

ISSN 2949-2254

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXVI Международного семинара

Воронеж 2025

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российская академия наук

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

Федеральный исследовательский центр
проблем химической физики и медицинской химии РАН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXVI Международного семинара

(г. Воронеж, 30 ноября 2024 г.)

Воронеж 2025

УДК 53.072:519.673(06)

ББК 22.1я4

Ф503

Физико-математическое моделирование систем: материалы XXVI

Ф503 Международного семинара [Электронный ресурс] / отв. ред. И. Л. Батаронов. –
Электрон. текстовые и граф. данные (9,2 Мб). – Воронеж: ФГБОУ ВО
«Воронежский государственный технический университет», 2025. – 1
электрон. опт. диск (DVD-ROM): цв. – Систем. требования: ПК 500 и выше;
256 Мб ОЗУ; Windows 10; SVGA с разрешением 1024x768; Adobe Acrobat;
CD-ROM дисковод; мышь. – Загл. с экрана.

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)
О.А. Дорохова (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *секретарь*

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

К. В. Боженко (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черноголовка, Россия), *председатель*
А.С. Сигов (РТУ МИРЭА, г. Москва, 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)
В. Н. Глазнев (ВГУ, г. Воронеж, Россия)
В. В. Гречихин (ЮРГПУ(НПИ), г. Новочеркасск, Россия)
Е. Г. Григорьев (ИСМАН, г. Черноголовка, Россия)
Дж. Зеббар (Университетский Центр г. Тиссемсильта, Алжир)
А. С. Зюбин (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черноголовка, Россия)
Т.С. Зюбина (ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черноголовка, Россия)
С. Ю. Князев (ДГТУ, г. Ростов-на-Дону, Россия)
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», 2025

**О СУЩЕСТВОВАНИИ ПОЛОЖИТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ
КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОДНОГО НЕЛИНЕЙНОГО
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКА
С СИММЕТРИЧНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ**

Г.Э. Абдурагимов

Дагестанский государственный университет, Махачкала
gusen_e@mail.ru

Аннотация: в предлагаемой работе получены достаточные условия существования, по крайней мере, одного положительного решения краевой задачи для нелинейного ОДУ четвертого порядка с симметричными граничными условиями.

Ключевые слова: краевая задача, положительное решение, конус, неподвижная точка, растяжение (сжатие) конуса.

Краевые задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) четвертого порядка часто встречаются в механике твердых тел. Получены условия существования и единственности положительных решений уравнений колебаний упругой балки. Большая часть этих результатов получена понижением порядка рассматриваемых задач до краевых задач для ОДУ второго порядка и последующим сведением к эквивалентному интегральному уравнению. Дальнейшее исследование проводилось различными топологическими приемами, основанными, в основном, на принципе неподвижной точки оператора и его вариациях в пространствах с конусом. Среди последних публикаций в данном направлении выделим работы [1, 2].

В предлагаемой работе получены достаточные условия существования, по крайней мере, одного положительного решения краевой задачи для нелинейного ОДУ четвертого порядка с симметричными граничными условиями. Для доказательства существования положительного решения исследуемой задачи была использована теорема Красносельского о растяжении (сжатии) конуса в полуупорядоченных пространствах. В близкой постановке задачи рассматривались в [3-5].

Рассмотрим задачу

$$x^{(4)}(t) = f(t, x(t)), \quad 0 < t < 1, \quad (1)$$

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

$$x(1) = 0, \quad x''(1) = x'''(1), \quad (3)$$

где функция $f(t, u)$ предполагается неотрицательной и непрерывной на $[0, 1] \times [0, \infty)$, причем $f(\cdot, 0) \equiv 0$.

Теорема. При выполнении условий

$$1. \lim_{u \rightarrow 0^+} \max_{0 \leq t \leq 1} \frac{f(t, u)}{u} = 0,$$

$$2. \lim_{u \rightarrow +\infty} \min_{0 \leq t \leq 1} \frac{f(t, u)}{u} = \infty$$

или

$$1. \lim_{u \rightarrow 0^+} \min_{0 \leq t \leq 1} \frac{f(t, u)}{u} = \infty,$$

$$2. \lim_{u \rightarrow +\infty} \max_{0 \leq t \leq 1} \frac{f(t, u)}{u} = 0$$

краевая задача (1) – (3) имеет, по крайней мере, одно положительное решение.

Литература

1. Zhang Y., Chen L. Positive solution for a class of nonlinear fourth-order boundary value problem // AIMS Math.. 2023. Vol.8. P.1014-1021.
2. Chen H., Cui Y. Existence and uniqueness of solutions to the nonlinear boundary value problem for fourth-order differential equations with all derivatives // J. Inequal. Appl.. 2010. Vol.40. Issue 1. P.13-26.
3. Абдурагимов Э.И. Существование положительного решения двухточечной краевой задачи для одного нелинейного ОДУ четвертого порядка // Вестн. СамУ. Естественнонаучн. сер. 2014. Т.10. № 121. С. 9-16.
4. Абдурагимов Г.Э., Абдурагимова П.Э., Курамагомедова М.М. О существовании и единственности положительного решения краевой задачи для нелинейного обыкновенного дифференциального уравнения четного порядка // Вестник российских университетов. Математика. 2021. Т.136. № 25. С. 341-347.
5. Абдурагимов Г.Э., Абдурагимова П.Э., Курамагомедова М.М. О существовании и единственности положительного решения краевой задачи для нелинейного обыкновенного дифференциального уравнения четвертого порядка // Математические заметки СВФУ. 2022. Т.4. № 29. С. 3-10.

ABOUT THE EXISTENCE OF A POSITIVE SOLUTION BOUNDARY VALUE PROBLEM FOR ONE NONLINEAR DIFFERENTIAL EQUATION FOURTH ORDER WITH SYMMETRICAL BOUNDARY CONDITIONS

G.E. Abduragimov

Dagestan State University, Makhachkala

Abstract: in the proposed work, sufficient conditions for the existence of at least one positive solution to the boundary value problem for one fourth-order nonlinear ODE with symmetric boundary conditions are obtained.

Keywords: boundary value problem, positive solution, cone, fixed point, expansion (compression) of the cone.

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ В ЗАДАЧЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В БАЗИСЕ ПЛОСКИХ ВОЛН И ФУНКЦИЙ МАТЬЕ

А.Н. Белов, Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет
phystech_belov@mail.ru

Аннотация: рассмотрено численное решение торсионного уравнения Шрёдингера в базисе плоских волн и функций Матье. Показано, что решение в базисе плоских волн содержит нехарактерные для функций Матье гармоники. Обсуждается неустранимое «искажение» и вычислительная ошибка решения в базисе плоских волн.

Ключевые слова: внутреннее вращение, функции Матье, торсионное уравнение Шредингера.

Известно, что ряд конформеров внутреннего вращения, несмотря на одинаковый химический состав, обладают различными физико-химическими свойствами. Трудности экспериментального исследования таких соединений приводят к необходимости математического моделирования. Решение этой задачи как правило реализуется с помощью квантовомеханических расчетов, математически formalизованных с помощью торсионного уравнения Шрёдингера [1], записываемого для одномерного случая в виде

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

где $V(\varphi)$ – потенциал вращения, $F(\varphi)$ – структурная функция, $\varphi \in [0, 2\pi]$ – двугранный угол внутреннего вращения, Ψ – волновая функция.

Решение (1) применяется для конформационного анализа. Например, в случае несимметричного потенциала $V(\varphi)$ получают распределение конформеров внутреннего вращения по потенциальным ямам. Подобные задачи предъявляют особое требование к точности решения (1). Погрешность вычисления значений энергий уровней внутреннего вращения и волновых функций приводит к вычислительной ошибке при определении важных физико-химических величин – энергий переходов, мольных долей, вкладов внутреннего вращения в термодинамические характеристики соединений.

