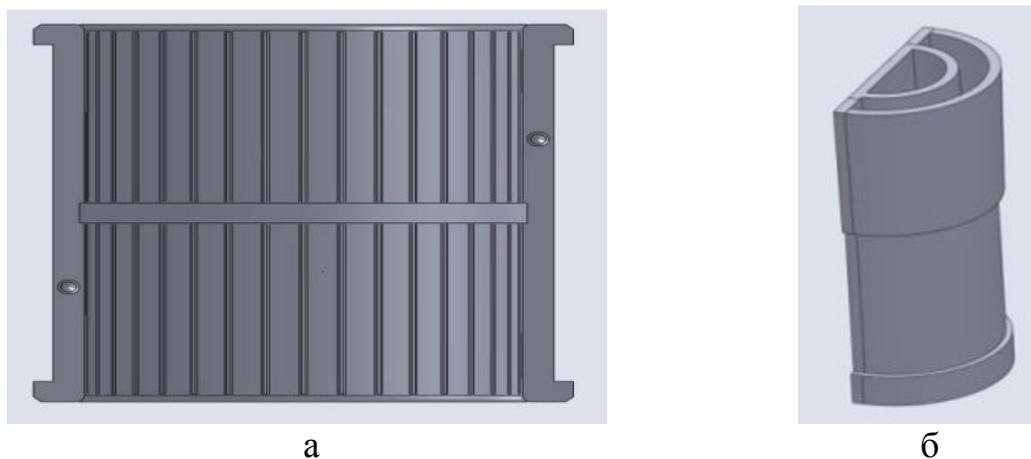


Рис. 1. Трехмерная модель отливки (а) и элементов кокиля (б)

Оснастка – кокиль для данной отливки представляет собой стальную плиту под основанием кокиля и двух соединительных половин, соединяющихся скобами вертикально с толщиной стенок 80 мм из серого чугуна марки СЧ 30. Поэтому в кокиль соединяют следующие элементы: левую изложницу, закреплённую на кокильной плите и подвижную правую изложницу с центрирующими штырями. Эскиз кокиля, разработанный в САД-системе КОМПАС, и его трехмерная модель представлены на рис. 2.

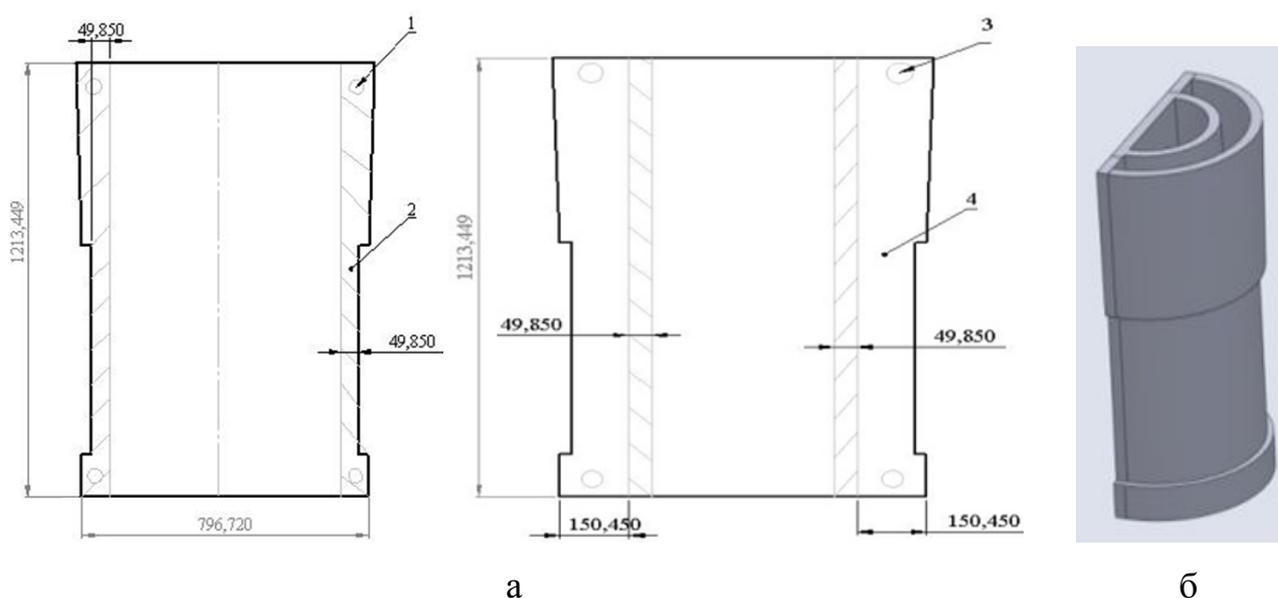


Рис. 2. Эскиз кокиля, разработанный в САД-системе КОМПАС, (а) и его трехмерная модель (б)

Руководствуясь литературными рекомендациями и экспериментальной базой питающих систем для отливок типа тел вращения при литье в кокиль, выбираем подвод металла в массивную прибыль при вертикальном положении отливки, как показано на рис. 3.

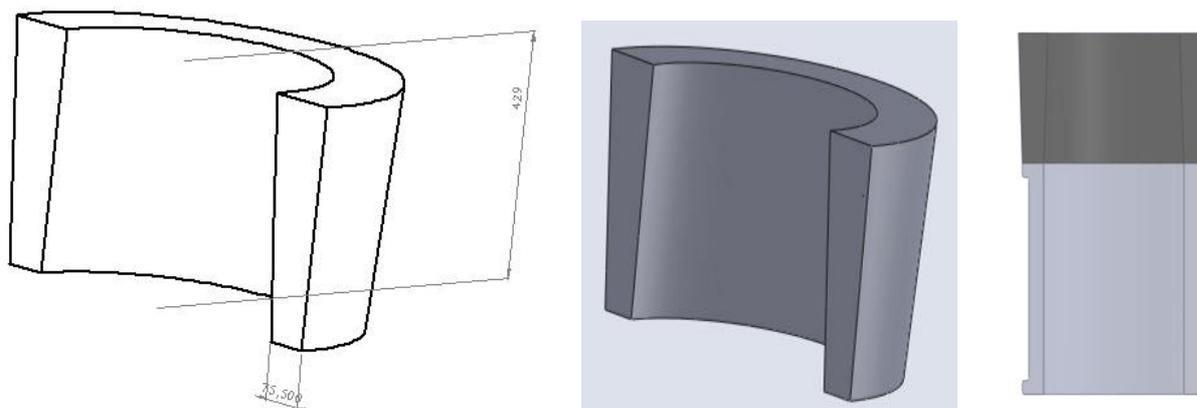


Рис. 3. Трехмерная модель подвода металла в массивную прибыль при вертикальном положении отливки

Оценку работы выбранной литниковой системы и качества получаемой детали проводим посредством СКМ LVMFlow с заданием граничных условий согласно справочной базы программы: температуру и время заливки сплава в форму принимаем в диапазоне 1110 – 1170 °С и 30 с. Очень важным технологическим параметром качества при литье в кокиль остается температура подогрева кокиля (150 – 250 °С), так и его раскрытия 500 °С. Виртуальную заливку выбираем из ковша, при этом скорость потока расплава составляет 15 кг/с. Как и предполагалось ранее, качество работы выбранного типа прибыли с точки зрения питания и дефектов усадочного характера, по результатам исследования является надежным, усадку сплава (рис. 4) наблюдаем только в теле прибыли порядка 1,5%. В целом отливка затвердевает равномерно с усиленным охлаждением нижней части отливки, чему способствует стальная плита.

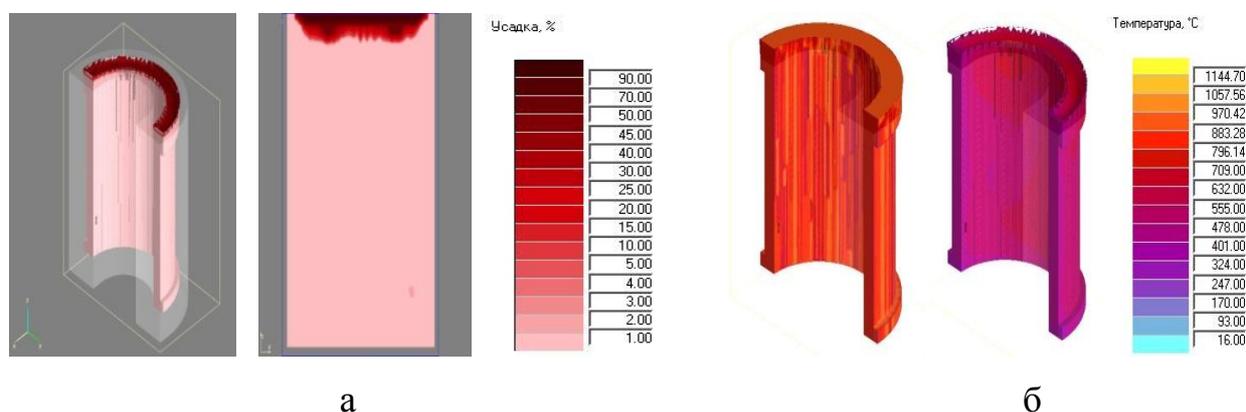


Рис. 4. Дефекты усадочного характера в прибыльной части отливки (а) и интенсивность затвердевания на 11 с и 7300 с (б)

Критерий Нияма, характеризующий итог физических процессов, проявляющихся при кристаллизации жидких металлов – усадки и абсорбции газов в результате затвердевания, в особенности, таких как водород, кислород и др., является показателем наличия микропор. Их согласно требованиям в отливках может быть не менее 0,85. По нашим оценочным суждениям (рис. 5) в разных областях отливки они достигают значений меньше 0,6, что показывает неудовлетворительный результат. Следовательно, некоторое количество пузырьков газа, застревают в теле отливки вследствие более быстрого охлаждения. Они возможны из-за утолщенных стенок кокиля, соотношением между способностями материала формы аккумулировать теплоту и отдавать ее в окружающую среду.

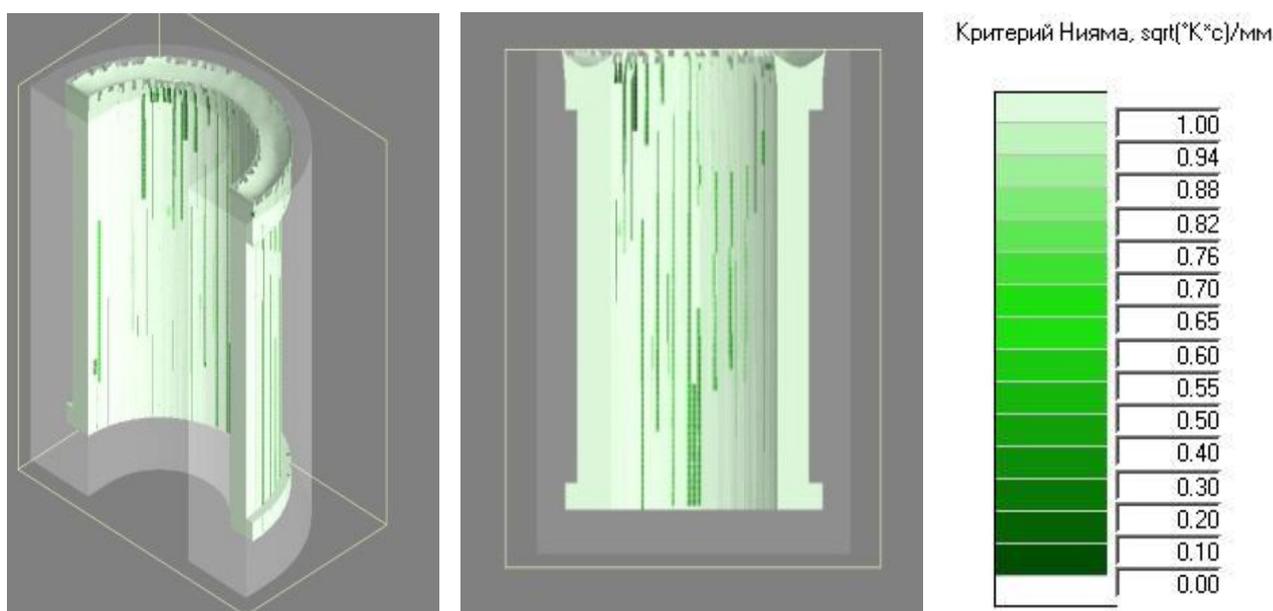


Рис. 5. Дефекты по микропористости

Таким образом, показан пример оценки качественных параметров отливки «Вкладыш» на основе твердотельного моделирования и СКМ LVMFlow. Результат исследований показал дальнейшее направление в работе, необходимо оптимизировать конструкцию литниково-питающей системы отливки или заменить материал кокиля.

Литература

1. Тихомиров М. Д. Основы моделирования литейных процессов. Усадочная задача / М. Д. Тихомиров // Литейное производство. – 2001. – № 12. – С. 8-14.
2. Галдин М. Н. Цветное литьё: Справочник / М. Н. Галдин, Д. Ф. Чернега, Д. Ф. Иванчук. – М: Машиностроение, 1989. – 528 с.
3. Моделирование технологии и проектирование оснастки стальной отливки «Корпус» в средах SolidWorks-LVMFlow-SolidCAM [Текст] / Т. И. Сушко, Е. С. Хухрянская, И. С. Кущева // Моделирование систем и процессов. – 2018. – Т.11. – №4. – С. 85-91.
4. Моделирование физического затвердевания отливки при литье в кокиль в системе LVMFlow [Текст] / Т. И. Сушко, Р. Ш. Караев, И. И. Чернышев, С. В. Попов // Современные научные исследования и разработки. – 2018. – Т. 1. – № 11(28). – С. 688-692.

QUALITY ASSESSMENT OF CASTING BASED ON SOLID STATE MODELING AND LVMFlow PROGRAM

T. I. Sushko, I. I. Chernyshev, T. V. Pashneva

Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N. E. Zhukovsky
and Yu. A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh

One of the problematic issues in foundry practice is the analysis of the reasons leading to low-quality castings with a defective structure. An assessment is needed in relation to foundry based on a synthesis system and a technology analysis system, which can be carried out using CAD-systems SolidWorks and LVMFlow. The mathematical model is a complex system of differential equations that differ in both boundary and initial conditions, technological and geometric parameters of the casting and mold. Computer simulation using LVMFlow evaluates the dynamics of filling the mold and allows at the development stage to identify promising drug options for a given casting with the required quality and tooling durability. The purpose of this work is to show an example of assessing the quality parameters of the insert casting based on solid modeling and LVMFlow program.

Keywords: mathematical model, casting model.

ПРОЦЕСС МОДЕЛИРОВАНИЯ КАК РЕШЕНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ПОЛУЧЕНИЯ ГОТОВОЙ ОТЛИВКИ

Т. И. Сушко, Р. Ш. Караев, Т. В. Пашнева

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

Tat120675@yandex.ru

В данной статье реальные объекты рассматривают как системы в современной методологии моделирования. Одним из важнейших методов современной инженерной деятельности является моделирование, в котором «модель» – система, заменяющая исследуемый объект (прототип). При изучении прототипа можно получить информацию о другой системе, являющейся оригиналом. Исследование процессов или систем прототипов путем построения и изучения их моделей называется моделированием. Посредством трехмерного моделирования визуализируют реальный технологический процесс изготовления отливки с технологической картой и рекомендациями по совершенствованию конструкции питания, параметров литья, влияния экологических и других факторов. В процессе моделирования задаются граничные условия, размеры отливки и оснастки, геометрические взаимосвязи между элементами.

Ключевые слова: математическая модель, деталь «вкладыш», модель отливки.

Размеры, взаимосвязи и уравнения определяют качество получаемой отливки [1]. Устранение возможных ошибок, дефектов литья в отливке в процессе разработки конструкции питания и отдельных узлов достигается путем имитационного моделирования происходящих в отливках физических явлений, с помощью которых воспроизводятся тепловые, гидродинамические, усадочные, фильтрационные, деформационные и т. п. процессы на экран монитора. Поэтому решение вопросов автоматизации литейных процессов, создания системы для решения геометрических задач (группирования геометрического моделирования и расчетных программ в интегрированные системы), является весьма актуальной задачей. На рис. 1 представлен алгоритм моделирования отливки, реализующий подход к системе автоматизированного проектирования (САПР) на основе твердотельного моделирования, где создается трехмерная модель геометрического объекта с внесенными технологом изменениями вследствие моделирования, являющаяся удобным инструментом для решения геометрических задач. Для изучения систем автоматизированного проектирования и создания геометрических моделей нами использовалась версия SolidWorks Russia, которая подходит для изготовления прототипов изделий любой сложности, и система компьютерного моделирования LVMFlow Russia, в основу которой положен метод контролируемого объема Control Volume (CVM). Приложения этой системы позволяют проводить моделирование сложных гидродинамических процессов и оптимизацию размеров [2].