Как правило, решения (1) представляют набором плоских волн

$$\Psi=\sum_{n=-\infty}^{n=\infty}\psi_nU_n. \quad (2)$$

Однако, даже для простейших потенциалов $V(\varphi)$ решение в виде (3) имеет неустранимые недостатки. Поясним на примере внутреннего вращения в молекуле метилового спирта. В данном случае структурную функцию F можно считать постоянной, а потенциал внутреннего вращения представить в виде [1]

$$V(\varphi) = \frac{V_N}{2} (1 - \cos N\varphi), \quad (3)$$

где $N=3$ для трехкратного барьера. Для основного состояния получаем

$$\begin{aligned} \Psi_0 = & 0.3680593963 + 0.2169160452 \cos 3\varphi + \\ & + 0.1792821053 \cdot 10^{-1} \cos 6\varphi + 0.675268411 \cdot 10^{-3} \cos 9\varphi + \\ & + 0.1443947186 \cdot 10^{-4} \cos 12\varphi + 1.984507566 \cdot 10^{-7} \cos 15\varphi. \end{aligned} \quad (4)$$

При получении (4) использовалось 15 базисных функций, что вполне достаточно для достижения вариационного предела [2]. С другой стороны, в рассматриваемом примере торсионное уравнение сводится к уравнению Матье [1] с параметром q . Для основного уровня решением является функция Матье $ce_0(q, \varphi)$, разложение которой в тригонометрический ряд содержит лишь чётные гармоники, в отличии от (4). При этом, использование функций Матье [3] повышает точность решения (1). Влияние получаемых «искажений» при наличии нехарактерных для функций Матье гармоник является предметом предстоящих исследований.

Литература

1. Внутреннее вращение молекул / под ред. В. Дж. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1977. – 510 с.
2. Belov A.N. Measure of basis efficiency at solving the Schrödinger torsion equation. Reaching the variational limit / A.N. Belov, V.V. Turovtsev, Yu.A. Fedina, Yu.D. Orlov // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – V. 1658. Issue 1. art. №.012003.
3. Белов А.Н. Особенности вычисления функций Матье произвольных порядков / А.Н. Белов, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Прикладная математика. – 2016. – №4. – С. 45-59.

THE WAVE FUNCTION IN THE PROBLEM OF INTERNAL ROTATION IN THE BASIS OF PLANE WAVES AND MATHIEU FUNCTIONS

A.N. Belov, Yu.D. Orlov

Tver State University

Abstract: the numerical solution of the Schrodinger torsion equation in the basis of plane waves and Mathieu functions is considered. It is shown that the solution in the plane wave basis contains harmonics uncharacteristic for Mathieu functions. The irremediable «distortion» and computational error of the solution in the plane wave basis are discussed.

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

МОДЕЛИ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЙ ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР

А.Г. Буховец, Е.А. Семин

Воронежский государственный аграрный университет имени Императора Петра I
abuhovets@mail.ru

Аннотация: модели структур, полученных посредством рандомизированных систем итерированных функций, будут представлены в виде фрактальных множеств. Алгоритмы, генерирующие такие структуры, могут воспроизводить винеровские или марковские процессы. В зависимости от типа процесса модели, получаемые в ходе выполнения этих процедур, предлагается рассматривать как модели отдельных фазовых состояний. Для идентификации моделируемых фазовых состояний предлагается использовать преобразование Лежандра и переходить к двойственному аттрактору рандомизированной системы.

Ключевые слова: рандомизированные системы итерированных функций, аттрактор системы, винеровский процесс, марковский процесс, фазовые состояния системы.

Моделирование состояний систем с помощью динамических процессов предлагается осуществлять посредством рандомизированных систем итерированных функций (РСИФ) [1, 2], которые представляют собой в общем случае рекурсивное повторение определенных случайным выбором на каждом шаге некоторых действий, объектов и значений параметров.

В рамках построения фрактальных моделей возможны два подхода. Наиболее простым примером может служить линейная модель преобразований. Этот подход представляет вычисление элемента фрактального множества \mathbb{X} по формуле $X_{n+1} = \xi X_n + (1 - \xi)Z_j^{(n)}$, где $\xi \in (0,1)$ – параметр РСИФ, $Z_j^{(n)} \in \mathbb{Z}^{(K)} = \{Z_j | p_j, j = 1, 2, \dots, K; n = 1, 2, \dots, N\}$, а $0 < p_j < 1$ – вероятность выбора на n -м шаге значения Z_j . Такой процесс, как было показано [3], представляет винеровский процесс при определенных соотношениях параметров уравнения Ланжевена [4] и замене стандартного нормального распределения на конечное дискретное. Такой алгоритм будем обозначать в дальнейшем F1.

Другой способ построения фрактальных моделей [5], который обозначим F2, заключается в разнесении членов абсолютно сходящегося ряда $\mu \sum_{i=1}^{\infty} \xi^i = 1$ (здесь $\mu = \xi^{-1}(1 - \xi)$ – нормирующий коэффициент) по K различным ячейкам, которые, будучи упорядоченными, записываются в виде кортежа (строки) $A_l = \{a_{l1}, a_{l2}, \dots, a_{lK}\}$ элементов. Строки A_l , взятые в количестве N штук, образуют матрицу $\mathbb{A} = \{A_i: i = 1, 2, \dots, N\}$, размером $N \times K$. В этом случае построение фрактального множества выполняется посредством матричного произведения $\mathbb{X} = \mathbb{A}\mathbb{Z}$, где \mathbb{X} – матрица координат точек моделируемого множества. Легко показать, что способ построения фрактального множества F2 хорошо соответствует определению марковского процесса [6].

Связь двух представленных подходов изображена на рис. 1 в виде коммуникационной диаграммы.

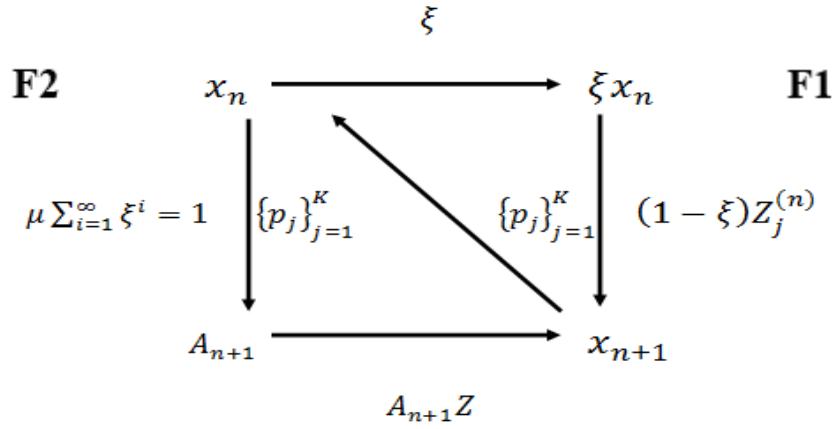


Рис. 1. Коммутативная диаграмма выполнения РСИФ (F1 и F2) [9]

Полученные множества представляют собой фракталы, геометрические/топологические свойства которых одинаковы [7]. Однако лежащие в их основе случайные процессы, в первом случае винеровский, а во втором – марковский, воспроизводят модели с различными структурными свойствами. Так в случае F1 структура множества X представляет собой некоторый путь на древовидной структуре графа. Это позволяет рассматривать эту структуру как хорошо организованное/упорядоченное множество – нечто похожее на кристалл. В случае F2 структура множества представляет собой некоторое аморфное образование, соответствующее стекловидным телам. В качестве подтверждения этого предположения можно рассмотреть коэффициент автокорреляции. В первом случае он примет значение, равное ξ [8], в то время как во втором случае он будет, как показывают выполненные расчеты, незначимо отличаться от нулевого значения.

Таким образом можно считать, что эти модели соответствуют различным фазовым состояниям. Еще одним подтверждением сделанного предположения могут служить, на наш взгляд, результаты преобразования Лежандра [11], примененного к массивам, полученным соответственно с помощью процедур F1 и F2 РСИФ. В случае двумерного аттрактора РСИФ преобразование Лежандра примет вид

$$\begin{cases} x_n^* = \frac{y_{n+1} - y_n}{x_{n+1} - x_n} ; & \text{если } x_{n+1} \neq x_n , \\ y_n^* = y_n - x_n x_n^* . \end{cases} \quad (1)$$

Получаемое в результате выполнения процедуры (1) множество $X^*(x_n^*, y_n^*)$ называется двойственным аттрактором [10], по аналогии с непрерывным преобразованием.