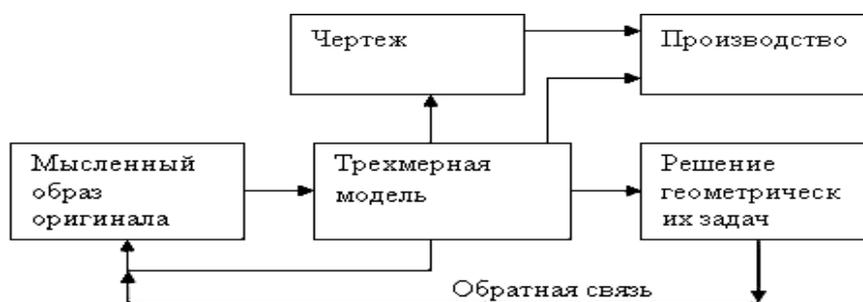


Рис. 1. Схема системы автоматизированного проектирования на основе твердотельного моделирования

Для детали из сплава 35ХМЛ и массой 36,4 кг (рис. 2), эксплуатируемой в условиях колебаний температур, давлений, напряжений, важным параметром при передаче ее в производство является бездефектная структура, определяющая ее качество, безопасность объектов и режимов эксплуатации.

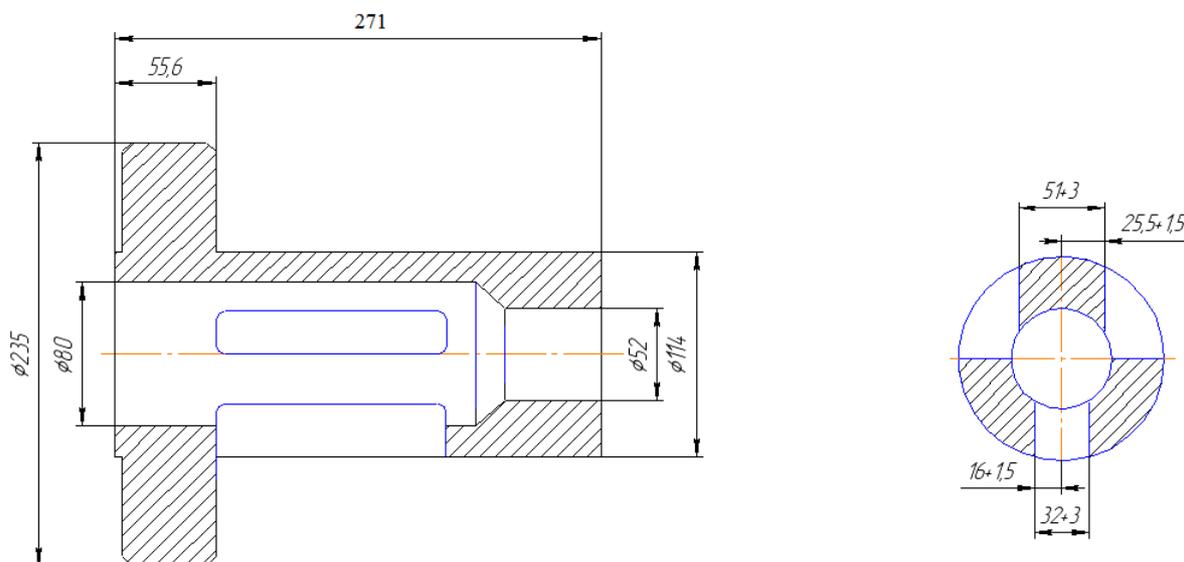


Рис. 2. Чертеж детали

Построение трехмерных моделей различных конструкций отливок с системами питания для моделирования процессов затвердевания отливки начинаем с чертежа эскиза центральной части отливки (рис. 3). Модели проходят апробацию в приложении Solidworks Flow Simulation с целью определения температуры сплава, его изменения на входе и выходе, перепадов давления жидкости. При построении модели управленческого решения учитывались и такие факторы, как температура заливки – в нашем случае она 1620 °С, состав формовочной и стержневой смеси, формовка – ручная, в двух горизонтальных полуформах по разьему, граничные условия – выбираем излучение в среду с температурой 20 °С кроме верхней плоскости формы, вид литья – песчано-глинистые формы, время заливки расплава в форму около 12 с, размер ячейки при расчете порядка 7,00 мм.

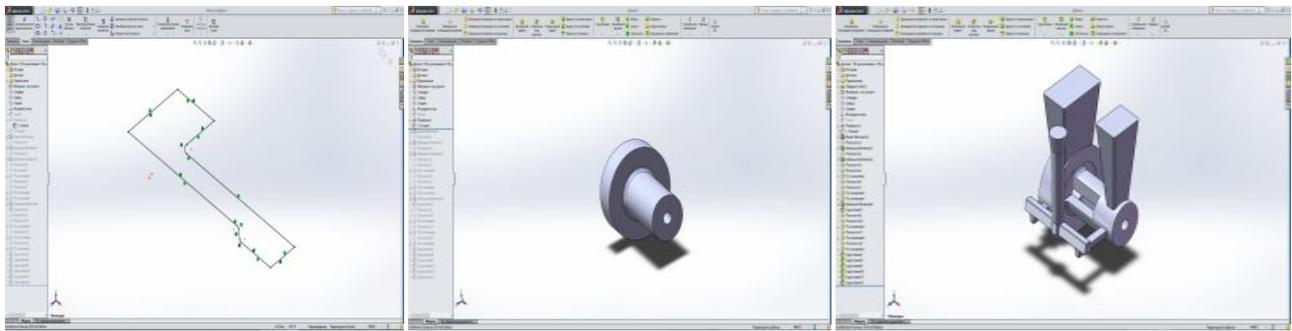


Рис. 3. Трехмерная модель отливки с системой питания до внесения изменений

Компьютерное моделирование показало неудовлетворительные результаты по качеству отливки (рис. 4). Необходимо внести изменения как в конструкцию питания отливки, так и в технологические параметры, такие, как формовочная смесь. Нами на основе практического опыта и рекомендаций для данного вида литья, типа отливки, марки сплава был выбран экзотермический обогрев отливки с разработкой трехмерных моделей утепляющих колпачков (рис. 5).

Результаты моделирования представлены на рис. 6.

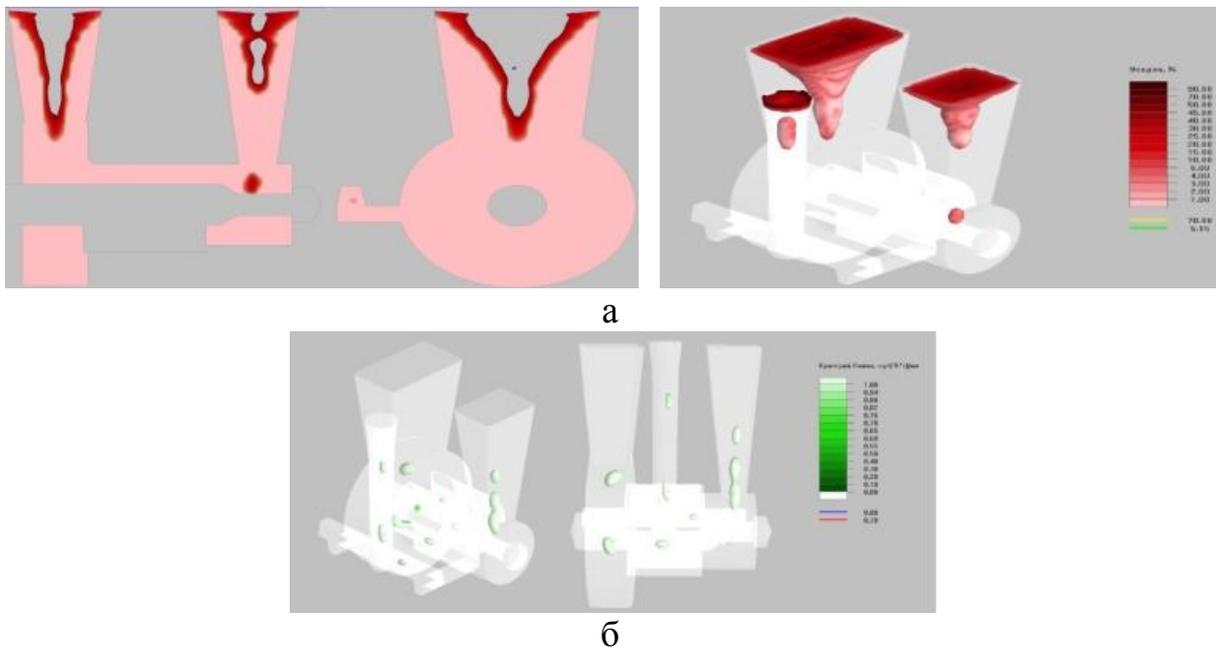


Рис. 4. Дефекты в отливке: а) усадка, б) микропористость

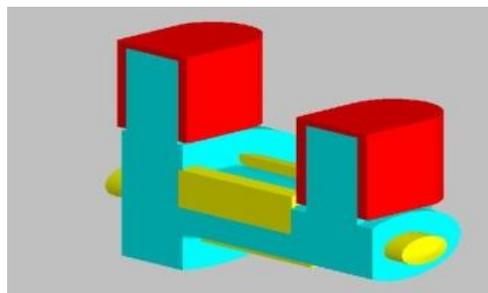


Рис. 5. Трехмерная модель с экзотермическим обогревом

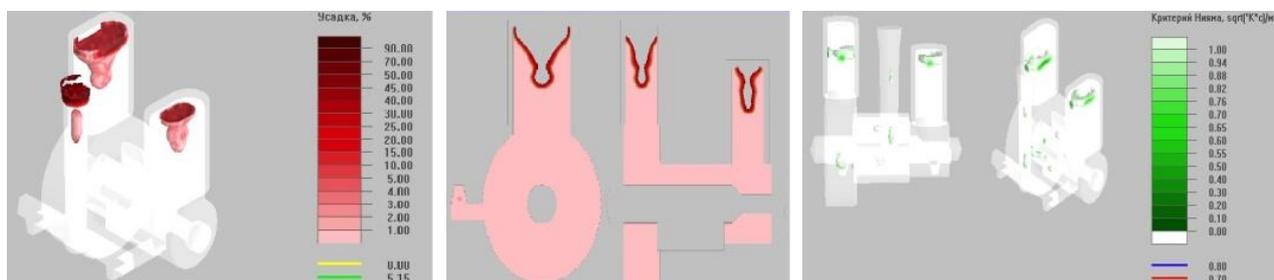


Рис. 6. Результаты моделирования

Заметно в сравнении с первым вариантом отсутствие усадочных дефектов в теле отливки и сосредоточение закрытой усадочной раковины в подприбыльной зоне, что соответствует критериям качества. Таким образом, на основе изучения прототипа отливки, физических процессов на границе металл-форма, показан пример моделирования для решения геометрических задач.

Литература

1. Монастырский А. Внедрение современных методов разработки и оптимизации технологических процессов в литейном производстве // CADmaster. 2010. № 2. С. 62-64.
2. Голод В. М. Компьютерный анализ литейной технологии, проблемы, его информационного обеспечения и адаптация к условиям производства // Вестник Удмуртского университета. 2008. Вып. 1. С. 68-86.

MODELING PROCESS AS A SOLUTION TO THE GEOMETRIC PROBLEM OF OBTAINING A FINISHED CASTING

T. I. Sushko, 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

In this article, real objects are considered as systems in modern modeling methodology. One of the most important methods of modern engineering activity is modeling, in which the "model" is a system that replaces the object under study (prototype). When studying a prototype, you can get information about another system that is the original. The study of processes or systems prototypes by building and studying their models is called modeling. By means of three-dimensional modeling, the real technological process of making a casting is visualized, with a flow chart and recommendations for improving the feed design, casting parameters, the influence of environmental and other factors. In the process of modeling, boundary conditions, dimensions of the casting and equipment, and geometric relationships between elements are set.

Keywords: mathematical model, part "insert", casting model.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ В ОДНОРОДНОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ СРЕДЕ ПРИ ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ ТОКА

С. Л. Тимченко, Н. А. Задорожный

МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва
timch@bmstu.ru, nikazador@bmstu.ru

Рассмотрены особенности электропроводности в однородной проводящей среде, по которой протекает постоянный электрический ток высокой плотности. Показано, что в микро- и нанобъемах проводящей среды возможно появление объемного заряда. К возникновению объемного заряда в проводящей среде могут привести силы вязкого трения при движении электронов и ионов. За счет сил вязкого трения между ионами и электронами основного материала и примесей возникает дополнительная ионизация, которая происходит в нанобъемах проводника. Величина объемного заряда в однородном проводнике пропорциональна квадрату плотности тока.

Ключевые слова: плотность тока, проводник, электропроводность, электрическое поле, кристаллизация.

Использование физических методов воздействия на сплав в процессе формирования его структуры актуально для создания современных литейных технологических процессов и дает возможность управлять процессом кристаллизации металлов и сплавов, получая отливки с требуемыми эксплуатационными свойствами [1-5]. Одним из методов воздействия является пропускание электрического тока при приготовлении расплава и при кристаллизации. Как показывают исследования [1, 3-5] воздействие на расплав постоянного электрического тока способствует перемещению легирующих элементов под действием электрического поля [6], приводит к уменьшению газовой пористости, уменьшению размера дендритной ячейки в силуминах, чугунах. Важно, что такие эксплуатационные свойства, как твердость, прочность увеличиваются [1, 3-6]. Однако единой физической модели, описывающей влияние электрического тока в указанных процессах, пока не существует.

Ниже рассмотрены особенности электропроводности в однородной проводящей среде. Делается предположение о возникновении объемного заряда в проводнике. Получено выражение для объемной плотности электрического заряда в однородном проводнике с током и учтено его влияние на дополнительные перемещения электронов и ионов в расплаве. Пусть по однородному проводнику протекает постоянный электрический ток плотности j . Согласно выводам одномерной задачи Друде-Лоренца, плотность тока пропорциональна скорости дрейфа носителей: $\vec{j} = en\vec{v}_{др}$ ($v_{др}$ – скорость дрейфа электронов в проводнике, n – концентрация электронов, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл). Уравнение непрерывности в случае постоянного тока имеет вид:

$$\operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (1)$$

Известно, что поле в проводнике при электропроводности складывается из кулоновского потенциального поля \vec{E}_0 , определяемого взаимодействием электронов проводимости с ионным остовом проводника, и лоренцева поля $\vec{E}_л = [\vec{v}_{др}, \vec{B}]$. Здесь \vec{B} – вектор магнитной индукции, Тл. Суммарное электрическое поле в проводнике по постоянному току определяется двумя слагаемыми:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 + [\vec{v}_{др}, \vec{B}]. \quad (2)$$

Следовательно, аналитическое выражение для закона Ома, эффективного тока в проводнике при постоянном токе имеет вид:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} = \sigma (\vec{E}_0 + [\vec{v}_{др}, \vec{B}]). \quad (3)$$

Уравнение непрерывности (1) можно записать как:

$$\text{div} (\sigma \vec{E}_0 + \sigma [\vec{v}_{др}, \vec{B}]) = 0. \quad (4)$$

Учтем, что $\vec{E}_0 = \vec{D}/\varepsilon_0$, и введем $\rho_\sigma = \text{div} \varepsilon_0 \vec{E}_0$ (ρ_σ – объемная плотность электрического заряда в проводнике, Кл/м³) и считая материальные характеристики проводящей среды ε , μ , σ пространственно однородными, получаем:

$$\frac{\sigma}{\varepsilon_0} \text{div} (\varepsilon_0 \vec{E}_0) + \sigma \text{div} [\vec{v}_{др}, \vec{B}] = 0,$$

$$\varepsilon_0 \text{div} [\vec{v}_{др}, \vec{B}] = -\rho_\sigma. \quad (5)$$

Таким образом возникновение объемного заряда в однородном проводнике возможно за счет действия на движущиеся носители заряда в проводящей среде магнитного поля, характеризуемого вектором магнитной индукции \vec{B} . При этом магнитное поле может быть обусловлено как собственными токами проводящей среды \vec{B}_j , так и внешними источниками \vec{B}_0 . Поэтому в общем случае $\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_j$. Считая, что в случае постоянного тока, который течет только вдоль проводника, $\text{rot} \vec{j} = 0$, а $\text{rot} \vec{H} = \vec{j}$, то получаем:

$$\varepsilon_0 \text{div} [\vec{v}_{др}, \vec{B}] = -\frac{\varepsilon_0}{en} \mu_0 (\vec{j}, \text{rot} \vec{H})$$

и

$$\varepsilon_0 \text{div} [\vec{v}_{др}, \vec{B}] = -\frac{\varepsilon_0}{en} \mu_0 j^2. \quad (6)$$

Объёмная плотность электрического заряда в микрообъеме:

$$\rho_\sigma = \frac{\varepsilon_0}{en} \mu_0 j^2. \quad (7)$$

Наличие объемного заряда в проводнике в процессе электропроводности приводит к возникновению электрического поля. Напряженность электрическо-

го поля в изотропном проводнике цилиндрической формы при высоких плотностях тока следует определять согласно выражению:

$$\vec{E}(j) = \rho_0 j \vec{n} + \frac{\rho_0 \gamma \alpha_\rho}{\alpha_T} j^2 \vec{n} + \frac{r}{2 \varepsilon_0 e n c^2} j^2 \vec{e}_r. \quad (8)$$

Здесь ρ_0 – удельное электросопротивление проводника, α_ρ и α_T – температурные коэффициенты электросопротивления и удлинения, соответственно, γ – гальваноупругий коэффициент [7, 8].

В выражении (8) первые два слагаемых определяют напряженность потенциального электростатического поля в проводящей среде на постоянном токе и имеющее в основном только продольную составляющую [8], а третье слагаемое – напряженность поля за счет действия силы Лоренца на носители тока. Наличие объемного заряда в проводнике будет приводить к его деформированию. Существенно, что деформации проводника за счет силы Лоренца являются квадратичными по току, в отличие от электроупругих деформаций [7, 8].

Объемная плотность заряда как в однородном, так и в неоднородном проводнике может возникать именно локально, а поэтому в микрообъемах и нанообластях проводника будет оказано дополнительное влияние на ионы атомов основного элемента и ионы атомов примесей. При этом, величина объемного заряда в случае неоднородной среды зависит от характера распределения удельной электропроводности, а в однородном проводнике – пропорциональна квадрату плотности тока. Неоднородная среда реализуется при получении отливок, подвергнутых действию электрического тока в процессе кристаллизации, за счет теплообмена образца с литейной формой.

К возникновению объемного заряда в проводящей среде могут привести силы вязкого трения при движении электронов и ионов. За счет сил вязкого трения между ионами и электронами основного материала и примесей возникает дополнительная ионизация, которая происходит в нано-объемах проводника. Такое влияние электрического тока на движение ионов алюминия и кремния наблюдалось в силуминах и, в частности, в сплаве АК12 и которое нельзя объяснить в рамках классической теории электропроводности.

Литература

1. Батышев А. И. Литье с применением электромагнитных сил. - М., НИИМАШ, 1977, с. 37-53.
2. Epstein S. Y., Paskin A. Atom Motion in Liquid Aeolus in the Presence of an Electric Field. Phys. Lett., 1967, V. 24A, 6, 309-310.
3. Деев В. Б., Селянин И. Ф., Башмакова Н. В., Скударнов В. А., Ершов К. А. Влияние электрического тока на кристаллизацию алюминиевых сплавов, содержащих железо // Литейщик России. – 2007. – № 8. – С. 12-15.
4. Деев В. Б., Селянин И. Ф., Нохрина О. И., Горюшкин В. Ф., Цепорина С. А. Модифицирующая обработка сплавов магнитным полем // Литейщик России. – 2008. – № 3. – С. 23-25.

5. Тимченко С. Л., Кобелева Л. И., Задорожный Н. А. Влияние электрического тока на структуру и свойства алюминиевого сплава. Физика и химия обработки материалов. – 2011. – №6. – С. 82-87.

6. Лаптев А. Б., Первухин М. В., Афанасьев-Ходыкин А. Н., Тимофеев В. Н., Мовенко Д. А., Галушка И. А. Электроперенос ионов легирующих элементов в алюминиевых сплавах магнитогидродинамической обработкой расплава // Journal of Siberian Federal University. Engineering & Technologies. – 2017. – 10(8). – С. 1031-1041.

7. Сидоренков В. В., Тимченко С. Л. О физической природе феноменологического закона электропроводности металлов // Вестник МГТУ, сер. Приборостроение. – 1994. – № 2. – С. 110-119.

8. Корнев Ю. В., Сидоренков В. В., Тимченко С. Л. О физической природе закона электропроводности металлов // Доклады Академии Наук. – 2001. – Т. 380. – № 4. – С. 1-4.

FEATURES OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY IN A HOMOGENEOUS CONDUCTING MEDIUM AT HIGH CURRENT DENSITY

S. L. Timchenko, N. A. Zadorozhnyi

Bauman Moscow Technical University

Here we consider the features of electrical conductivity in a homogeneous conducting medium through which a constant electric current flows. It is shown that the appearance of a volume charge occurs in micro - and nano-volumes of the conducting medium. Viscous friction forces can cause the appearance of a volume charge in a conducting medium during the movement of electrons and ions. Additional ionization occurs in the nanoscale volumes of the conductor due to the forces of viscous friction between the ions and electrons of the base material and impurities during their movement. The magnitude of the volume charge in a homogeneous conductor is proportional to the square of the current density.

Keywords: current density, conductor, electrical conductivity, electric field, crystallization.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УПОРЯДОЧЕНИЯ ТРЕХКОМПОНЕНТНОГО СПЛАВА

А. Р. Халиков¹, В. Т. Нгуен¹, С. В. Дмитриев^{2,3}

¹Уфимский государственный авиационный технический университет

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа

³Уфимский государственный нефтяной технический университет

khalikov.albert.r@gmail.com

В работе представлена математическая модель упорядочения трехкомпонентного сплава по вакансионному механизму диффузии. Модель используется для моделирования фазовых переходов методом Монте-Карло, построения структур упорядоченных сплавов для расчётов параметров порядка и т.п.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, диффузия, металл, сплав, интерметаллид, параметры порядка, потенциал Морзе.

Представленная в работе модель упорядочения сплава по вакансионному механизму диффузии использовалась ранее в работах по упорядочению сплавов [1-13]. В случае трехкомпонентного сплава состава $A_mB_nC_k$, атомы сортов A , B и C располагаются в узлах решетки, у которой на i -й координационной сфере имеется N_i атомов. Размерность решетки может быть любой. Концентрации атомов сортов A , B и C равны, соответственно,

$$c_A = \frac{m}{m+n+k}, \quad c_B = \frac{n}{m+n+k}, \quad c_C = \frac{k}{m+n+k}. \quad (1)$$

Через $p_{KL}^{(i)}$ обозначим вероятность того, что на i -й координационной сфере атома сорта K находится атом сорта L , где $K, L = \{A, B, C\}$. В трехкомпонентном сплаве существуют следующие связи между девятью вероятностями $p_{KL}^{(i)}$, и тремя концентрациями c_A, c_B, c_C :

$$p_{AA}^{(i)} + p_{AB}^{(i)} + p_{AC}^{(i)} = 1, \quad p_{BA}^{(i)} + p_{BB}^{(i)} + p_{BC}^{(i)} = 1, \quad p_{CA}^{(i)} + p_{CB}^{(i)} + p_{CC}^{(i)} = 1, \quad c_A + c_B + c_C = 1, \quad (2)$$

$$c_A(p_{AA}^{(i)} - c_A) = -\frac{1}{2}[c_A(p_{AB}^{(i)} + p_{AC}^{(i)}) + c_B(p_{BA}^{(i)} - 2c_A) + c_C(p_{CA}^{(i)} - 2c_A)], \quad (3)$$

$$c_B(p_{BB}^{(i)} - c_B) = -\frac{1}{2}[c_B(p_{BA}^{(i)} + p_{BC}^{(i)}) + c_A(p_{AB}^{(i)} - 2c_B) + c_C(p_{CB}^{(i)} - 2c_B)], \quad (4)$$

$$c_C(p_{CC}^{(i)} - c_C) = -\frac{1}{2}[c_C(p_{CA}^{(i)} + p_{CB}^{(i)}) + c_A(p_{AC}^{(i)} - 2c_C) + c_B(p_{BC}^{(i)} - 2c_C)]. \quad (5)$$

Обозначим через $\varphi_{KL}^{(i)}$ энергию связи пары атомов сортов K и L , расположенных на расстоянии равном радиусу i -й координационной сферы.

Потенциальная энергия структуры в расчете на один атом, при учете взаимодействия атомов в I первых координационных сферах, запишется в виде

$$E = \sum_{i=1}^I \frac{N_i}{2} \left[\begin{aligned} & c_A (p_{AA}^{(i)} \varphi_{AA}^{(i)} + p_{AB}^{(i)} \varphi_{AB}^{(i)} + p_{AC}^{(i)} \varphi_{AC}^{(i)}) \\ & + c_B (p_{BA}^{(i)} \varphi_{BA}^{(i)} + p_{BB}^{(i)} \varphi_{BB}^{(i)} + p_{BC}^{(i)} \varphi_{BC}^{(i)}) \\ & + c_C (p_{CA}^{(i)} \varphi_{CA}^{(i)} + p_{CB}^{(i)} \varphi_{CB}^{(i)} + p_{CC}^{(i)} \varphi_{CC}^{(i)}) \end{aligned} \right]. \quad (6)$$

Энергия полностью разупорядоченного состояния структуры определяется выражением (6) для $p_{AA}^{(i)} = p_{BA}^{(i)} = p_{CA}^{(i)} = c_A$,

$$p_{AB}^{(i)} = p_{BB}^{(i)} = p_{CB}^{(i)} = c_B, \quad p_{AC}^{(i)} = p_{BC}^{(i)} = p_{CC}^{(i)} = c_C,$$

что дает

$$E_{disord} = \sum_{i=1}^I \frac{N_i}{2} \left[c_A^2 \varphi_{AA}^{(i)} + c_B^2 \varphi_{BB}^{(i)} + c_C^2 \varphi_{CC}^{(i)} + 2c_A c_B \varphi_{AB}^{(i)} + 2c_A c_C \varphi_{AC}^{(i)} + 2c_B c_C \varphi_{BC}^{(i)} \right]. \quad (7)$$

Энергия распада на чистые компоненты определяется выражением (6) для $p_{AB}^{(i)} = p_{BA}^{(i)} = p_{AC}^{(i)} = p_{CA}^{(i)} = p_{BC}^{(i)} = p_{CB}^{(i)} = 0$, $p_{AA}^{(i)} = 1$, $p_{BB}^{(i)} = 1$, $p_{CC}^{(i)} = 1$, что дает

$$E_{decomp} = \sum_{i=1}^I \frac{N_i}{2} \left[c_A \varphi_{AA}^{(i)} + c_B \varphi_{BB}^{(i)} + c_C \varphi_{CC}^{(i)} \right]. \quad (8)$$

Выберем энергию E_{disord} в качестве точки отсчета, и будем характеризовать энергию любой структуры разностью

$$\Delta E = E - E_{disord} = - \sum_{i=1}^I \frac{N_i}{4} \left[\alpha_{AB}^{(i)} \omega_{AB}^{(i)} + \alpha_{AC}^{(i)} \omega_{AC}^{(i)} + \alpha_{BC}^{(i)} \omega_{BC}^{(i)} \right], \quad (9)$$

где введены параметры ближнего порядка

$$\begin{aligned} \alpha_{AB}^{(i)} &= c_A p_{AB}^{(i)} + c_B p_{BA}^{(i)} - 2c_A c_B, \\ \alpha_{AC}^{(i)} &= c_A p_{AC}^{(i)} + c_C p_{CA}^{(i)} - 2c_A c_C, \\ \alpha_{BC}^{(i)} &= c_B p_{BC}^{(i)} + c_C p_{CB}^{(i)} - 2c_B c_C, \end{aligned} \quad (10)$$

и энергии упорядочения

$$\begin{aligned} \omega_{AB}^{(i)} &= \varphi_{AA}^{(i)} + \varphi_{BB}^{(i)} - 2\varphi_{AB}^{(i)}, \\ \omega_{AC}^{(i)} &= \varphi_{AA}^{(i)} + \varphi_{CC}^{(i)} - 2\varphi_{AC}^{(i)}, \\ \omega_{BC}^{(i)} &= \varphi_{BB}^{(i)} + \varphi_{CC}^{(i)} - 2\varphi_{BC}^{(i)}. \end{aligned} \quad (11)$$

При выводе соотношения (9) использовались соотношения (2-5).

Опишем математическую модель процесса диффузии в сплаве по вакансионному механизму в модели твердых сфер, которая может быть применена к трехкомпонентному сплаву состава $A_m B_n C_k$, заданному на решетке любого типа и любой размерности. Предполагается, что любой атом из первых K координа-

ционных сфер имеет возможность занять место вакансии. Число таких атомов равно $M = \sum_{k=1}^K N_k$, где N_k – координационные числа. Каждому из M атомов приписывается вероятность p_m занять место вакансии в элементарном акте диффузии, так, что $\sum_{m=1}^M p_m = 1$. С этой целью вычисляется изменение энергии сплава ΔE_m , связанное с переходом m -го атома на вакантное место, для заданной температуры сплава T . Искомые вероятности определяются следующим образом

$$p_m = \frac{P_m}{\sum_{m=1}^M P_m}, \quad (12)$$

где

$$p_m = \exp\left(-\frac{\Delta E_m}{kT}\right), \quad (13)$$

и $k = 8.61733 \cdot 10^{-5}$ эВ/К – постоянная Больцмана.

Для описания межатомных взаимодействий выбран парный потенциал Морзе

$$\varphi_{KL}(r^{(i)}) = D_{KL} \{ \exp[-2\alpha_{KL}(r^{(i)} - R_{KL})] - 2 \exp[-\alpha_{KL}(r^{(i)} - R_{KL})] \}, \quad (14)$$

где D_{KL} , α_{KL} , R_{KL} – параметры потенциала, а $r^{(i)}$ – радиус i -й координационной сферы.

Литература

1. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Расчет энергий межатомных взаимодействий упорядоченных бинарных сплавов с применением метода генетического алгоритма // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2020612434, 21.02.2020. Заявка № 2020611582 от 17.02.2020.
2. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Планарные сверхструктурные дефекты тройных упорядочивающихся сплавов Гейслера [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 129-130.
3. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 131-133.
4. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Хазгалиев Р. Г., Дмитриев С. В. Моделирование фазового перехода на границе контакта атомов двух металлов состава AnBm на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 134-135.
5. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Применение метода генетического алгоритма для расчета энергий межатомных взаимодействий упорядоченных сплавов составов AnBm [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 137-138.

6. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Описание всех возможных структур трехкомпонентного сплава состава ABC на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 143-144.

7. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Точилкина С. В., Хазгалиев Р. Г., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло диффузии титана и никеля в процессе сварки давлением [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент. Материалы XII Международной научно-инновационной молодежной конференции. 2020. С. 164-167.

8. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Точилкина С. В., Галиева Э. В., Дмитриев С. В., Валитов В. А. Моделирование структуры жаропрочного сплава ЭП975 при 1000 °С методом Монте-Карло [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент. Материалы XII Международной научно-инновационной молодежной конференции. 2020. С. 184-186.

9. Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2019663279, 15.10.2019. Заявка № 2019662341 от 07.10.2019.

10. Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование структуры бинарных сплавов методом Монте-Карло // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2019663426, 16.10.2019. Заявка № 2019662316 от 07.10.2019.

11. Халиков А. Р., Галиева Э. В., Дмитриев С. В., Валитов В. А. Моделирование структуры жаропрочного сплава ВКНА-25 при 1000 °С методом Монте-Карло в приближении жесткой кристаллической решетки [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент. Материалы XI Международной научно-инновационной молодежной конференции. 2019. С. 253-255.

12. Халиков А. Р., Шарапов Е. А., Корзникова Е. А., Потеев А. И., Старостенков М. Д., Галиева Э. В., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах // Известия высших учебных заведений. Физика. 2019. Т. 62. № 4 (736). С. 119-124.

13. Корзникова Е. А., Шарапов Е. А., Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование кинетики упорядочения бинарного сплава в процессе диффузионной сварки // Materials. Technologies. Design. 2019. Т. 1. № 1. С. 58-64.