Эти различия в формировании внутренних структур хорошо видны на рисунках, полученных при построении двойственного фрактала, с помощью моделей РСИФ. Отметим, что преобразование Лежандра является ивolutивным [8], т.е. при повторном применении к двойственному аттрактору получается исход-

ное множество. Это свойство позволяет предположить, что двойственный аттрактор РСИФ можно трактовать как ещё одно фазовое состояние исходного множества.

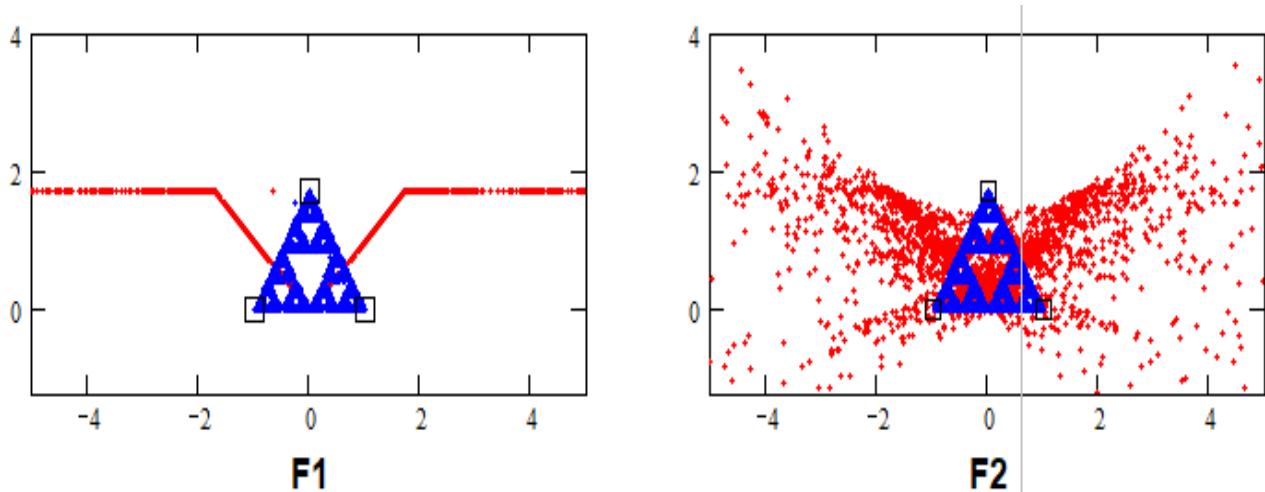


Рис. 2. Результаты применения преобразования Лежандра к фрактальным множествам, построенным F1 и F2 [13]

Литература

1. Bukhovets A.G. Modeling of fractal data structures / A.G. Bukhovets, E.A. Bukhovets // Automation and Remote Control. – 2012. – V. 73. – № 2. – P. 381-385.
2. Кроновер, Р.М. Фракталы и хаос в динамических системах / Р.М. Кроновер. – М.: ТЕХНОСФЕРА, 2006. – 488 с.
3. Буховец А.Г. Представление винеровского процесса рандомизированными системами итерированных функций / А.Г. Буховец, Е.А. Семин // Информатика: проблемы, методы, технологии: Материалы XXIV Международной научно-практической конференции им. Э.К. Алгазинова, Воронеж, 14-15 февраля 2024 года. – Воронеж: ВГУ, 2024. – С. 210-214.
4. Арато М. Линейные стохастические системы с постоянными коэффициентами. Статистический подход: пер. с англ. / М. Арато // М.: Наука, 1989. – 304 с. – INSB5-02-013934-3.
5. Буховец А.Г. Моделирование фрактальных свойств системных объектов / А.Г. Буховец, Т.Я. Бирючинская // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. – 2011. – № 2. – С. 22-26.
6. Вентцель Е.С. Теория вероятностей / Е.С. Вентцель // М.: Высшая школа, 2006. – 575 с.
7. Буховец А.Г. О гомеоморфности пространств двух фрактальных моделей / А.Г. Буховец, М.В. Горелова, Е.А. Семин // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. – 2020. – № 1. – С. 15-27. – DOI 10.17308/sait.2020.1/2575.
8. Буховец А.Г. Структура аттрактора рандомизированных систем итерированных линейных функций / А.Г. Буховец, Т.Я. Бирючинская // Вестник ВГУ, Серия: Системный анализ и информационные технологии. – 2016. – № 2. – С. 5-10.
9. Буховец А.Г. Ультраметрические свойства пространства аттрактора рандомизированных систем итерированных линейных функций / А.Г. Буховец // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сборник трудов Международной научно-технической конференции, Воронеж, 18-20 декабря 2017 г. / Воронежский государственный университет. – Воронеж: Издательство «Научно-исследовательские публикации»; Общество с ограниченной ответственностью «Вэлборн», 2017. – С. 610-616.

10. Арнольд В.И. Математические методы классической механики / В.И. Арнольд. – М.: Наука, 1974. – 475 с.
11. Bukhovets A. Construction of a dual attractor for linear randomized systems of iterated functions / A. Bukhovets, P. Moskalev, T. Biryuchinskaya // Journal of Physics: Conference Series: Current Problems, Voronezh, 07-09 декабря 2020 года. – Voronezh, 2021. – P. 012056. – DOI 10.1088/1742-6596/1902/1/012056
12. Арнольд В.И. Обыкновенные дифференциальные уравнения / В.И. Арнольд. – Ижевск.: Ижевская республиканская типография, 2000. – 368 с.
13. Буховец А.Г. Построение двойственного аттрактора линейных рандомизированных систем итерированных функций / А.Г. Буховец, А.К. Горностаев, Е.А. Семин // Актуальные задачи математического моделирования и информационных технологий (АЗММиИТ 2020): Материалы Международной научно-практической конференции, Сочи, 27 сентября – 03 октября 2020 года / Отв. редакторы А.Р. Симонян, Ю.И. Дрейзис. – Сочи: Сочинский государственный университет, 2020. – С. 55-59.

MODELS OF PHASE STATES OF FRACTAL STRUCTURES

A.G. Bukhovets, E.A. Semin

Voronezh State Agrarian University named after Emperor Peter the Great

Abstract: models of structures obtained through randomized systems of iterated functions will be presented in the form of fractal sets. Algorithms generating such structures can reproduce Wiener or Markov processes. Depending on the type of process, the models obtained during these procedures are proposed to be considered as models of individual phase states. To identify the simulated phase states, it is proposed to use the Legendre transform and proceed to the dual attractor of the randomized system.

Keywords: randomized systems of iterated functions, system attractor, Wiener process, Markov process, phase states of the system.

ВЛИЯНИЕ СВЕРХМАЛЫХ МАГНИТНЫХ АНОМАЛИЙ НА ПОЛЁТ БЕСПИЛОТНОГО ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА

А.Е. Бывальцев, Д.Ю. Пашали, Ю.В. Афанасьев

Уфимский университет науки и технологий
dipashali@mail.ru

Аннотация: рассматривается силовое воздействие на беспилотный летательный аппарат при его движении в магнитном поле Земли и в особенности в ограниченном пространстве, имеющем высокий градиент напряжённости поля, чаще всего с «рукотворной» причиной. Представлена картина геополя с его аномалиями, использован классический подход к определению электромагнитных сил при протекании вихревых токов в электропроводящих объёмах летательного аппарата при его движении в окружающем электромагнитном поле. Получены математические выражения для определения сил, действующих на обшивку самолёта.

Ключевые слова: беспилотный летательный аппарат, полет, магнитные аномалии, вихревые токи, магнитное поле, Земля, электропроводящие элементы, термоэлектрический потенциал.