MATHEMATICAL MODEL FOR ORDERING THREE-COMPONENT ALLOY

A. R. Khalikov¹, V. T. Nguyen¹, S. V. Dmitriev^{2,3}

¹ Ufa State Aviation Technical University

² Institute for Problems of Superplasticity of Metals RAS, Ufa

³ Ufa State Petroleum Technical University

The paper presents a mathematical model for the ordering of a three-component alloy by the vacancy diffusion mechanism. The model is used to simulate phase transitions by the Monte Carlo method, construct the structures of ordered alloys for calculating order parameters, etc.

Keywords: Monte Carlo method, diffusion, metal, alloy, intermetallic compound, order parameters, Morse potential.

МЕТОД КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ВОЛН ДЛЯ ОПИСАНИЯ ВСЕХ ВОЗМОЖНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ УПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВОВ

А. Р. Халиков¹, В. Т. Нгуен¹, С. В. Дмитриев^{2,3}

¹Уфимский государственный авиационный технический университет

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа

³Уфимский государственный нефтяной технический университет

khalikov.albert.r@gmail.com

Процедура описания всех возможных энергетических состояний основывается на методе концентрационных волн, предложенном Хачатуряном. В рамках этого метода осуществляется полный перебор структур, получаемых суперпозицией N плоских концентрационных волн со всеми возможными волновыми векторами, при условии сохранения заданной стехиометрии.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, диффузия, металл, сплав, интерметаллид, параметры порядка.

В работе предложен алгоритм определения границ изменения параметров порядка для структуры стехиометрии $AmBnCk$, заданной на произвольной решетке, при учете парных межатомных взаимодействий в первых координационных сферах [1]. При решении данной задачи учитываются только структурные характеристики сплава, а величины энергий межатомных взаимодействий не вовлекаются в рассмотрение [2]. Алгоритм применен для тройных сплавов стехиометрического состава при учете взаимодействий атомов в двух первых координационных сферах [3-19].

Представляется интересным, решение задачи об описании всех возможных энергетических состояний, реализуемых в структуре заданного состава для заданной кристаллической решетки в предположении, что энергии межатомных взаимодействий могут принимать любые значения, при этом учитываются парные связи атомов в нескольких первых координационных сферах. Решение данной задачи позволит описать возможные сверхструктуры, реализуемые в сплаве заданной стехиометрии, при заданной топологии решетки, на которой расположены атомы сплава и при заданном числе координационных сфер парных межатомных взаимодействий. Предложен алгоритм решения данной задачи, основанный на методе концентрационных волн [1].

Для определения диапазона изменения параметров порядка α_i использовался метод концентрационных волн [6], адаптированный для целей данного исследования следующим образом. Рассматривается расчетная ячейка с наложенными периодическими граничными условиями, содержащая $N_x \times N_y \times N_z$ атомов. Далее вычисляются значения

$$C_{ijl} = \sin\left(\frac{2\pi i k_x^{(1)}}{N_x} + \frac{2\pi i k_y^{(1)}}{N_y} + \frac{2\pi i k_z^{(1)}}{N_z} + \varepsilon_1\right) + \sin\left(\frac{2\pi i k_x^{(2)}}{N_x} + \frac{2\pi i k_y^{(2)}}{N_y} + \frac{2\pi i k_z^{(2)}}{N_z} + \varepsilon_2\right) + \sin\left(\frac{2\pi i k_x^{(3)}}{N_x} + \frac{2\pi i k_y^{(3)}}{N_y} + \frac{2\pi i k_z^{(3)}}{N_z} + \varepsilon_3\right) + C, \quad (1)$$

где $0 \leq i \times N_x$, $0 \leq i \times N_y$, $0 \leq i \times N_z$. Компоненты векторов $\mathbf{k}^{(1)}$, $\mathbf{k}^{(2)}$, $\mathbf{k}^{(3)}$ в выражении (10) имеют целочисленные значения $0 \leq k_x^{(1)}, k_x^{(2)}, k_x^{(3)} \leq N_x$, $0 \leq k_y^{(1)}, k_y^{(2)}, k_y^{(3)} \leq N_y$, $0 \leq k_z^{(1)}, k_z^{(2)}, k_z^{(3)} \leq N_z$. Сдвиги фаз ε_1 , ε_2 , ε_3 , введены для того, чтобы избежать обращения чисел C_{ijl} в ноль. Константа C определяет стехиометрию структуры и для трёхкомпонентного сплава $A_m B_n C_k$ следует взять

$$C = \cos(\pi \cdot c_A) - \cos(\pi \cdot c_B). \quad (2)$$

С помощью чисел C_{ijl} производится заполнение расчетной ячейки атомами сортов A , B и C таким образом, что узлу с номером (i, j, l) приписывается сорт A , если

$$C_{ijl} \geq [2 \cos(\pi \cdot c_A) - 2 \cos(\pi \cdot c_B)], \quad (3)$$

и сорт B , если выполняется условие

$$\begin{cases} C_{ijl} > [-2 \cos(\pi \cdot c_B) + \cos(\pi \cdot c_A)], \\ C_{ijl} < [2 \cos(\pi \cdot c_A) - \cos(\pi \cdot c_B)]. \end{cases} \quad (4)$$

При заполнении расчетной ячейки атому присваивается сорт C , если

$$C_{ijl} \leq [-2 \cos(\pi \cdot c_B) + 2 \cos(\pi \cdot c_A)]. \quad (5)$$

После заполнения ячейки атомами рассчитывается стехиометрия сплава и, если она нарушена, данная структура исключается из рассмотрения. Для структур со стехиометрией $A_m B_n C_k$ рассчитываются параметры ближнего порядка $\alpha_{KL}^{(i)}$, $i=1, \dots, I$ и отображаются точкой в I -мерном пространстве $(\alpha_1, \dots, \alpha_I)$. Данная процедура выполняется для всех возможных векторов $\mathbf{k}^{(1)}$, $\mathbf{k}^{(2)}$, $\mathbf{k}^{(3)}$, что, при достаточно больших N_x , N_y и N_z , дает возможность получить представление о диапазонах возможного изменения параметров порядка $\alpha_{KL}^{(i)}$.

Описанный алгоритм намного более эффективен, чем метод полного перебора расположения атомов сортов A и B по ячейке периодичности, поскольку его применение ограничено сравнительно малыми размерами ячейки, N_x , N_y и N_z , что не позволяет описать некоторые из возможных структур.

Области допустимых значений параметров ближнего порядка на двух первых координационных сферах, $\alpha_{AB}^{(1)}$, $\alpha_{AB}^{(2)}$, $\alpha_{AC}^{(1)}$, $\alpha_{AC}^{(2)}$, $\alpha_{BC}^{(1)}$, и $\alpha_{BC}^{(2)}$, полученные с использованием (10), приведены на рис. 1.

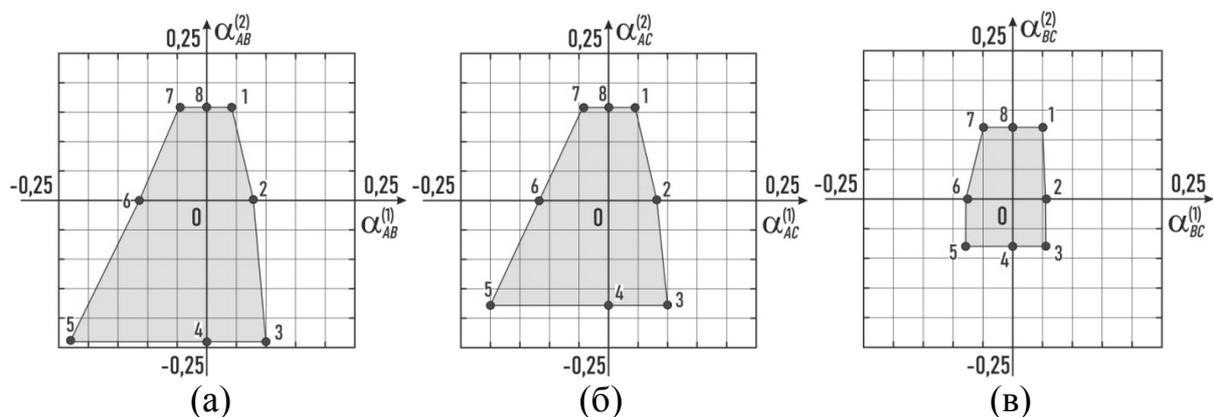


Рис. 1. Область допустимых значений параметров ближнего порядка $\alpha_{AB}^{(1)}$ и $\alpha_{AB}^{(2)}$ (а), $\alpha_{AC}^{(1)}$ и $\alpha_{AC}^{(2)}$ (б), $\alpha_{BC}^{(1)}$ и $\alpha_{BC}^{(2)}$ (в) для сплава стехиометрии A_3BC на ГЦК решетке

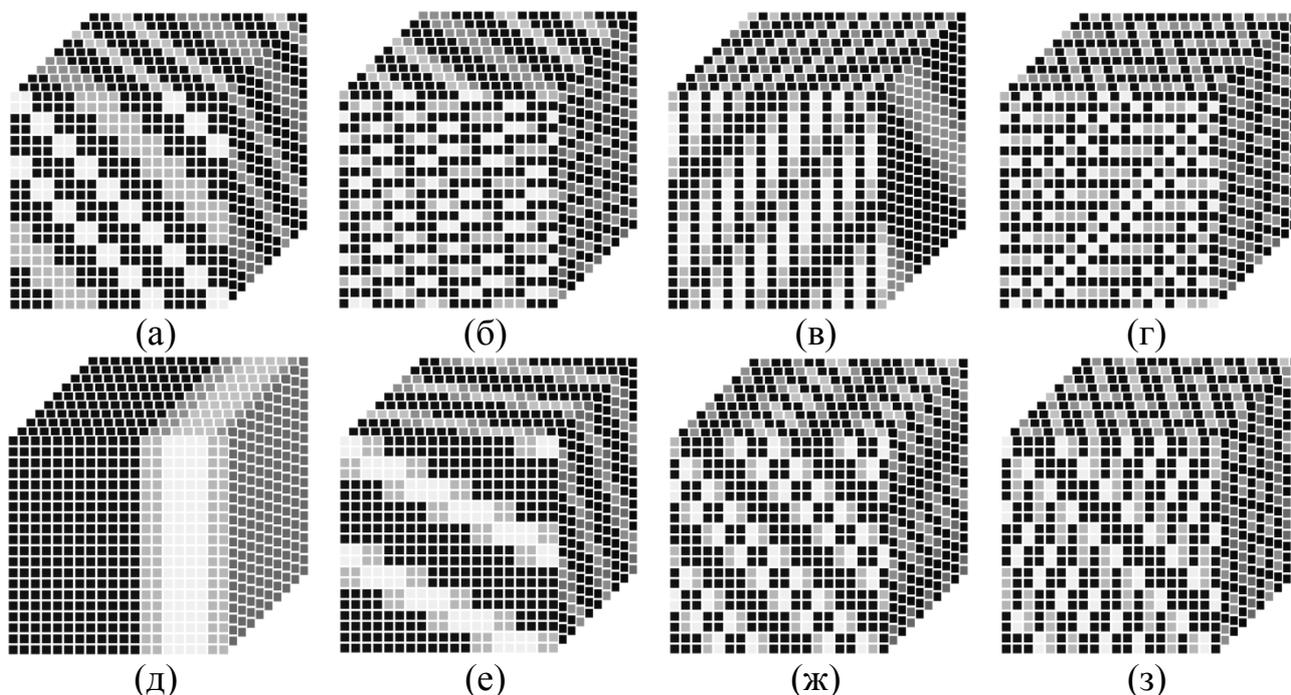


Рис. 2. Примеры структур сплава A_3BC , реализуемых на ГЦК решетке для области допустимых значений параметров ближнего порядка $\alpha_{AB}^{(1)}$ и $\alpha_{AB}^{(2)}$: (а) – структура с большой длиной волны концентраций, (б) – полосчатая структура с минимальной длиной волны, (в) – полосчатая структура с большой длиной волны, (г) – структура с зигзагообразным заполнением компонент сплава, (д) – структура эвтектики (полное расслоение сплава на отдельные фазы), (е-з) – различные варианты смеси эвтектики и упорядоченных фаз. Панели (а-з) соответствуют точкам (1-8) на рис. 1

На рис. 2 (а-з) показаны типы сплавов, соответствующих точкам (1)-(8) областей, представленных на рис. 1. Узлы, занятые атомами сортов A , B и C показаны черным, темно-серым и светло-серым, соответственно.

Литература

1. Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974. 384 с.
2. Старенченко С. В., Козлов Э. В., Старенченко В. А. Закономерности термического фазового перехода порядок-беспорядок в сплавах со сверхструктурами $L1_2$, $L1_2(M)$, $L1_2(MM)$, $D1_a$. Томск: Изд-во научно-технической литературы, 2007. 268 с.
3. Халиков А. Р. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. Т.8, №.4. С. 109-116.
4. Халиков А. Р., Шарапов Е. А., Корзникова Е. А., Валитов В. А., Дмитриев С. В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2018. Т. 15. № 4. С. 482-488.
5. Лобзенко И. П., Халиков А. Р., Шарапов Е. А., Корзникова Е. А., Семенов А. С., Дмитриев С. В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2019. Т. 16. № 1. С. 47-54.
6. Халиков А. Р., Дмитриев С. В. // Прикладная физика и математика. 2018. № 4. С. 3-9.
7. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Расчет энергий межатомных взаимодействий упорядоченных бинарных сплавов с применением метода генетического алгоритма // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2020612434, 21.02.2020. Заявка № 2020611582 от 17.02.2020.
8. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В., Планарные сверхструктурные дефекты тройных упорядочивающихся сплавов Гейслера [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 129-130.
9. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 131-133.
10. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Хазгалиев Р. Г., Дмитриев С. В. Моделирование фазового перехода на границе контакта атомов двух металлов состава $AnBm$ на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 134-135.
11. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Применение метода генетического алгоритма для расчета энергий межатомных взаимодействий упорядоченных сплавов составов $AnBm$ [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 137-138.
12. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Описание всех возможных структур трехкомпонентного сплава состава ABC на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 143-144.
13. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Точилкина С. В., Хазгалиев Р. Г., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло диффузии титана и никеля в процессе сварки давлением [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент. Материалы XII Международной научно-инновационной молодежной конференции. 2020. С. 164-167.
14. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Точилкина С. В., Галиева Э. В., Дмитриев С. В., Валитов В. А. Моделирование структуры жаропрочного сплава ЭП975 при 1000 °С методом Монте-Карло [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и

инновационный менеджмент. Материалы XII Международной научно-инновационной молодёжной конференции. 2020. С. 184-186.

15. Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2019663279, 15.10.2019. Заявка № 2019662341 от 07.10.2019.

16. Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование структуры бинарных сплавов методом Монте-Карло // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2019663426, 16.10.2019. Заявка № 2019662316 от 07.10.2019.

17. Халиков А. Р., Галиева Э. В., Дмитриев С. В., Валитов В. А. Моделирование структуры жаропрочного сплава ВКНА-25 при 1000 °С методом Монте-Карло в приближении жесткой кристаллической решетки [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент. Материалы XI Международной научно-инновационной молодёжной конференции. 2019. С. 253-255.

18. Халиков А. Р., Шарапов Е. А., Корзникова Е. А., Потехаев А. И., Старостенков М. Д., Галиева Э. В., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах // Известия высших учебных заведений. Физика. 2019. Т. 62. № 4 (736). С. 119-124.

19. Корзникова Е. А., Шарапов Е. А., Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование кинетики упорядочения бинарного сплава в процессе диффузионной сварки // Materials. Technologies. Design. 2019. Т. 1. № 1. С. 58-64.

METHOD OF CONCENTRATION WAVES FOR DESCRIPTION OF ALL POSSIBLE ENERGY STATES OF THREE-COMPONENT ORDERED ALLOYS

A. R. Khalikov¹, V. T. Nguyen¹, S. V. Dmitriev^{2,3}

¹ Ufa State Aviation Technical University

² Institute for Problems of Superplasticity of Metals RAS, Ufa

³ Ufa State Petroleum Technical University

The procedure for describing all possible energy states is based on the concentration wave method proposed by Khachaturian. Within the framework of this method, a complete enumeration of the structures obtained by the superposition of N plane concentration waves with all possible wave vectors is carried out, provided that the given stoichiometry is preserved.