В настоящее время получили широкое распространение беспилотные летательные аппараты (БПЛА) по типам: самолёт, вертолёт, автожир, мультикоптер. Среди них тихоходные небольшого радиуса действия и скоростные, рассчитанные для использования на больших расстояниях.

Общим конструктивным признаком, рассматриваемых здесь устройств, является наличие корпуса и несущих плоскостей, выполненных из электропроводящих материалов или имеющих такие покрытия.

При движении БПЛА в окружающем магнитном поле возможно влияние последнего на его траекторию. Чаще всего влиянием поля пренебрегают, если речь не идёт об ограниченном пространстве с большим градиентом его распределения, когда вполне возможно возникновение значительных электромагнитных сил.

Подробнее картина поля, окружающего БПЛА может быть представлена следующим образом. Известно, что доминирующей гипотезой магнетизма Земли является предположение наличия вихревых токов в ядре. Это представление обладает существенными недостатками, до сих пор не имеют научного обоснования некоторые явления, например, свободные колебания внутреннего ядра (в расплавленном внешнем ядре) в результате взаимодействия Земли с Луной и некоторые другие физические факты.

Альтернативным представлением о природе земного магнетизма является предложенная в первой половине прошлого столетия модель В. М. Эльзассера [1], объясняющая магнитное поле Земли (МПЗ) существованием в ядре термоэлектродвижущих сил. Известны публикации доказательства ведущей роли геотемпературного градиента в формировании термоэлектрического потенциала, наложенного на природные электронные проводники (металлические руды,

графитистые породы и др.). Между краями (границами) последних всегда существует разность температур, которая, согласно эффекту Зеебека, является причиной возникновения термоэлектрического потенциала [2]:

$$\Delta\varphi_T = \int_{T_1}^{T_2} \beta dT, \quad (1)$$

где β – температурный коэффициент, для чистых металлов составляет $0,0001 \text{ В}\cdot\text{град}^{-1}$, тогда как для некоторых полупроводников – $0,0015 \text{ В}\cdot\text{град}^{-1}$, T_1 и T_2 – температуры разных слоёв Земли.

В данном случае земной шар представляется сферическим геотермоэлектрическим элементом (СГТЭ), к концам которого: центральной части металлического ядра и оболочке С (к её середине) приложена разность температур порядка $3200\text{--}4500 \text{ }^{\circ}\text{C}$. Тогда, исходя из (1), минимальная разность потенциалов $\Delta\varphi_T$ для СГТЭ составит $0,45 \text{ В}$, а напряжённость электрического поля для него может быть найдена из равенства

$$E_T = \Delta\varphi_T / l_{\text{СГТЭ}}, \text{ В/м}; \quad (2)$$

где $l_{\text{СГТЭ}}$ – радиус СГТЭ, равный расстоянию от центра планеты до средней части оболочки С и определяемый в $5\,500 \text{ км}$ или $5\,600 \text{ км}$ до верхней мантии.

Электрическое поле E_T , порождённое существующей разностью температур ΔT , вынуждает планетарные потоки «горячих» электронов направленно двигаться от центра планеты вдоль по радиусам к её внешним оболочкам и обратно. При этом в сферическом проводнике возникает замкнутое сферическое магнитное поле, которое по всем признакам является тороидальным полем. В результате в металлическом ядре постоянно присутствуют циклически циркулирующие термоэлектрические токи (эффект Зеебека). Цикличность термоэлектрических токов обусловливается периодической сменой знаков разности температур на концах сферического проводника «внутреннее твёрдое ядро – внешнее расплавленное ядро», что одновременно сопровождается инверсией полюсов геомагнитного поля.

Кроме того, рассматриваемая термоэлектрическая модель МПЗ позволяет объяснить наклон магнитной оси относительно земной за счёт одновременного воздействия на потоки электронов центробежной и кориолисовой инерционных сил. Этим же может быть объяснен отступ центра магнитной оси от центра земной оси на величину, близкую $\Delta X \approx 0,07 \cdot R_Z$ [2].

Рассмотрим общий подход к существующей картине поля. МПЗ в любой точке земной поверхности определяется полным вектором T . Вдоль вектора T устанавливается подвешенная у центра тяжести магнитная стрелка. Проекция этого вектора на горизонтальную поверхность и вертикальное направление, а также углы, образованные этим вектором с координатными осями, носят название главных элементов магнитного поля (рис. 1).

Величины вектора T и угла его расположения по отношению касательной к траектории полёта БПЛА будут определять влияние поля на траекторию полёта [3].

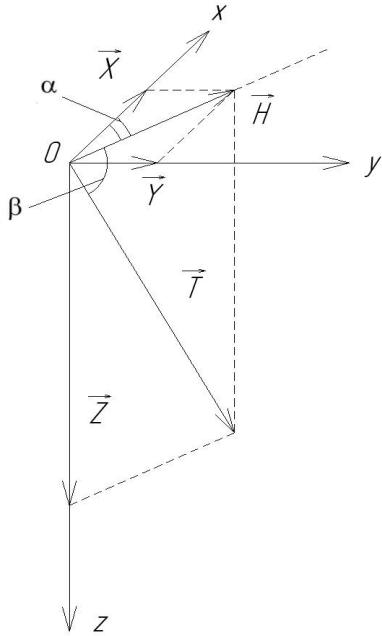


Рис. 1. Элементы магнитного поля Земли: x – ось, направленная на географический север; y – ось, направленная на восток; z – ось, направленная по радиусу Земли; T – полный вектор поля; Z – вертикальная составляющая T ; H – проекция T на горизонтальную плоскость или горизонтальная составляющая T ; X – северная (или южная) составляющая H ; Y – восточная (или западная) составляющая H ; α – угол между осью x и H , называемый склонением; β – угол между T и горизонтальной плоскостью, называемый наклонением

При совокупном действии первопричин МПЗ может быть аппроксимировано полем однородно намагниченного шара, или полем диполя (T_0), расположенного в области центра планеты. Ось такого диполя по отношению к оси вращения Земли расположена под углом $11,5^\circ$. Места выхода продолжений оси этого диполя на земную поверхность называют геомагнитными полюсами. Принято считать магнитный полюс, близкий к северному географическому полюсу (между ними около 1400 км), южным (отрицательным) геомагнитным. А магнитный полюс, находящийся в Антарктиде – северным (положительным) геомагнитным полюсом.

Отклонения наблюдаемых векторов (T) от значений нормального поля T_n будут составлять аномалии региональные (T_p) или сверхмалые (местные) (T_λ) в зависимости от площади, на которых они получены [3]:

$$T_a = T - T_n = T_p + T_\lambda. \quad (3)$$

Природа сверхмалых аномалий:

- грозовые разряды в атмосфере;
- аномалии, имеющие «рукотворную» природу, возникающие в процессе человеческой деятельности: излучение локаторов и радаров; взрывные работы; процессы плавки, сварки и термозакалки металла; переходные процессы на линиях электропередачи и на их оборудовании; короткое замыкание на силовых

трансформаторах и выключателях; радары электромагнитной защиты от БПЛА в оборонных целях и др. Это те аномалии, у которых «всплески» магнитного поля имеют точечный характер и большой градиент напряжённости магнитного поля в ограниченных геометрических размерах.

БПЛА в объемах сверхмалых аномалий подвергаются краткодействующим импульсам силы, которые могут повлиять на направление полёта. Магнитная индукция в этих зонах может достигать 100 мТ и более. При соизмеримости их с размерами БПЛА в токоведущих объемах последнего возникает ЭДС (5), что обуславливает появление вихревых токов в обшивке БПЛА [4]. Эти токи создают переменное магнитное поле, которое взаимодействует с окружающим полем. Сила этого взаимодействия, приложенная к обшивке БПЛА, может привести к изменению траектории полёта.