Keywords: Monte Carlo method, diffusion, metal, alloy, intermetallic compound, order parameters.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ДИФфуЗИОННОЙ СВАРКИ РАЗНОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ЧЕРЕЗ ПРОКЛАДКУ

А. Р. Халиков¹, В. Т. Нгуен¹, С. В. Дмитриев^{2,3}

¹Уфимский государственный авиационный технический университет

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа

³Уфимский государственный нефтяной технический университет

khalikov.albert.r@gmail.com

В настоящее время важной фундаментальной проблемой, имеющей прикладное значение, является получение высококачественных твердофазных соединений различных металлов. Одной из проблем, возникающих при сварке разнородных металлов, является образование хрупких интерметаллидных фаз в зоне соединения, которые снижают механические свойства деталей. Одним из путей решения данной проблемы является использование прокладки из третьего металла с целью подавления образования вредных фаз.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, диффузия, металл, сплав, интерметаллид, параметры порядка.

В работе рассматривается сварка разнородных материалов [1-5]. Моделирование проводилось для расчетной ячейки, содержащей 400×50 атомов, занимающих узлы квадратной двумерной решетки. Компоненты *A*, *B* и *C* в начальный момент времени полностью разделены (см. рис. 1) и на расчетную ячейку наложены периодические граничные условия в обоих координатных направлениях. Таким образом, на левом и правом краях расчетной ячейки в контакте находятся материалы *A* и *B*, а в средней части расчетной ячейки между этими материалами помещена тонкая прослойка атомов сорта *C*. Содержание компонент следующее: *A* и *B* по 47%, *C* – 6%.

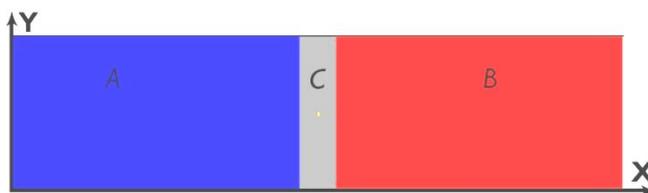


Рис. 1. Начальное распределение компонент *A*, *B* и *C* в расчетной ячейке с периодическими граничными условиями. Вдоль оси *X* взято 400 атомов, вдоль оси *Y* – 50

В центр расчетной области вводилась одна вакансия, что соответствовало концентрации вакансий $5 \cdot 10^{-5}$.

На рис. 2 представлено состояние системы после $98 \cdot 10^5$ элементарных актов диффузии при $T = 700$ К, при этом вдоль оси *X* для каждого «столбца» из 50 атомов рассчитаны следующие параметры: концентрации атомов каждого типа

(C_A , C_B , C_C), параметры порядка на 1 и 2 координационных сферах для различных пар типов атомов ($\eta_{KL}^{(i)} = 4\omega_{KL}^{(i)}$). Видно, что в силу граничных условий на «краях» системы нарастает интерметаллидная AB фаза, что отражается на графике соответствующего параметра порядка стремлением $\eta_1^{(AB)}$ к 1, а $\eta_2^{(AB)}$ к -1.

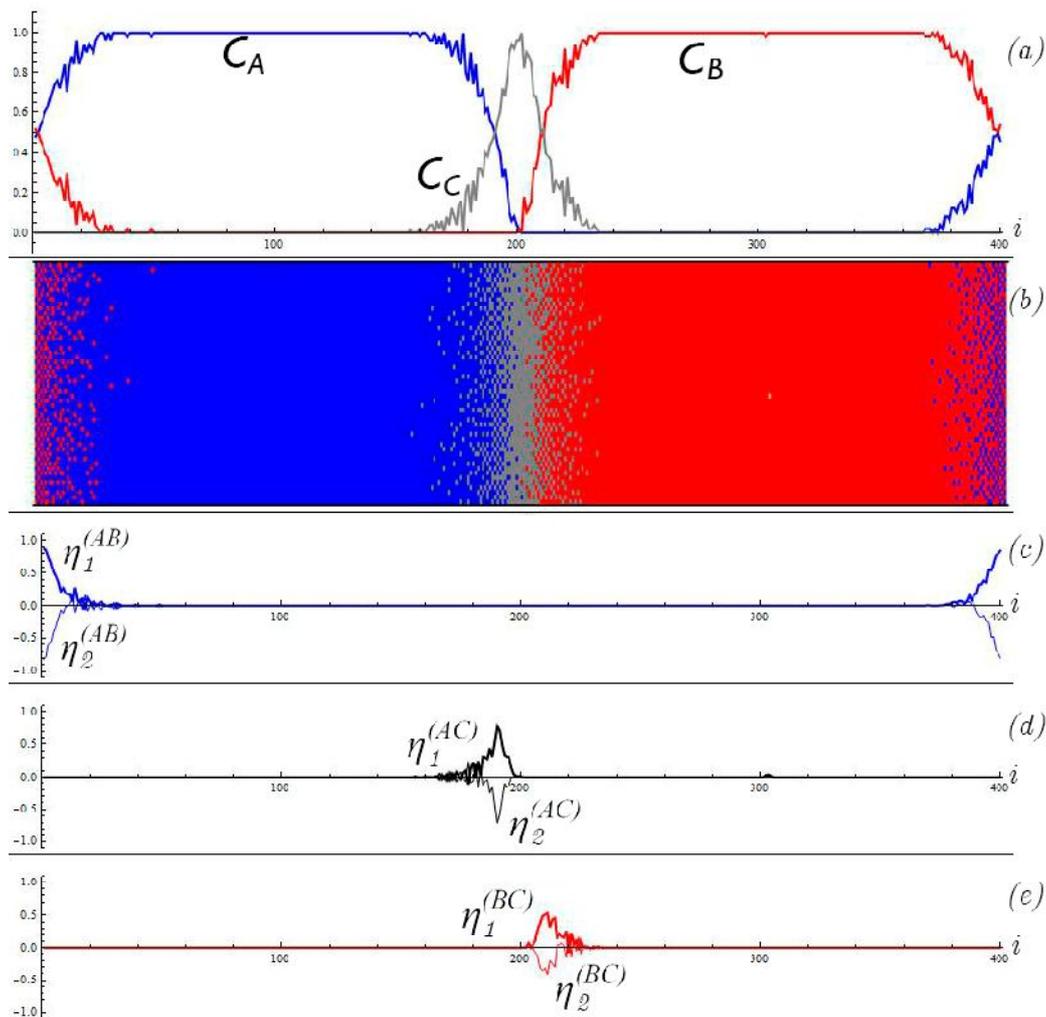


Рис. 2. Состояние системы по прошествии $98 \cdot 10^5$ элементарных актов диффузии при $T = 700$ К; (a) – профиль концентраций вдоль оси X ; (b) – распределение атомов в системе (в силу периодических граничных условий, на краях системы так же можно видеть перемешивание атомов); (c), (d), (e) – параметры порядка соответствующих пар атомов на первой (более жирная линия) и второй (более тонкая линия) координационных сферах в зависимости от номера «столбца» атомов

Проведено численное моделирование процесса диффузионной сварки двух металлов через прокладку [6-22] небольшой толщины при $T = 700$ К. Проанализирована эволюция во времени концентраций компонент и параметров порядка, идентифицирующих наличие интерметаллидных фаз. Для выбранной температуры определен момент времени, когда в зоне сварки через прокладку реализуется равномерное перемешивание атомов трех сортов, что может повы-

сить механические свойства соединения за счет устранения вредной интерметаллидной фазы *AB*.

Литература

1. Люшинский А. В. Диффузионная сварка разнородных материалов: учеб. пособие для студ. высш. учеб. Заведений. – М.: Издательский центр «Академия», 2006. – 208 с.
2. Красулин Ю. Л., Назаров Г. В. Микросварка давлением. – М.: Металлургия, 1976. – 160 с.
3. Каракозов Э. С. Соединение металлов в твердой фазе. М.: Металлургия, 1976. – 264 с.
4. Povarova K. B., Valitov V. A., Ovsepyan S. V., et al. Study of the properties and the choice of alloys for bladed disks (blisks) and a method for their joining // Russ Metall. – 2014. – V.9. – P. 733-741.
5. Shirzadi A., Wallach E. New method to diffusion bond superalloys // Sci Technol Welding Joining. – 2004. – V.9. – P. 37-40.
6. Халиков А. Р. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. Т.8, №4. С. 109-116.
7. Халиков А. Р., Шарапов Е. А., Корзникова Е. А., Валитов В. А., Дмитриев С. В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2018. Т. 15. № 4. С. 482-488.
8. Лобзенко И. П., Халиков А. Р., Шарапов Е. А., Корзникова Е. А., Семенов А. С., Дмитриев С. В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2019. Т. 16. № 1. С. 47-54.
9. Халиков А. Р., Дмитриев С. В. // Прикладная физика и математика. 2018. № 4. С. 3-9.
10. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Расчет энергий межатомных взаимодействий упорядоченных бинарных сплавов с применением метода генетического алгоритма // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2020612434, 21.02.2020. Заявка № 2020611582 от 17.02.2020.
11. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Планарные сверхструктурные дефекты тройных упорядочивающихся сплавов Гейслера [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 129-130.
12. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 131-133.
13. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Хазгалиев Р. Г., Дмитриев С. В. Моделирование фазового перехода на границе контакта атомов двух металлов состава $AlVn$ на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 134-135.
14. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Применение метода генетического алгоритма для расчета энергий межатомных взаимодействий упорядоченных сплавов составов $AlVn$ [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 137-138.
15. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Описание всех возможных структур трехкомпонентного сплава состава ABC на основе ГЦК решетки [Текст] // В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара. Под редакцией М. Д. Старостенкова. 2020. С. 143-144.
16. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Точилкина С. В., Хазгалиев Р. Г., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло диффузии титана и никеля в процессе сварки давлением [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и иннова-

ционный менеджмент. Материалы XII Международной научно-инновационной молодёжной конференции. 2020. С. 164-167.

17. Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Точилкина С. В., Галиева Э. В., Дмитриев С. В., Валитов В. А. Моделирование структуры жаропрочного сплава ЭП975 при 1000 °С методом Монте-Карло [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент. Материалы XII Международной научно-инновационной молодёжной конференции. 2020. С. 184-186.

18. Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2019663279, 15.10.2019. Заявка № 2019662341 от 07.10.2019.

19. Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование структуры бинарных сплавов методом Монте-Карло // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2019663426, 16.10.2019. Заявка № 2019662316 от 07.10.2019.

20. Халиков А. Р., Галиева Э. В., Дмитриев С. В., Валитов В. А. Моделирование структуры жаропрочного сплава ВКНА-25 при 1000 °С методом Монте-Карло в приближении жесткой кристаллической решетки [Текст] // В сборнике: Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент. Материалы XI Международной научно-инновационной молодёжной конференции. 2019. С. 253-255.

21. Халиков А. Р., Шарапов Е. А., Корзникова Е. А., Потеев А. И., Старостенков М. Д., Галиева Э. В., Дмитриев С. В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах // Известия высших учебных заведений. Физика. 2019. Т. 62. № 4 (736). С. 119-124.

22. Корзникова Е. А., Шарапов Е. А., Халиков А. Р., Дмитриев С. В. Моделирование кинетики упорядочения бинарного сплава в процессе диффузионной сварки // Materials. Technologies. Design. 2019. Т. 1. № 1. С. 58-64.

RESULTS OF NUMERICAL SIMULATION OF THE PROCESS OF DIFFUSION WELDING OF DIFFERENT METALS THROUGH THE GASKET

A. R. Khalikov¹, V. T. Nguyen¹, S. V. Dmitriev^{2,3}

¹ Ufa State Aviation Technical University

² Institute for Problems of Superplasticity of Metals RAS, Ufa

³ Ufa State Petroleum Technical University

Currently, an important fundamental problem of practical importance is the production of high-quality solid-phase compounds of various metals. One of the problems arising when welding dissimilar metals is the formation of brittle intermetallic phases in the joint zone, which reduces the mechanical properties of parts. One of the ways to solve this problem is to use a third metal spacer to suppress the formation of harmful phases.

Keywords: Monte Carlo method, diffusion, metal, alloy, intermetallic compound, order parameters.

ПРИМЕНЕНИЕ ГЕНЕРАТИВНОЙ СВЕРТОЧНОЙ НЕЙРОСЕТЕВОЙ МОДЕЛИ В ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ МЕХАНИКИ

А. В. Сеничев, П. В. Васильев

Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону
alexandr.senichev@gmail.com

В работе авторы предлагают нейросетевой подход решения обратных задач механики. На основе техник ультразвукового неразрушающего контроля и генеративных нейросетевых моделей возможно проведение идентификации дефектов в твердых телах ответственных конструкций. Предлагается оптимизированная модель генеративной нейронной сети, основанная на архитектуре вида “энкодер-декодер”. Основной задачей данной работы является исследование способности модели генерировать предположительную форму дефектов на основе входных параметров. В качестве входных параметров могут выступать ультразвуковые отклики, полученные в ходе зондирования. Дефекты моделируются в виде простых геометрических форм. Рассматриваются влияния параметров обучающей выборки, комбинации всевозможных типов дефектов и других гиперпараметров на качество работы генеративной модели.

Ключевые слова: оптимизация гиперпараметров модели, энкодер-декодер, неразрушающий контроль, глубокие генеративные нейронные сети.

Введение

В данной работе мы используем подход по автоматическому извлечению признаков из входного набора данных, с помощью нейросетевых технологий, что позволяет автоматизировать процесс сбора данных и повысить качество получаемых параметров. Применяемый подход позволяет отфильтровать и селективно выделить ключевые признаки, которые играют главную роль в процессе обучения нейронной сети.

Для решения обратных задач механики используется метод неразрушающего контроля, который позволяет провести мониторинг системы, без ее полной остановки или вывода из строя составляющих её частей. На основе данного метода, в совокупности с технологиями машинного обучения, происходит локализация трещин и их восстановление на основе полученных данных геометрических параметров для задачи по дальнейшей идентификации. На сегодняшний день, нейронные сети показывают высокую эффективность по работе с большим массивом данных, что актуально в задачах механики.

Технологии сверточных нейронных сетей показывает впечатляющие результаты в классических задачах распознавания рукописных цифр, в работах [1, 2] продемонстрировано их использование. Такие ведущие мировые компании, как Google, Tesla и Yandex, также используют нейросетевой подход на основе сверточных нейронных сетей в распознавании номеров домов на основе большого набора данных о номерах домов [3] и в задаче распознавания и классификации дорожных знаков [4].

В работе [5] авторы показали современный уровень развития искусственного интеллекта и машинного обучения, а также обозначили дальнейшие перспективы развития в этом направлении. Благодаря значительному росту вычис-

лительных мощностей систем, уменьшился риск переобучения систем [6], а также появляется больше перспектив для социально-значимого и технологического применения, которые могут быть направлены на разработку новых интеллектуальных подходов для решения задач идентификации поверхностных и внутренних дефектов. Что в свою очередь повлечет расширение области применения методов машинного обучения и внедрение прогрессивных нейросетевых технологий в процессы контроля состояния деталей машин и механизмов.

В результате постоянного совершенствования сверточных нейронных сетей и роста вычислительных мощностей, повысился уровень анализа и выделения обобщений для изображений. Авторы в работе [7] показали новые возможности сверточных нейронных сетей и паттерны по их моделированию, а работы [8, 9] были направлены на поиск объектов, а также обнаружение транспортных средств в потоке.

В работе [13] авторы показали эффективность применения нейросетевых методов, а именно сверточных нейронных сетей, в сочетании с классическими подходами неразрушающего ультразвукового контроля. Пристальное внимание было уделено специфике решаемой проблемы, в связи с этим использовались специальные, регуляризирующие техники как на уровне набора данных, так и на уровне гиперпараметров заданной модели. В условиях небольшого количества объема исходных данных, авторы успешно провели исследования по идентификации дефектов и сделали выводы, что предлагаемая модель, может быть использована в смежных областях и в задачах сегментации изображений.

Предлагаемый метод

Авторы работы представляют оригинальную модель глубокой генеративной сверточной нейронной сети. Данная модель предназначена для генерации изображений, содержащих различные формы дефектов вида геометрических примитивов. Для проведения работы был сгенерирован датасет из более чем 100 000 геометрических примитивных фигур, которые представляют собой трещины. Цель создания данной нейросетевой модели – это изучение влияния параметров обучающей выборки на результат работы модели, а также исследование вопроса о целесообразности комбинирования дефектов различных типов для повышения точности работы сети. На входе нейронной сети подаются параметры, определяющие класс фигуры и ее геометрические характеристики. На основе этих исследований можно построить более совершенную генеративную модель для применения и внедрения в технические и производственные процессы, способную восстанавливать форму внутренних дефектов в элементах конструкций на основе методов ультразвукового неразрушающего контроля.