При наличии в произвольной точке пространства изменяющегося во времени внешнего магнитного поля (ВМП) с $\frac{\partial B}{\partial t} \neq 0$ (рис. 2) появляется вихревое электрическое поле с вектором напряжённости E :

$$[E] = \nabla - \frac{\partial B}{\partial t}. \quad (4)$$

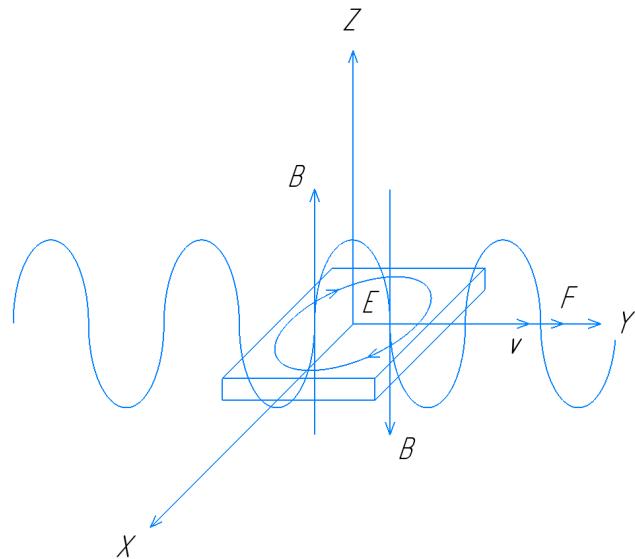


Рис. 2. Магнитное B и электрическое E поля и сила F , действующие на фрагмент крыла, движущегося со скоростью v

В электрическом поле будет действовать мгновенное синусоидально меняющееся значение сил [5]:

$$f_{\text{эл}} = q_e E + \frac{1}{2} \text{grad} \left[E^2 \rho \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right)_T \right] - \frac{1}{2} E^2 \text{grad} \epsilon, \quad (5)$$

а в магнитном поле –

$$f_{mag} = q_m H + \delta \times B + \frac{1}{2} \operatorname{grad} \left[H^2 \rho \left(\frac{\partial \mu}{\partial \rho} \right)_T \right] - \frac{1}{2} H^2 \operatorname{grad} \mu. \quad (6)$$

В электромагнитном поле будут действовать обе эти силы. В выражениях (5) и (6) это мгновенные значения сил (ρ – плотность вещества; T – температура; q_e и q_m – плотность электрических и магнитных зарядов, H – напряжённость магнитного поля, μ – магнитная проницаемость, δ – плотность тока, ϵ – электрическая проницаемость).

Первые члены соответствуют силам, возникающим из-за наличия свободных электрических зарядов в электрическом поле и магнитных «зарядов» в магнитном поле (некой постоянной составляющей первичного поля аномалии).

Члены, содержащие производные по плотности при постоянной температуре, в некоторых случаях можно упростить. Так, в газе можно считать, что величина $\epsilon - 1$ пропорциональна плотности, откуда следует, что $\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} = \epsilon - 1$, и сила в электрическом поле принимает вид

$$f_{el} = q_e E + \frac{\epsilon - 1}{2} \operatorname{grad} E^2 - \frac{1}{2} E^2 \operatorname{grad} \epsilon. \quad (7)$$

Для слабомагнитных сред величина $\frac{\chi}{\mu}$ (χ – магнитная восприимчивость) также пропорциональна плотности, откуда следует, что $\rho \frac{\partial \mu}{\partial \rho} = \mu - 1$

$$f_{mag} = q_m H + \delta \times B + \frac{\mu - \mu_0}{2} \operatorname{grad} B^2 - \frac{1}{2} H^2 \operatorname{grad} \mu, \quad (8)$$

где μ_0 – магнитная постоянная, равная $4 \cdot \pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м.

В рассматриваемом случае, большинство членов из этих формул выпадает, так как мы имеем дело с однородными телами, у которых ϵ и μ постоянны. У алюминиевых сплавов, из которых изготавливаются крылья БПЛА, высокая электрическая проводимость и силы, вызываемые свободными электрическими зарядами, тоже не играют существенной роли. Таким образом, из сил в электрическом поле мог бы остаться только второй член, но так как энергия, заключённая в электрической части импульса поля, весьма мала, электрические силы можно считать равными нулю. Что же касается сил в магнитном поле, то в дополнение к сказанному мы также имеем дело с немагнитными телами, у которых $\mu = \mu_0$. В таком случае вся сумма сил сводится только к члену

$$f = \delta \times \bar{B}. \quad (9)$$

Картина электромагнитных взаимодействий БПЛА с ВМП будет определяться функцией, описывающей первичное переменное магнитное поле, действующее на БПЛА, и физическими параметрами его конструкции. В электропроводящих несущих плоскостях корпуса, а также двигателя и прочего обо-

рудования при взаимодействии с магнитным полем возникают вихревые токи (Фуко). Согласно правилу Ленца, эти токи протекают так, чтобы противостоять причине, которая их вызывает. Из-за этого БПЛА тормозится. Тормозящее действие имеет природу взаимодействия вихревых токов, наводящихся в обшивке БПЛА с магнитным полем, их порождающих. При этом происходят два процесса: с одной стороны, токи индуцируются из-за изменения потока во времени независимо от того, движется БПЛА или неподвижен. Это так называемое «трансформаторное взаимодействие» e_{mp} и изменение потока $\frac{d\Phi}{dt}$, обусловленное перемещением БПЛА длиной l со скоростью v :

$$e_{mp} = -\frac{d\Phi}{dt}, \quad (10)$$

$$e_{\partial\theta} = -Blv. \quad (11)$$

В случае скоростного БПЛА токи будут наводиться от изменения первичного потока в источнике (10). Изменение ВМП за счёт линейной скорости движения БПЛА (11) мало, но в ряде случаев его необходимо учитывать. Полученные математические зависимости могут быть использованы для практических расчётов, если задаться функциями изменения потока, геометрическими и физическими параметрами: прежде всего, магнитной проницаемостью, электрической проводимостью и размерами проводящих плоскостей.

МПЗ представляет из себя совокупность полей от токов движущегося металлического ядра и токов, обусловленных термоэлектрическими явлениями в системе металлического ядра и нижней мантии. Оно имеет неравномерное распределение индукции пространстве, т. е. имеют место аномалии различной природы, обуславливающие градиенты напряжённости поля, которые из-за значительной пространственной протяжённости не могут влиять на полёт БПЛА.

Влияние на полёт БПЛА оказывают сверхмалые аномальные магнитные явления, имеющие, как правило, «рукотворную» природу, градиент напряжённости поля которых действует в пространстве, соизмеримым с размерами БПЛА.

Получены математические выражения для определения сил, действующих на обшивку БПЛА.

Практические расчёты по полученным результатам возможны при наличии заданных или опытных данных о распределении первичного поля во времени и соизмеримом пространстве.

Литература

1. Elsasser W.M. On the origin of the Earth's magnetic field // Physical Review. 1939. Vol. 55. Issue 5. P. 489-498.
2. Дмитриев А.Н., Пахаруков Ю.В. Термоэлектрическая модель магнитного поля Земли. Тюмень, 2021 – 14 с.
3. Костицын В.И., Хмелевской В.К. Геофизика: учебник / Перм. гос. нац. исслед. ун-т. – Пермь, 2018 428 с.

4. Савельев И.В. Курс общей физики. Том II. Электричество и магнетизм. Волны. Оптика / М.: Наука, 1970. 336 с.
5. Исмагилов Ф.Р., Пашали Д.Ю. и др. Электромеханические демпфирующие преобразователи с распределёнными параметрами: учебное пособие // Уфимский государственный авиационный технический университет – Уфа: УГАТУ, 2009. 242 с.

INFLUENCE OF ULTRA-SMALL MAGNETIC ANOMALIES FOR THE FLIGHT OF AN UNMANNED AIRCRAFT

A.E. Byvaltsev, D.Yu. Pashali, Yu.V. Afanasyev

Ufa University of Science and Technology

Abstract: the paper considers the force effect on an unmanned aerial vehicle when it moves in the Earth's magnetic field and especially in a limited space with a high gradient of field strength, most often with a «man-made» cause. The picture of geofield with its anomalies is presented, the classical approach to determination of electromagnetic forces at flow of eddy currents in electrically conducting volumes of an aircraft at its movement in the surrounding electromagnetic field is used. Mathematical expressions for determining the forces acting on the airplane skin are obtained.