Архитектура нейросетевой модели

В предлагаемой нейросетевой модели используются отдельные входные слои, связанные с полносвязными слоями. Этот прием обособления входной информации различных типов способствует повышению качества работы обученной нейросетевой модели. Первый вход состоит из 4 параметров, которые соответствуют четырем типам геометрических примитивов, второй вход содержит 5 параметров, параметры второго входа, описывают геометрические

особенности каждой представленной фигуры. Входные слои подключены к собственным связанным слоям, которые состоят из 64 нейронов. Связка входов и связанных слоев трансформируются в двухмерное представление. При использовании повышенной дискретизацией в связке с комбинацией слоев происходит генерация бинарного изображения. В данном подходе, используется Batch Normalization, описание которого представлено в работе [10]. Предлагаемая модель содержит 1 969 665 параметров обучения. На выходе нейросети получается бинарное изображение размером 128 на 128 пикселей.

Подготовка обучающего набора

Обучающий набор состоит из различных типов примитивов и их геометрических характеристик. Для получения точных результатов, на основе опыта в работе [14], которая была посвящена идентификации дефектов в полосе с покрытием, было решено использовать балансировку классов форм, которые имитируют трещины. На рис. 1а показано бинарное представление геометрических примитивов, которые используются в процессе обучения модели. Благодаря использованию балансировки была выявлена связь между средним значением площади фигур и качеством их генерации. На рис. 1б представлена средняя площадь фигур каждого обозначенного класса.

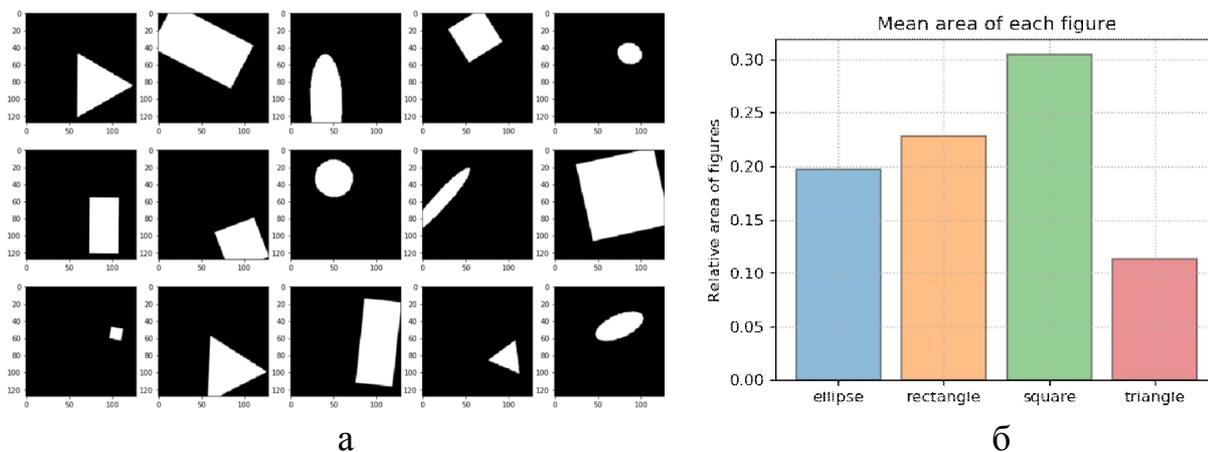


Рис. 1. Геометрические примитивы, моделирующие различные типы внутренних дефектов (а), средняя площадь примитивов каждого класса (б)

Обучение нейронной сети

Технически обучение нейронной сети заключается в том, чтобы найти коэффициенты связей между заданными нейронами. Само обучение направлено на выявление коэффициентов связей между ними и в нахождении зависимостей входных и выходных параметров. Для начала воспользуемся метрикой степени пересечения между двумя ограничивающими рамками, которая выступает в роли оценочной метрики, которая используется для измерения точности идентификации дефектов на конкретном наборе данных. И используем эквивалентную бинарную меру сходства. Данный коэффициент используется для оценки схожести двух выборок. Также необходимо использовать функцию потерь, которая будет типа $1 - J$. Функция потерь используется для прогнозирования ошибок в работе нейронной сети.

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

Для обучения используется алгоритм оптимизации Adam – это алгоритм оптимизации замены стохастического градиентного спуска для обучения моделей глубокого обучения, он сочетает в себе лучшие свойства алгоритмов AdaGrad и RMSProp [11]. Также выполняется Batch Normalization для внутреннего ковариационного сдвига путем нормализации входных распределений каждого слоя и используется инициализация весов в слоях нейронной сети с помощью метода Glorot [12].

Параметр скорости обучения меняется с каждой эпохой. В рамках исследуемой задачи было установлено оптимальное количество эпох обучения, равное 15. В ходе исследования не было установлено связи между увеличением количества эпох и точности работы обученной сети.

Проведена тонкая настройка модели нейронной сети и подобраны оптимальные параметры ее структуры с применением современных фреймворков Keras API и Tensorflow. Точность нейронных сетей с различными конфигурациями показана на рис. 2. Фиолетовый, синий и зеленый графики (1-3) соответствуют моделям, обучающимся на небольшом наборе данных, содержащем 20 000 элементов. Оранжевый график (4) – модель обучена на большом наборе данных, содержащем 50 000 выборок. Красный график (5) – в модели использовано больше сверточных слоев (3 против 1). Коричневый график (6) – окончательная доработанная модель с разделенными входами и сбалансированными классами фигур.

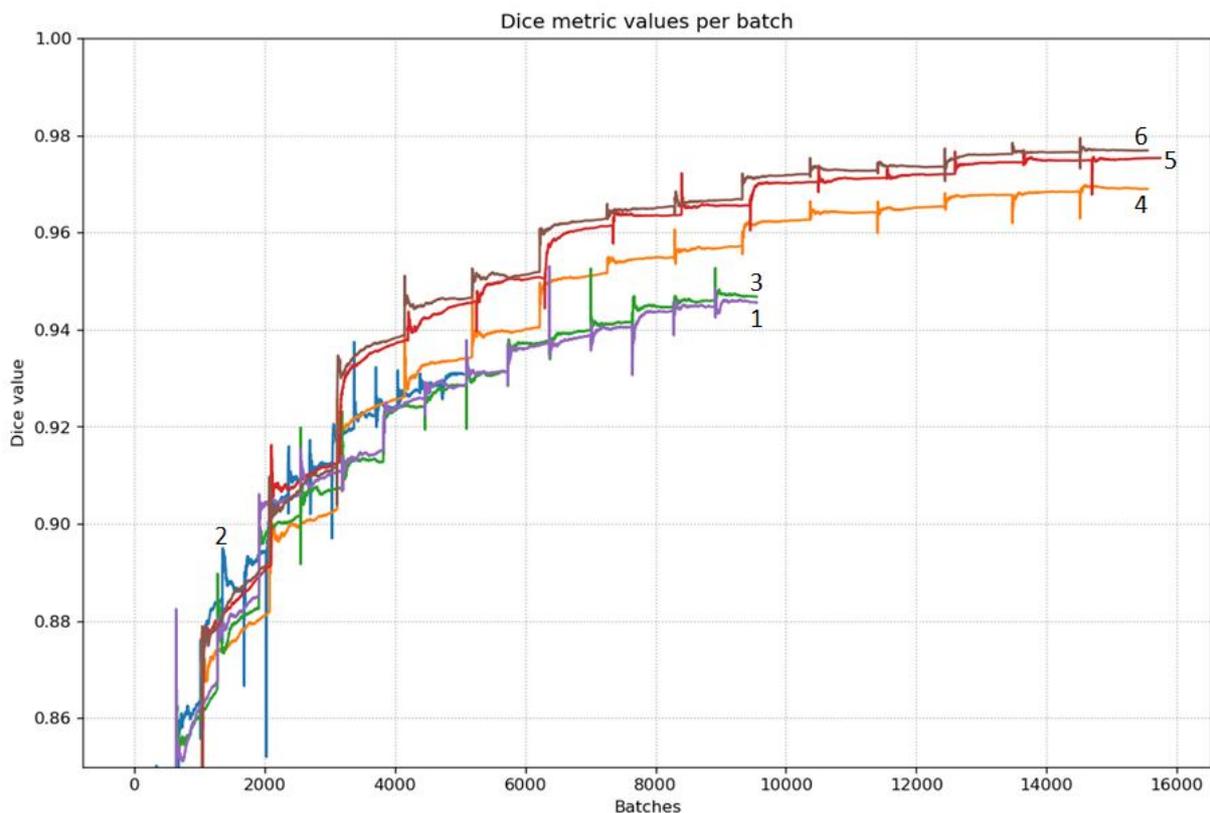


Рис. 2. Изменение точности работы нейросетевой модели в процессе обучения

Результаты

Последним этапом обучения нейронной сети является валидационная проверка на тестовом наборе данных. Набор данных для проверки обеспечивает объективную оценку соответствия модели набору обучающих данных при настройке гиперпараметров созданной модели. Проверка осуществляется путем подачи набора параметров на вход нейронной сети, а на выходе получается сгенерированная двоичная маска, которая содержит признаки, которые имитируют внутренний дефект или трещину.

Для наглядности, мы представили разницу (рис. 3) работы обученной сети и их сравнение с истинными значениями из тестовой выборки.

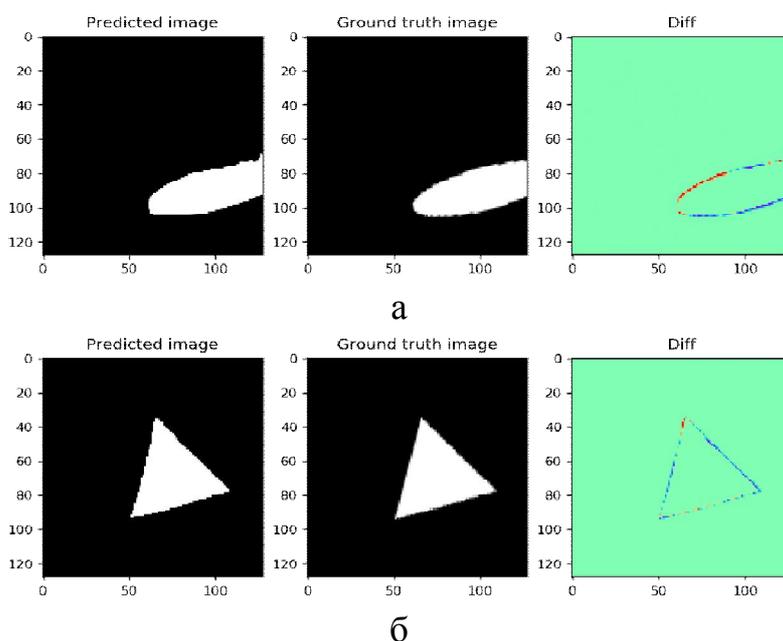


Рис. 3. Результаты работы нейронной сети. Сгенерированные бинарные маски на основе входных параметров соответствуют эллипсообразному внутреннему дефекту (а) и дефекту-включению (б)

В задачах такого типа хорошо зарекомендовали себя и наиболее часто применяются метрики Similarity, Precision, Recall, F1 (тот же Dice). На основе их значений мы можем выполнить тонкую настройку нейронной сети. На рис. 4 показана средняя ошибка работы нейронной сети для каждого класса геометрического примитива, имитирующего дефект.

Заключение

Основная цель проделанной работы – это мониторинг состояния элементов конструкций на основе методов неразрушающего контроля, с применением машинного обучения. По результатам работы мы получили модель генеративной сверточной нейронной сети. Предлагаемый подход позволяет имитировать визуальное представление трещин, что представляет возможным в дальнейшем использование построенной системы и ее дальнейших модификаций для решения обратных задач механики на основе методов неразрушающего контроля.

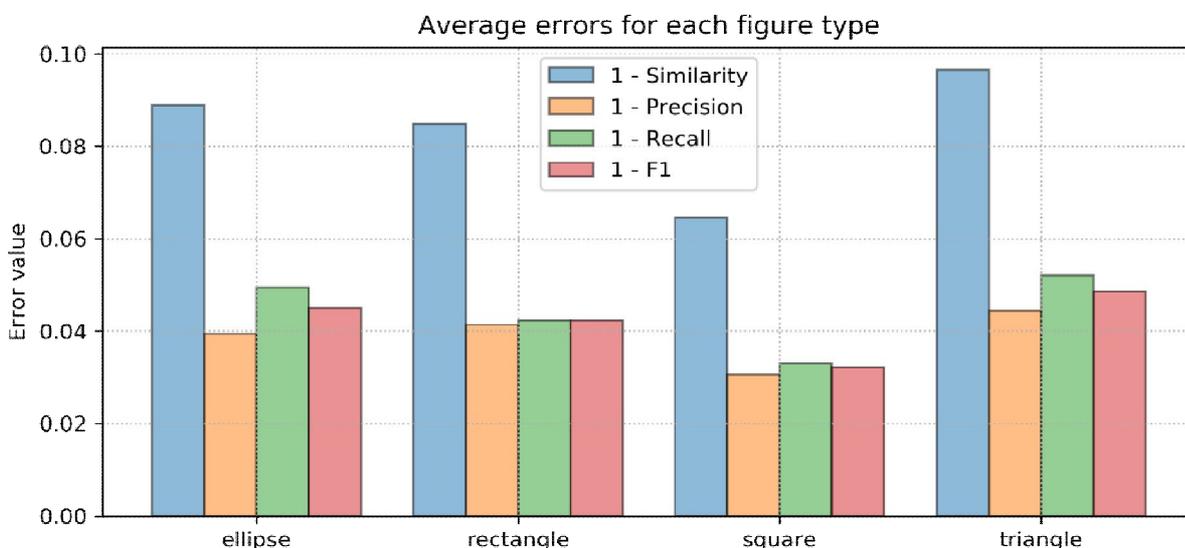


Рис. 4. Точность работы нейросетевой модели на основе наиболее репрезентативных метрик

Данная работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках проектов 20-31-90026 и 19-08-00074.

Литература

1. LeCun, Y., Bottou, L., Bengio, Y., Haffner, P.: Gradient-based learning applied to document recognition. *Proceedings of the IEEE* 86(11), 2278–2324 (1998).
2. Ciresan, D., Meier, U., Schmidhuber, J.: Multi-column deep neural networks for image classification. In: *Proc. of Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pp. 3642–3649 (June 2012).
3. Goodfellow, I. J., Bulatov, Y., Ibarz, J., Arnoud, S., Shet, V.: Multi-digit number recognition from street view imagery using deep convolutional neural networks. In: *Proc. of International Conference on Learning Representations (ICLR)* April 2014.
4. Ciresan, D., Meier, U., Masci, J., Schmidhuber, J.: A committee of neural networks for traffic sign classification. In: *Proc. of International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, pp. 1918–1921 (July 2011).
5. Arel, I., Rose, D. C., Karnowski, T. P.: Deep machine learning - a new frontier in artificial intelligence research. *IEEE Computational Intelligence Magazine* 5(4), 13–18 (2010).
6. Simard, P. Y., Steinkraus, D., Platt, J. C.: Best practices for convolutional neural networks applied to visual document analysis. In: *Proc. of International Conference on Document Analysis and Recognition (ICDAR)*, pp. 958–963 (2003).
7. C. Szegedy et al., "Going deeper with convolutions," 2015 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Boston, MA, 2015, pp. 1-9.
8. R. Girshick, J. Donahue, T. Darrell and J. Malik, "Rich Feature Hierarchies for Accurate Object Detection and Semantic Segmentation," 2014 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Columbus, OH, 2014, pp. 580-587.
9. X. Chen, S. Xiang, C. L. Liu and C. H. Pan, "Vehicle Detection in Satellite Images by Hybrid Deep Convolutional Neural Networks," in *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, vol. 11, no. 10, pp. 1797-1801, Oct. 2014.
10. S. Ioffe and C. Szegedy, "Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift," *CoRR*, vol. abs/1502.03167, 2015.
11. Kingma, Diederik & Ba, Jimmy. (2014). Adam: A Method for Stochastic Optimization. *International Conference on Learning Representations*.

12. Glorot, Xavier and Yoshua Bengio. "Understanding the difficulty of training deep feed-forward neural networks." AISTATS (2010).
13. Васильев П. В., Сеничев А. В. Применение нейросетевых технологий в задаче контроля поверхностных дефектов. Известия высших учебных заведений. Северо-кавказский регион. Технические науки. 2020; 1:33-40. <https://doi.org/10.17213/1560-3644-2020-1-33-40>.
14. Соболев Б. В., Соловьев А. Н., Рашидова Е. В., Васильев П. В. Идентификация трещиноподобного дефекта и исследование концентрации напряжений в полосе с покрытием // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2019. № 4. С. 165-174. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.4.16.

APPLICATION OF A GENERATIVE CONVOLUTIONAL NEURAL NETWORK MODEL IN INVERSE PROBLEMS OF MECHANICS

A. V. Senichev, P. V. Vasiliev

Don State Technical University, Rostov-on-Don

In this paper, the authors propose a neural network approach for solving inverse problems of mechanics. Based on the techniques of ultrasonic non-destructive testing and generative neural network models, it is possible to identify defects in solids of critical structures. An optimized model of a generative neural network based on an "encoder-decoder" architecture is proposed. The main objective of this work is to study the ability of the model to generate an assumed shape of defects based on input parameters. Ultrasonic responses obtained during sounding can be used as input parameters. Defects are modeled as simple geometric shapes. The influence of the parameters of the training sample, the combination of various types of defects and other hyperparameters on the quality of the generative model is considered.

Keywords: optimization of model hyperparameters, encoder-decoder, non-destructive testing, deep generative neural networks.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ЛЕВИТАЦИОННЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

И. Л. Батаронов, Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков, В. В. Пешков, В. А. Шунина

Воронежский государственный технический университет
vmfmm@mail.ru

Кратко рассмотрены основные работы по расчёту сверхпроводящих подвесов методом интегральных уравнений. В рамках интегральной формы уравнений Лондона рассчитаны распределение магнитной индукции, плотность токов в кольце и сфере и сила притяжения между ними во внешнем магнитном поле. Показана возможность устойчивой левитации шара вблизи центра кольца.

Ключевые слова: моделирование, мезоскопический, сверхпроводящий, подвес, уравнения Лондонов, интегральные уравнения

1. Введение

Впервые метод интегральных уравнений был применён к расчёту электро-механических характеристик сверхпроводящих подвесов в работе [1]. В ней численно решались интегральные уравнения Фредгольма 2-го рода для плотности магнитных псевдозарядов на поверхности осесимметричного сверхпроводящего тела в магнитном поле соосных с ним токонесущих катушек. В дальнейшем было показано [2], что распределение векторного магнитного потенциала в осесимметричном двухсвязном сверхпроводнике в магнитном поле определяется интегральным уравнением Фредгольма 1-го рода. В рамках этого подхода была рассчитана сила, действующая на сверхпроводящий шар со стороны сверхпроводящего тора с захваченным магнитным потоком [3], а также вычислена сила взаимодействия двух соосных сверхпроводящих колец с током [4]. В работе [5] разработаны дискретные математические модели, позволяющие численно моделировать произвольные осесимметричные сверхпроводящие левитационные системы. Общая теория расчёта сверхпроводящих подвесов на основе метода интегральных уравнений была развита в работе [6]. В этих работах не учитывалось проникновение магнитного потока внутрь сверхпроводника на лондоновскую глубину проникновения ($\lambda \sim 10^{-7}$ м). В случае мезоскопических сверхпроводящих подвесов [7, 8], размеры конструктивных элементов которых сопоставимы с λ , такое приближение неприемлемо. Необходимо учитывать проникновение магнитного поля внутрь сверхпроводника. Так, в работе [9] проведён численный анализ системы интегральных уравнений, описывающих распределение плотности токов в осесимметричных сверхпроводящих подвесах в рамках лондоновской электродинамики сверхпроводников.

Целью данной работы является расчёт распределения плотности токов и силы взаимодействия сверхпроводящих кольца и шара микронных размеров во внешнем постоянном магнитном поле в лондоновском приближении.

2. Интегральная форма уравнений Лондонов в осесимметричном случае и её дискретная модель

Распределение плотности индуцируемых токов в сверхпроводнике в постоянном магнитном поле в лондоновском приближении описывается системой уравнений Максвелла и Лондонов [10]

$$\nabla \times \vec{B} = \vec{j}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2)$$

$$\mu_0 \lambda_L^2 \nabla \times \vec{j} + \vec{B} = 0, \quad (3)$$

где \vec{B} – вектор магнитной индукции, \vec{j} – плотность тока, μ_0 – магнитная проницаемость вакуума, λ_L – лондоновская глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник,

Из уравнения (3) получается следующая связь между плотностью тока и векторным потенциалом \vec{A}

$$\mu_0 \lambda_L^2 \vec{j} + \vec{A} + \nabla \chi = 0, \quad (4)$$

где χ – однозначная скалярная функция, определяемая калибровкой векторного потенциала.

В случае лондоновской калибровки $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ и $\vec{A} \cdot \vec{n} = 0$ (\vec{n} – нормаль к поверхности сверхпроводника) выражение (4) принимает вид

$$\mu_0 \lambda_L^2 \vec{j} + \vec{A} = 0. \quad (5)$$

В осесимметричном случае векторный потенциал \vec{A} имеет в цилиндрической системе координат (ρ, φ, z) только одну компоненту A_φ .

Используя выражение для A_φ линейного кругового тока [11], интегрируя по площади S_0 поперечных сечений всех сверхпроводников, получим

$$A_\varphi^{(\text{int})} = \frac{\mu_0}{2\pi} \iint_{S_0} J_\varphi(\rho', z') \sqrt{\frac{\rho'}{\rho}} f(m) dS', \quad (6)$$

где J_φ – тангенциальная компонента плотности тока,

$$f(m) = \frac{1}{\sqrt{m}} [(2-m)F(m) - 2E(m)], \quad (7)$$

F и E – полные эллиптические интегралы 1-го и 2-го родов с параметром

$$m = \frac{4\rho\rho'}{(\rho + \rho')^2 + (z - z')^2}. \quad (8)$$

При наличии внешнего магнитного поля к $A_\varphi^{(\text{int})}$ добавляется векторный потенциал $A_\varphi^{(\text{ext})}$, который для рассматриваемого здесь случая однородного магнитного поля с индукцией B_0 , параллельного оси Oz , имеет вид [11]

$$A_\varphi^{(\text{ext})} = \frac{\rho B_0}{2}. \quad (9)$$

Подставляя (6) и (9) в (5), получим интегральное уравнение, описывающее распределение плотности токов в осесимметричной системе сверхпроводников [9]

$$\mu_0 \lambda^2 \rho J_\varphi + \frac{\mu_0}{2\pi} \iint_{S_0} \sqrt{\rho\rho'} f(m) J_\varphi(\rho', z') dS' = -\rho A_\varphi^{(\text{ext})}, \quad (10)$$

где ядро интегрального оператора $f(m)$ определяется формулами (7), (8). Это уравнение Фредгольма 2-го рода. При $\rho \rightarrow 0$ оно вырождается в уравнение 1-го рода, что приводит к плохой обусловленности задачи. Для устранения этого недостатка введем новую переменную

$$I_\varphi(\rho, z) = \rho J_\varphi(\rho, z), \quad (11)$$

В итоге уравнение (10) преобразуется к виду

$$\mu_0 \lambda^2 I_\varphi + \frac{\mu_0}{2\pi} \iint_{S_0} \sqrt{\frac{\rho}{\rho'}} f(m) I_\varphi(\rho', z') dS' = -\rho A_\varphi^{(\text{ext})}, \quad (12)$$

Решение данного уравнения уже является хорошо обусловленной задачей. Дискретная модель, соответствующая уравнению (12), будет имеет вид:

$$\lambda^2 I_{i,j} + \frac{1}{2\pi} \sum_{i',j'} Q_{i,j}^{i',j'} \Delta_{i'} \Delta_{j'} I_{i',j'} = -\frac{\rho_{i,j} A_{i,j}^{(\text{ext})}}{\mu_0}, \quad (13)$$

где

$$Q_{i,j}^{i',j'} = \begin{cases} \sqrt{\frac{\rho_{i,j}}{\rho_{i',j'}}} f(m_{i,j}^{i',j'}), & i \neq i' \text{ и } j \neq j', \\ \ln\left(\frac{16\rho}{\sqrt{\Delta_i^2 + \Delta_j^2}}\right) - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\Delta_i}{\Delta_j} \operatorname{tg}^{-1} \frac{\Delta_j}{\Delta_i} + \frac{\Delta_j}{\Delta_i} \operatorname{tg}^{-1} \frac{\Delta_i}{\Delta_j}\right), & \begin{cases} i = i', \\ j = j', \end{cases} \end{cases}$$

Δ_x, Δ_y = поперечные размеры ячеек разбиения сечения сверхпроводников.

По найденному решению уравнения (13) с можно вычислить z -компоненту силы, действующей на отдельные сверхпроводники:

$$F_z = \mu_0 \sum_{\substack{(i,j) \in \Omega \\ (i,j) \neq (i',j')}} I_{i,j} \frac{\Delta_i \Delta_j}{\sqrt{\rho_{i,j}}} \sum_{\substack{\forall i',j': \\ (i',j') \neq (i,j)}} \frac{z_{i,j} - z_{i',j'}}{(\rho_{i,j} + \rho_{i',j'})^2 + (z_{i,j} - z_{i',j'})^2} g(m_{i,j}^{i',j'}) I_{i',j'} \frac{\Delta_{i'} \Delta_{j'}}{\sqrt{\rho_{i',j'}}}. \quad (14)$$

Здесь Ω – множество узлов сетки в сечении данного тела, а также использовано обозначение

$$g(m) = \frac{1}{\sqrt{m}} \left[\frac{(2-m)E(m)}{1-m} - 2K(m) \right].$$

3. Результаты вычислительного эксперимента

Для расчётов распределения плотностей тока, напряженности магнитного поля, полного тока и сил в мезоскопических токнесущих сверхпроводящих элементах методом интегральных уравнений был разработан дополнительный

программный модуль к интегрированной системе компьютерного моделирования сверхпроводящих подвесов [12]. COMSOL Multiphysics использовался для графического представления результатов расчетов.

Была рассмотрена осесимметричная система из плоского кольца и шара (рис. 1).

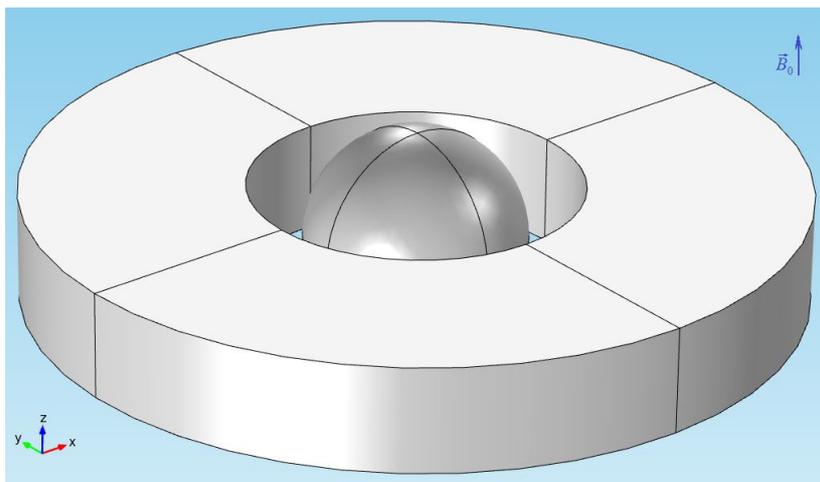


Рис. 1. Геометрическая модель системы кольцо-сфера и ее ориентация во внешнем постоянном магнитном поле

Центр сферы радиуса R совмещен с началом системы координат, центр кольца расположен на оси Oz в точке $z = -h$. Кольцо имеет прямоугольное поперечное сечение шириной a и высотой b , внутренний радиус кольца равен r . Расчет проводился для значений параметров $R = 1$ мкм, $b = 1$ мкм, $a = 2$ мкм, $r = 1.5$ мкм, $H_0 = 1 \cdot 10^4$ А/м и для двух значений глубины проникновения $\lambda = 0,09$ мкм и $\lambda = 0,45$ мкм.

Сила притяжения между кольцом и шаром на разных расстояниях между ними была рассчитана для значений $\lambda = 0,09$ и $\lambda = 0,45$ мкм (рис. 2). Из рисунка видно, что возможна устойчивая левитация мяча вблизи центра кольца.

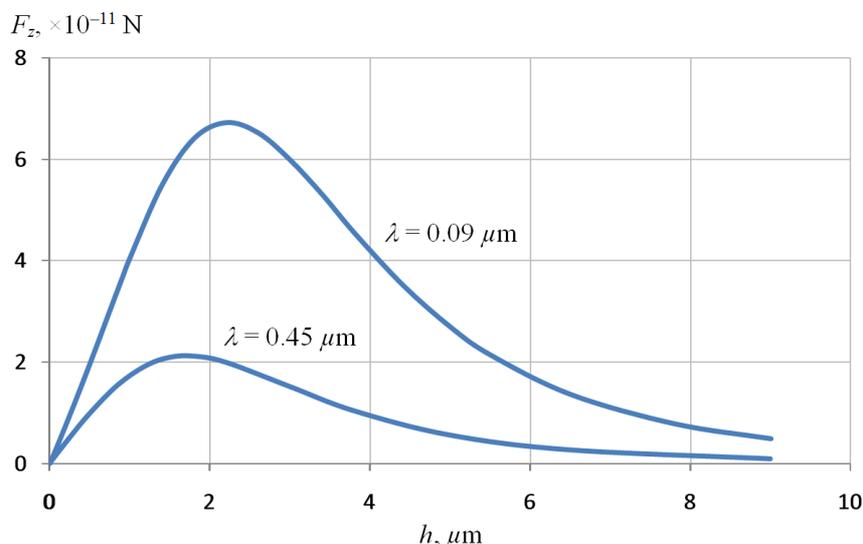


Рис. 2. Зависимость силы притяжения между кольцом и шаром от расстояния между их центрами

Результаты расчетов распределения магнитной индукции в сечении, проходящем через ось симметрии кольца и сферы, представлены на рис. 3-4.

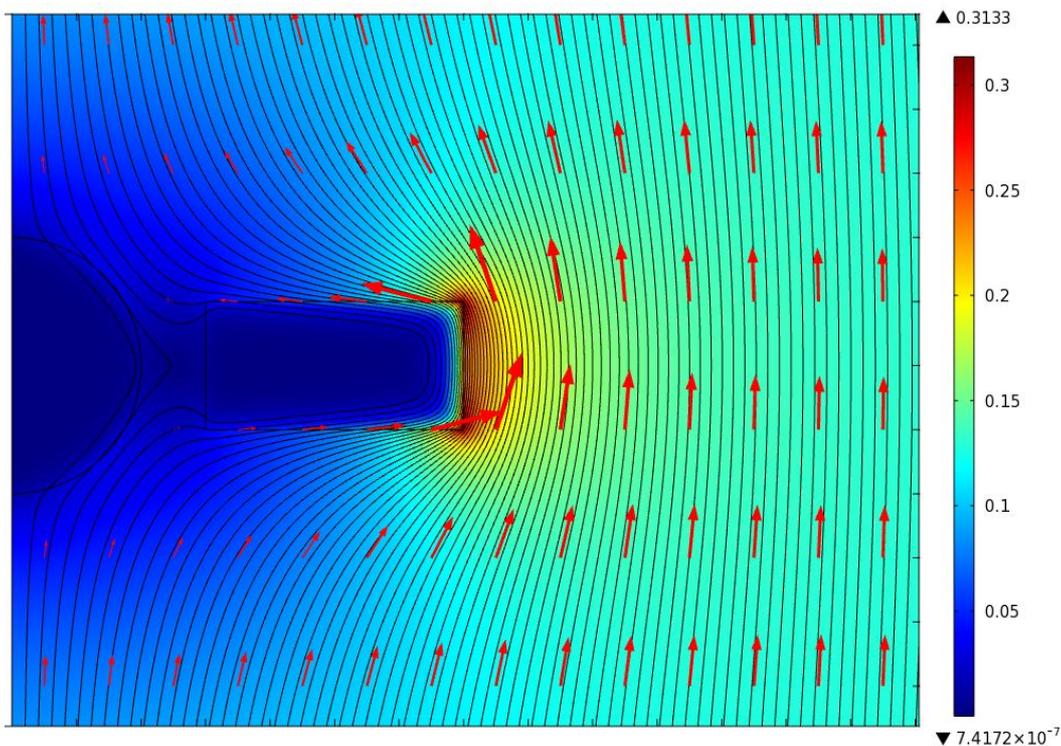


Рис. 3. Силовые линии и векторы магнитной индукции в непосредственной близости от сверхпроводящего кольца и шара во внешнем постоянном магнитном поле