Keywords: unmanned aerial vehicle, magnetic anomalies, eddy currents, Earth magnetism, electrically conductive elements, thermoelectric potential.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА И МОДЕЛИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ОСТАТОЧНОГО РЕСУРСА ИЗОЛЯЦИИ АСИНХРОННОГО ДВИГАТЕЛЯ

А.В. Седов, Н.В. Вербин

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)
имени М.И. Платова, Новочеркасск
n11111v2@mail.ru

Аннотация: в данной статье рассматривается разработка алгоритма и модели прогнозирования остаточного ресурса изоляции тяговых двигателей электровоза на основе измеренных значений коэффициента абсорбции, индекса поляризации и связанных параметров. В работе описаны этапы алгоритма построения модели прогнозирования остаточного ресурса изоляции тягового электродвигателя, выявлены преимущества перед традиционными методами.

Ключевые слова: модель прогнозирования, межкорпусная изоляция, асинхронные двигатели, индекс поляризации, коэффициент абсорбции, машинное обучение.

Асинхронные двигатели широко используются в различных отраслях промышленности, таких как энергетика, транспорт и производство. Однако, изоляция асинхронного двигателя может деградировать со временем, что может привести к отказу двигателя и остановке производства.

Контроль состояния межкорпусной изоляции асинхронного двигателя подвижного состава является важным аспектом обеспечения надежности, безопасности и эффективности электрической тяговой системы. Вот некоторые причины:

- межкорпусная изоляция является критическим компонентом асинхронного двигателя, поскольку она предотвращает электрические разряды между корпусом двигателя и его внутренними компонентами;
- неисправность межкорпусной изоляции может привести к каскаду неисправностей, включая неисправности двигателя, электрические удары и, в конечном счете, пожар или взрыв.

Раннее обнаружение деградации изоляции позволяет уменьшить риск неисправности двигателя, оптимизировать обслуживание и улучшить общую производительность системы.

Тяговые двигатели электровоза имеют свои особенности, которые отличают их от остальных асинхронных двигателей переменного тока. Например, электровозы работают в более тяжелых условиях, с более высокими напряжениями и токами, что может привести к более быстрому износу изоляции.

Неисправность тягового двигателя электровоза может привести к: неплатному простою подвижного состава; увеличению затрат на обслуживание и уменьшению срока службы двигателя; увеличению энергопотребления; пожару или взрыву; к серьезному материальному ущербу и травматизации персонала.

Поэтому, прогнозирование остаточного ресурса изоляции тяговых двигателей электровоза является важной задачей для обеспечения надежности и безопасности эксплуатации электровозов.

Для прогнозирования состояния двигателей электровозов применяют математические модели, использующие в качестве входных параметров: общее значение сопротивления изоляции, индекс поляризации, коэффициент абсорбции, тангенс угла диэлектрических потерь, коэффициент диэлектрического разряда и другие связанные параметры, позволяющие обнаруживать проблемы с изоляцией на ранней стадии и предотвращать серьезные поломки. Измерение и расчет индекса поляризации для оценки состояния изоляции двигателя электровоза осуществляют по формуле:

$$PI = \frac{R_{20}}{R_1},$$

где R_{20} – сопротивление изоляции (в МОм), измеренное через 20 минут после приложения напряжения; R_1 – сопротивление изоляции (в МОм), измеренное через 1 минуту после приложения напряжения.

Измерение и расчет коэффициента абсорбции для оценки способности диэлектрика поглощать энергию электрического поля с применением формулы:

$$DAR = \frac{R_t}{R_0},$$

где R_t – сопротивление изоляции, измеренное через определенное время (например, 10 минут); R_0 – начальное сопротивление изоляции, измеренное сразу после приложения напряжения.

Измерение и расчет тангенса угла диэлектрических потерь для оценки потерь энергии в диэлектрике с применением формулы:

$$\tan \delta = \frac{I_a}{I_p},$$

где: I_a – активный ток; I_p – реактивный ток.

Общий алгоритм построения модели прогнозирования остаточного ресурса изоляции тягового двигателя электровоза включает в себя шесть этапов: сбор данных, предобработку данных, инженерию признаков, структурную идентификацию модели, параметрическую идентификацию с обучением и оценкой качества модели, а также развертывание модели.

Сбор данных подразумевает накопление предыстории изменения состояния изоляции подобных двигателей, условий эксплуатации, записей технического обслуживания, испытаний тягового двигателя с измерением и фиксацией параметров (например, индекса поляризации, коэффициента абсорбции, электрического сопротивления изоляции и других).

Предобработка данных подразумевает удаления любых несовместимостей и аномалий в данных. Включает в себя фильтрацию, нормализацию данных, учет пропусков в данных и проверку на ошибки.

Инженерия признаков подразумевает распределение измеренных параметров по информативности с точки зрения влияния на точность прогноза остаточного ресурса изоляции и влияния на деградацию изоляции, и трансформацию признаков с исключением коррелированности для улучшения их качества и пригодности для моделирования.

Структурная идентификация модели состоит в выборе конкретного типа и структуры модели: регрессионной (ARX-модель) [1, 2], компонентной декомпозиционной [3], нейронной, нечеткой или гибридной [4]. Конкретный выбор определяется объемом имеющейся предыстории, видом априорной информации, особенностью учета влияющих факторов и возможностью обучения.

В общем виде модель можно представить в форме с одним выходным сигналом, зависящим от комбинаций прошлых значений выходного и входных сигналов. Упрощенная формула модели прогнозирования остаточного ресурса изоляции может быть представлена следующим образом [1-4]:

$$y(t) = f[y(t-1), \dots, y(t-n), u(t), u(t-1), \dots, u(t-k)],$$

где $y(t)$ – остаточный ресурс изоляции в момент времени t ; $y(t-i)$ – прошлые значения остаточного ресурса изоляции; $u(t-j)$ – прошлые значения вектора входных параметров (например, температуры, влажности, напряжения, ток, коэффициента абсорбции, индекса поляризации, коэффициент диэлектрического разряда и т.п.); f – функциональная зависимость, определяющая тип использованной модели.

Параметрическая идентификация с обучением и оценкой качества модели подразумевает настройку (обучение) модели по конкретным данным предыстории с оценкой точности и эффективности модели по показателям качества с использованием средней абсолютной ошибки (MAE), средней квадратической ошибки (MSE), коэффициента детерминации (R-squared) и других.

Развертывание модели подразумевает реализацию обученной модели в форме программы прогнозирования остаточного ресурса межкорпусной изоляции асинхронного двигателя с использованием прогнозируемых значений оставшегося срока службы изоляции для планирования обслуживания и ремонтов.

Предложенный алгоритм построения модели прогнозирования остаточного ресурса изоляции тягового двигателя электровоза обладает следующими отличиями и преимуществами:

- реализация этапа инженерии признаков позволяет с применением методов кластерного анализа, распознавания образов, компонентного анализа выявлять малоинформационные измеренные признаки, тем самым снижая порядок модели и исключая возникновение некорректностей при идентификации модели.

- используемый набор типов реализуемых моделей прогноза позволяет наилучшим образом учесть особенность имеющейся априорной информации, как числовой, так и логико-описательной, характерной для отчетов технического обслуживания двигателей.

- применение моделей искусственного интеллекта (нейронных, нечетких, комбинированных) позволяет уйти от неопределенностей возникающих при

идентификации регрессионных прогнозных моделей при малом объеме предыстории.

Предполагается использование рассмотренного алгоритма для прогнозирования остаточного ресурса изоляции тяговых двигателей при техническом обслуживании на предприятиях железнодорожного транспорта.

Литература

1. Курносенко В.И. (ред.) Машинное обучение и прогнозирование в задачах технической диагностики. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017. - 320 с.
2. Куликов А.И. (ред.) Прогнозирование остаточного ресурса технических систем. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015. - 240 с.
3. Седов А.В. Моделирование объектов с дискретно-распределенными параметрами: декомпозиционный подход. М.: Наука, 2010. - 438 с.
4. Zhang Y. et al. A Deep Learning Approach for Predicting the Remaining Useful Life of Industrial Equipment // IEEE Transactions on Industrial Informatics. - 2019. - Vol. 15. - No. 4. - P. 1930-1939.

DEVELOPMENT OF AN ALGORITHM AND MODEL FOR PREDICTING THE RESIDUAL RESOURCE OF INSULATION OF AN ASYNCHRONOUS MOTOR

A.V. Sedov, N.V. Verbin

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

Abstract: this article discusses the development of an algorithm and model for predicting the residual life of traction motor insulation of an electric locomotive based on measured values of the absorption coefficient, polarization index and related parameters. The paper describes the stages of the algorithm for constructing a model for predicting the residual life of traction motor insulation, and identifies advantages over traditional methods.

Keywords: prediction model, interbody isolation, asynchronous motors, polarization index, absorption coefficient, machine learning.

МЕТОД НЕЛИНЕЙНЫХ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ СОВМЕСТИМОСТИ РАДИОЭЛЕКТРОННЫХ СРЕДСТВ

Н.Д. Майков, В.В. Глотов, М.А. Ромашенко

Воронежский государственный технический университет
nik-maikof@yandex.ru, vadik-livny@mail.ru, webartel@mail.ru

Аннотация: в статье описано использование метода нелинейных наименьших квадратов для сканирования ближнего поля печатных модулей радиоэлектронных средств. Способ позволяет извлекать величину и фазу эквивалентного массива дипольных моментов. Метод основывается исключительно на данных о величине поля.

Ключевые слова: электрическое поле, магнитное поле, дипольный момент, ближнее поле.

Электромагнитные помехи оказывают отрицательное воздействие на функционирование различных электронных устройств. Главным источником электромагнитных помех выступают интегральные схемы. Для устранения помех их изучают и исследуют, что способствует улучшению эффективности систем.

Основные методы построения источников основываются на данных сканирования ближнего поля и данных измерений в ячейках электромагнитной совместимости [1]. В методе, опирающемся на данные ближнего поля, исследуемое устройство заменяется на массив дипольных моментов. Для этого требуется данные о величине и фазе электромагнитного поля и для получения этих данных для реальных схем, необходимо проводить многократные измерения. В методе, основанном на измерениях в ячейках электромагнитной совместимости, источник моделируется как единый набор дипольных моментов, расположенных в одной точке, что накладывает ограничение на размер устройства.

Метод нелинейных наименьших квадратов позволяет получить фазу дипольных моментов и её значение. Использование этого метода возможно без измерения фаз поля, что облегчает задачу.

Создание источника дипольного момента

В данном разделе описывается моделирование источников помех. Используется метод усечённого сингулярного разложения с использованием метода наименьших квадратов.

Источник электромагнитного шума заменяется набором из трёх электрических и магнитных дипольных моментов: P_x , P_y , P_z , M_x , M_y и M_z . Так как микросхема размещается на печатной плате, то она считается идеальным электрическим проводником [2]. В итоге для расчёта интегральная схема заменяется всего тремя дипольными моментами: P_z , M_x и M_y , поскольку остальные элементы не соответствуют граничным условиям.

Электрические и магнитные поля, создаваемые набором из трёх дипольных моментов, определяются как:

$$F_n = T_{nk} X_k, \quad (1)$$

$$F_n = \begin{bmatrix} [E_x]_{M^2 \times 1} / E_{max} \\ [E_y]_{M^2 \times 1} / E_{max} \\ [H_x]_{M^2 \times 1} / H_{max} \\ [H_y]_{M^2 \times 1} / H_{max} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$X_k = \begin{bmatrix} [P_z]_{N^2 \times 1} \\ [k_0 M_x]_{N^2 \times 1} \\ [k_0 M_y]_{N^2 \times 1} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$T_{nk} = \begin{bmatrix} T_{ExPz} / E_{max} & T_{ExMx} / (E_{max} k_0) & T_{ExMy} / (E_{max} k_0) \\ T_{EyPz} / E_{max} & T_{EyMx} / (E_{max} k_0) & T_{EyMy} / (E_{max} k_0) \\ T_{HxPz} / H_{max} & T_{HxMx} / (E_{max} k_0) & T_{HxMy} / (E_{max} k_0) \\ T_{HyPz} / H_{max} & T_{HyMx} / (E_{max} k_0) & T_{HyMy} / (E_{max} k_0) \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где $[E_x]$, $[E_y]$, $[H_x]$ и $[H_y]$ – электрическое и магнитное поля, а $[P_z]$, $[M_x]$, и $[M_y]$ – электрический и магнитный диполи. E_{max} и H_{max} – максимальные значения электрического и магнитного полей.

Полученные данные о сканируемом поле F_n в первом случае будут представлять собой комплексные числа, включающие как амплитуду, так и фазу. Поэтому для дальнейшего вычисления применяется линейное решение методом наименьших квадратов. Дипольные источники в виде комплексных чисел X_k вычисляются как:

$$X_k = [T_{nk}^* T_{nk}]^{-1} T_{nk}^* F_n. \quad (5)$$

Для применения метода регуляризации используется коэффициент регуляризации λ .

$$X_k = [T_{nk}^* T_{nk} + \lambda^2 I]^{-1} T_{nk}^* F_n. \quad (6)$$

Регулируя λ , можно свести к минимуму общую энергию эквивалентного источника, чтобы получить более физический и реальный источник.

Во втором случае, данные о сканируемом поле являются действительными числами с информацией только о величине, доступная информация о поле становится равной $|F_n|$, а источники дипольного момента в виде комплексных чисел X_k не могут быть получены из (5). Уравнение, позволяющее найти источники дипольных моментов:

$$|F_n| = |T_{nk} X_k|. \quad (7)$$

Метод усечённого разложения по сингулярным числам, применяемый при установке метода нелинейных наименьших квадратов.

Метод усечённого сингулярного разложения применяется к выражению (7) для использования метода нелинейных наименьших квадратов [3]. На осно-

ве метода разреженных сингулярных значений, который исключает строки с нулевыми элементами, T_{nk} из (4) можно разложить следующим образом

$$T_{nk} = U_L S_L V', \quad (8)$$

где U_L и V – унитарные матрицы $K \times L$ и $L \times L$, когда T_{nk} – матрица $K \times L$, а ранг T_{nk} равен L , S_L – матрица $L \times L$, которую можно записать как:

$$S_L = \begin{bmatrix} s_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & s_{LL} \end{bmatrix}. \quad (9)$$

Сингулярные значения T_{nk} расположены на главной диагонали матрицы (9). Для использования метода усечённого разложения по сингулярным числам используются числа, расположенные в левом столбце, так как они имеют более крупные сингулярные значения. В методе усечённого сингулярного разложения решение можно получить, усекая матрицу S_L , если удалять числа, имеющие более маленькие сингулярные значения. Тем самым этот способ будет выполнять такую же функцию, как и метод регуляризации (6). T_{nk} после применения метода усечённого сингулярного разложения, T_{nk}^{TSVD} можно выразить как

$$T_{nk}^{TSVD} = U_t S_t V_t', \quad (10)$$

где U_t и V_t состоят из первых t столбцов матриц U и V соответственно, а их размеры равны $K \times t$ и $L \times t$. S_t – диагональная матрица, первые t столбцов которой имеют большие сингулярные значения. Заменив T_{nk} в (7) на T_{nk}^{TSVD} , получим завершающее уравнение для метода наименьших квадратов в виде:

$$|F_n| = |T_{nk}^{TSVD} X_k|. \quad (11)$$

В результате применения метода усечённого сингулярного разложения в сочетании с методом наименьших квадратов можно получить физическое решение для дипольных моментов, используя только данные о величине полей.

Практическое обоснование

Рассчитаны электромагнитные поля от трёх дипольных источников на плоскости заземления. Схема расположения дипольных источников приведена на рис. 1. Три комбинации электрического и магнитного дипольных моментов: P_z , M_x и M_y находятся в трёх разных положениях.