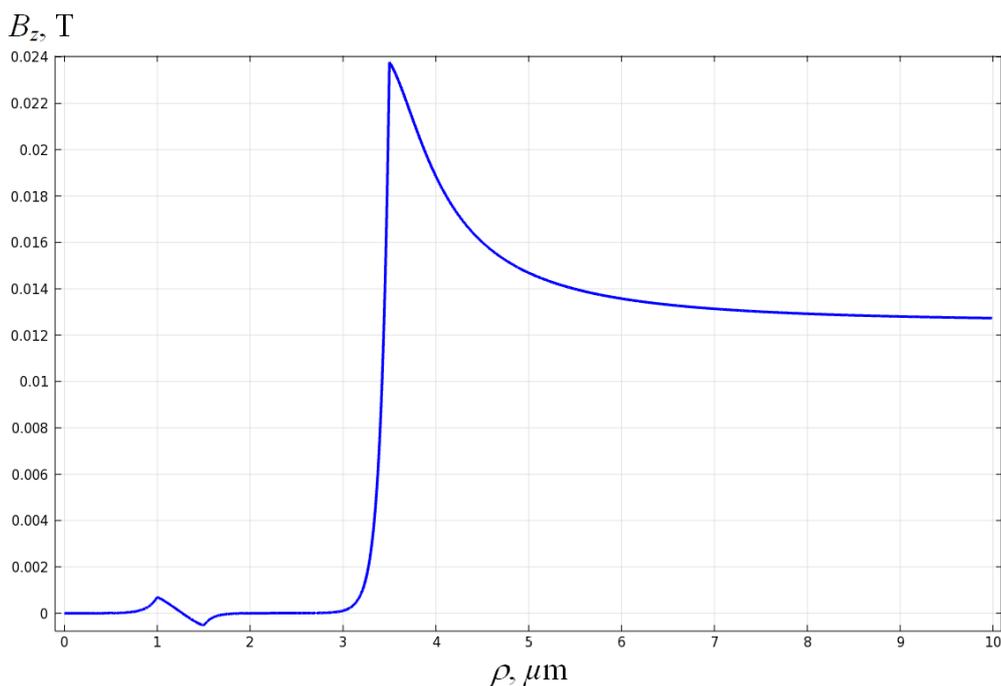


Рис. 4. Величина составляющей магнитной индукции B_z на линии, проходящей через центр сферы и кольцо перпендикулярно оси системы

На рис. 5-6 представлены результаты расчетов плотности тока в сечениях сферы и кольца.

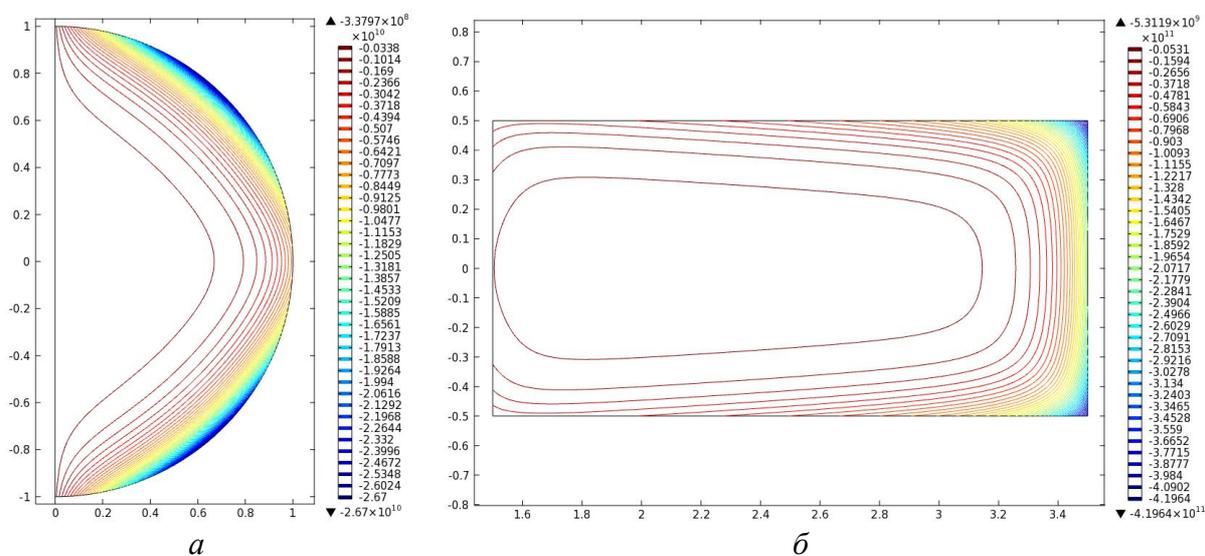


Рис. 5. Линии равного уровня плотности тока в сфере (а) и в кольце (б)

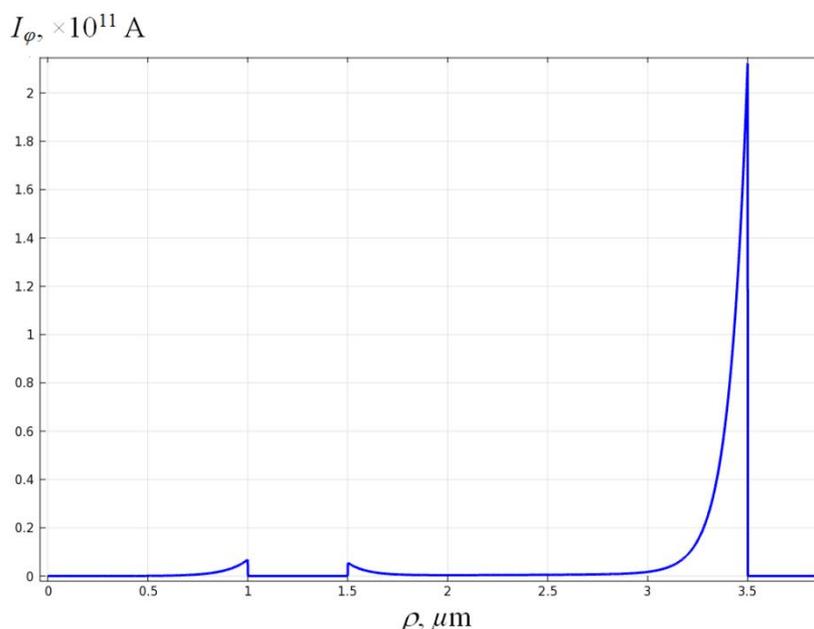


Рис. 6. Значение плотности тока на линии, проходящей через центр сферы и кольцо перпендикулярно оси системы

4. Заключение

Рассмотрена математическая модель распределения плотности тока в осесимметричной системе из нескольких сверхпроводящих тел во внешнем постоянном магнитном поле в рамках метода интегральных уравнений в лондонском приближении. Рассчитаны распределения плотности тока и магнитной индукции в системе. Сила притяжения между кольцом и шаром рассчитывалась для разных значений глубины проникновения магнитного поля в сверхпроводник. Возможность устойчивого подвешивания шара вблизи центра кольца пока-

зана вычислительным экспериментом. Этот тип подвеса может быть использован в экспериментах по квантовой магнитомеханике.

Литература

1. Bourke R. D. A theoretical and experimental study of a superconducting magnetically-supported spinning body / R. D. Bourke // NASA CR-108, 1964. – 127 p.
2. Костин А. В. Расчёт магнитного подвеса сверхпроводящего шара над сверхпроводящим тором с захваченным потоком / А. В. Костин // Изв. вузов. Электромеханика. – 1988. – № 7. – С. 5-8.
3. Черноморский А. И. Расчет магнитного поля около двухсвязного осесимметричного сверхпроводящего тела / А. И. Черноморский, В. Е. Плеханов // Изв. вузов. Электромеханика. – 1981. – № 4. – С. 360-362.
4. Спицин И. А. Взаимодействие двух соосных идеально-диамагнитных одинаковых колец с током на близком расстоянии / И. А. Спицин // ЖТФ. – 1993. – Т. 63. – № 12. – С. 1-11.
5. Батаронов Л. И. Моделирование осесимметричной системы сверхпроводящих многосвязных тел методом интегральных уравнений / Л.И. Батаронов, Г.Е. Шунин // Физико-математическое моделирование систем: материалы III междунар. семинара. ГОУВПО «Воронежский государственный технический университет», 2006. Ч. 1. С. 3-23.
6. Урман Ю. М. Теория расчета силовых характеристик электромагнитного подвеса сверхпроводящего тела / Ю. М. Урман // ЖТФ. – 1997. – Т. 67. – № 1. – С. 3-9.
7. Haley B. H. Magnetic levitation, suspension and superconductivity: Macroscopic and mesoscopic / B. H. Haley, H. J. Fink // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 53. – № 6. – P. 3506-3515.
8. Romero-Isart O., Clemente L., Navau C., Sanchez A., Cirac I. J. // Phys. Rev. Let. 2012. V. 109. P. 147205
9. Батаронова М. И. Численный анализ интегральных уравнений, описывающих распределение плотности токов в мезоскопических сверхпроводящих подвесах / М.И. Батаронова, Г.Е. Шунин // Физико-математическое моделирование систем: материалы VIII Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный технический университет», 2012. Ч. 3. С. 24-48.
10. Van Duzer T., Turner C. W. Principles of superconductive devices and circuits. – New Jersey: Prentice Hall, 1999.
11. Кноепфел Н. Е. Magnetic Fields: A Comprehensive Theoretical Treatise for Practical Use. – New York: John Wiley & Sons, 2000.
12. 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.

SIMULATION OF AXISYMMETRIC MESOSCOPIC SUPERCONDUCTING LEVITATION SYSTEMS BY THE METHOD OF INTEGRAL EQUATIONS

I. L. Bataronov, G. E. Shunin, S. A. Kostryukov, V. V. Peshkov, V. A. Shunina

Voronezh State Technical University

The main works on the calculation of superconducting suspensions by the method of integral equations are briefly considered. Within the framework of the integral form of London's equations, the distribution of magnetic induction, the current density in the ring and the sphere, and the force of attraction between them in an external magnetic field are calculated. The possibility of stable levitation of the ball near the center of the ring is shown.

Keywords: modeling, mesoscopic, superconducting, suspension, London equations, integral equations.

СОДЕРЖАНИЕ

Абрамова О. П., Абрамов С. В. Управление ячейкой памяти в модельной фрактальной связанной структуре.....	3
Абрамов В. С. Сверхмассивные черные дыры и бозон Хиггса в моделях фрактальной космологии.....	9
Абдурагимов Г. Э. Численная реализация краевой задачи для одного нелинейного интегро-дифференциального уравнения второго порядка.....	15
Бахвалов Ю. А., Балабан А. Л., Гречихин В. В., Юфанова Ю. В. Применение электрических и магнитных моментов в методе точечных источников.....	17
Боженко К. В., Гуцев Г. Л., Гуцев Л. Г., Утенышев А. Н., Алдошин С. М. Квантово-химическое исследование реакций взаимодействия оксидов железа Fe_2 , Fe_2O_2 и Fe_2O_4 с молекулой CO в газовой фазе.....	23
Букалов Г. К., Бурьгин А. О., Панин И. Г., Торцев А. В. Сегментация дефектов текстильных строп по нескольким кадрам.....	26
Гетманова Е. Е. Потоки энергии при формировании волн в цепочке маятников с кратными частотами.....	30
Глазов С. Ю., Мещерякова Н. Е. Столкновение солитонов в двумерной графеновой сверхрешетке.....	35
Дежина О. А., Манякин М. Д., Парина Е. В., Коюда Д. А. Моделирование рентгеновских абсорбционных спектров кремния, покрытого слоем естественного оксида.....	40
Заворотный А. А. Влияние низкоомных токовых контактов на измерение эффекта Холла в анизотропных полупроводниковых пластинах прямоугольной формы. Часть 1. Постановка и решение краевой задачи электродинамики.....	45
Заворотный А. А. Влияние низкоомных токовых контактов на измерение эффекта Холла в анизотропных полупроводниковых пластинах прямоугольной формы. Часть 2. Анализ результатов решения и практические рекомендации.....	52
Бородкин С. В., Батаронов И. Л., Иванов А. В. Аппроксимация теплофизических параметров закритических азота и кислорода.....	60
Бородкин С. В., Батаронов И. Л., Иванов А. В., Рязских В. И. Моделирование тепломассопереноса в потоке закритических азота и кислорода в трубе методом конечных элементов.....	70
Филиппов В. В., Золотухина А. О. Физико-математическое моделирование энергетического спектра сферических гетероструктур.....	87
Зиганшин А. В., Русакова Н. П., Туровцев В. В., Орлов Ю. Д. Электронное строение 12-краун-4 и 1-тиа-12-краун-4.....	91

Зюбин А. С., Зюбина Т. С., Конев Д. В., Истакова О. И., Воротынцев М. А. Реорганизация структуры полипиррола при допировании: квантово-химическое моделирование	95
Зюбина Т. С., Зюбин А. С., Кулаковская С. И., Куликов А. В., Конев Д. В., Свиридова Л. Н., Стенина Е. В., Рябенко А. Г., Золотухина Е. В. Квантово-химическое исследование окисления 2,5-ди-ме-пиазин-ди-п-оксида и ферроцена на электродах из углеродных нанотрубок	101
Киселев Е. А., Ушаков В. А. Обобщение метода Адамса путем использования интерполяции с помощью систем равномерных сдвигов	107
Корыпаева Ю. В. Исследование с помощью асимптотических методов математической модели работы ответственного узла радиотехнического устройства с резервными блоками в случае потенциальной опасности внезапного отказа	112
Корыпаева Ю. В., Дудкин О. С., Есен А. А. Математическое моделирование задачи электромагнитных колебаний в LCR-цепи и поиск функции тока	117
Корыпаева Ю. В., Лебедев Е. В., Есен А. А. Прогнозирование значений атмосферного давления в метеорологии с помощью анализа временных рядов	122
Камалова Н. С., Евсикова Н. Ю., Матвеев Н. Н., Лисицын В. И. Об одном способе исследования процессов релаксации в древесине стволов деревьев	127
Котова А. А., Бардакова Р. А., Матросов А. А. Расчет собственных частот опоры морского базирования	130
Котомкин А. В., Русакова Н. П., Чернова Е. М., Туровцев В. В., Орлов Ю. Д., Корпусов О. М. Электронное строение аллильного радикала и его фторзамещенных	134
Медакин П. О., Шеин А. Г., Пономарев А. И. Векторизация метода «частица-частица» для учета кулоновских взаимодействий	138
Смирнов Ю. Г. Численное моделирование осцилляции капель водонефтяной эмульсии в электрическом поле	141
Стащенко В. И., Скворцов О. Б., Троицкий О. А. Электродинамическое действие на проводник фронтов электрического импульса	144
Сушко Т. И., Чернышев И. И., Пашнева Т. В. Оценка качества отливки на основе твердотельного моделирования и СКМ LVMFlow	150
Сушко Т. И., Караев Р. Ш., Пашнева Т. В. Процесс моделирования как решение геометрической задачи получения готовой отливки	155
Тимченко С. Л., Задорожный Н. А. Особенности электропроводности в однородной проводящей среде при высокой плотности тока	159
Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Математическая модель упорядочения трехкомпонентного сплава	163

Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Метод концентрационных волн для описания всех возможных энергетических состояний трёхкомпонентных упорядоченных сплавов.....	167
Халиков А. Р., Нгуен В. Т., Дмитриев С. В. Результаты численного моделирования процесса диффузионной сварки разнородных металлов через прокладку.....	172
Сеничев А. В., Васильев П. В. Применение генеративной сверточной нейросетевой модели в обратных задачах механики.....	176
Батаронов И. Л., Шунин Г. Е., Кострюков С. А., Пешков В. В., Шунина В. А. Моделирование осесимметричных мезоскопических сверхпроводящих левитационных систем методом интегральных уравнений....	183

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXII Международного семинара
(г. Воронеж, 27-28 ноября 2020 г.)

В авторской редакции

Подписано в печать 02.07.2021.

Формат 60×84/16. Бумага для множительных аппаратов.

Уч.-изд. л. 12,1. Усл. печ. л. 11,2. Тираж 350 экз.

Заказ № 139 .

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

394026 Воронеж, Московский просп., 14

Участок оперативной полиграфии издательства ВГТУ

394026 Воронеж, Московский просп., 14