С помощью исследуемого метода нелинейных наименьших квадратов на рис. 2. получена модель дипольных моментов. Полученные источники расположены рядом с исходными точками. Извлечённые диполи имеют меньшую величину, чем исходные дипольные источники, поскольку для каждого источника извлекается несколько дипольных моментов. Далее на частоте 500 МГц были рассчитаны, благодаря извлечённым диполям, исходное и реконструированное поля. Данные приведены на рис. 3а и 3б. Можно сказать, что полученные поля имеют схожую структуру. Предложенный метод позволяет извлекать модели дипольных источников при сканировании ближнего поля.



Рис. 1. Расположение источников ближнего поля

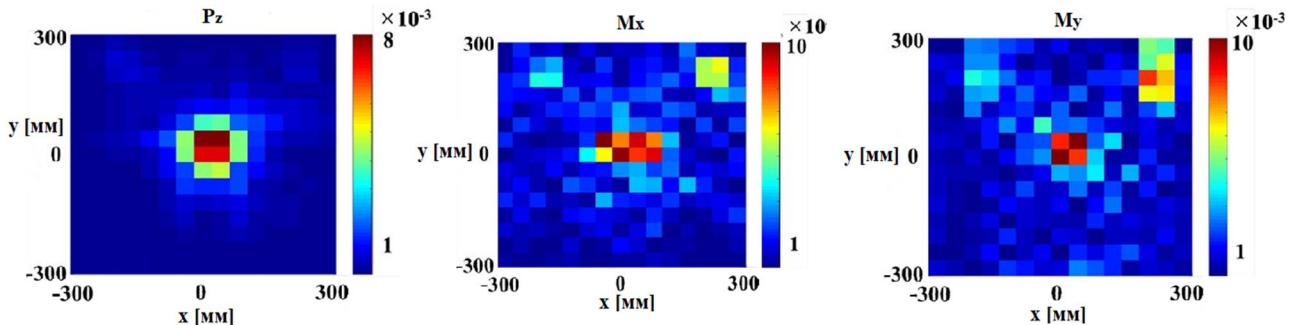


Рис. 2. Модель дипольных моментов, полученная с помощью предложенного метода наименьших нелинейных квадратов

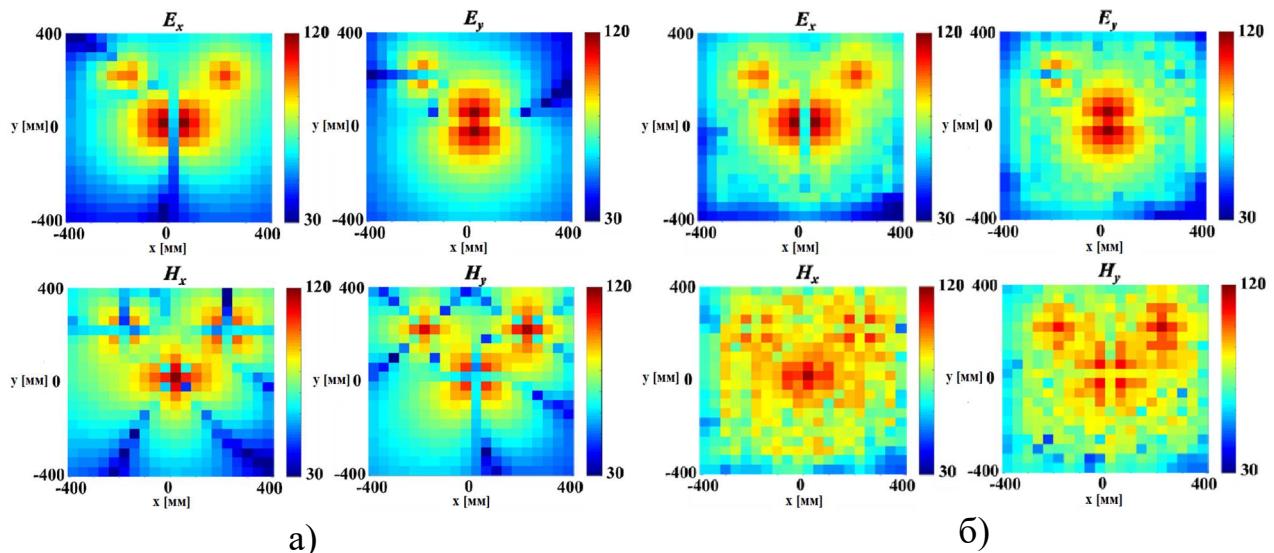


Рис. 3. Нормализованные поля в плоскости сканирования 500 МГц (E -поле и H -поле): а) исходные поля б) восстановленные поля на основе извлечённых диполей

В этой статье предлагается метод извлечения массива моделей источников дипольных моментов только из данных, полученных при сканировании ближнего поля. Как величина, так и фаза дипольных моментов могут быть получены с помощью метода нелинейных наименьших квадратов. Результаты, полученные в исследовании, показывают результативность и действенность этого способа, тем самым помогают уйти от помех, возникающих в интегральных схемах. Данный метод позволяет облегчить расчёты.

Литература

1. Кечиев Л.Н. Проектирование печатных плат для цифровой быстродействующей аппаратуры. М.: ООО «Группа ИДТ», 2007. 616 с.
2. Ашихмин А.В., Федоров С.М., Негров В.В., Пастернак Ю.Г., Авдюшин А.С. Антenna Вивальди с печатной линзой на единой диэлектрической подложке. Патент на изобретение RU 2593910 C2, 10.08.2016. Заявка № 2014128331/28 от 11.07.2014.
3. Зеленин И.А., Рыжиков А.Г., Фёдоров С.М. Антennaя решетка на основе линзы Ротмана. Вестник Воронежского государственного технического университета. 2012. Т. 8. № 11. С. 102-105.

THE NONLINEAR LEAST SQUARES METHOD

N.D. Maikov, V.V. Glotov, M.A. Romashchenko

Voronezh State Technical University

Abstract: the article describes the use of the nonlinear least squares method for near-field scanning. The method allows to extract the amplitude and phase of an equivalent array of dipole moments. The method is based solely on data on the field size.

Keywords: electric field, magnetic field, dipole moment, near field.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОВОЛЬТНОЙ КОНСОЛИДАЦИИ ПОРОШКОВ

Е.Г. Григорьев¹, В.Ю. Гольцев², А.В. Осинцев², Е.Л. Стрижаков³,
С.В. Нескоромный³, А.Н. Чумаков⁴, О.О. Кузнецик⁵

¹Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения
им. А.Г. Мержанова Российской академии наук, Черноголовка

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

³Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону

⁴Институт физики им. Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск

⁵Институт порошковой металлургии им. академика О.В. Романа
Национальной академии наук Беларуси, Минск

eugengrig@mail.ru

Аннотация: рассмотрены электротепловые процессы на контактах между частицами порошка и в масштабе порошковой заготовки при высоковольтной электроимпульсной консолидации. Приведены результаты математического моделирования режимов высоковольтной консолидации порошков, при которых процесс консолидации становится неустойчивым. Установлены области значений оптимальных параметров для режимов высоковольтной консолидации порошков тугоплавких материалов на основе вольфрама.

Ключевые слова: высоковольтная консолидация, электротепловой взрыв, порошки тугоплавких материалов, кумулятивный режим схлопывания межчастичных пор.

Преимущества метода высоковольтной консолидации связаны с его особынностью – кратковременностью импульса энергии электромагнитного поля воздействующего одновременно с механическим давлением на порошковую заготовку и высокой плотностью выделяемой энергии в зонах контактов между частицами порошка. Кратковременность высокотемпературного электросилового воздействия на порошковый материал в процессе высоковольтной консолидации позволяет сохранять исходное структурно-фазовое состояние в консолидированном компактном материале. При этом параметры высокоинтенсивного воздействия на порошковый материал должны максимально соответствовать оптимальным режимам высоковольтной консолидации этого материала.

Анализ электротепловых процессов, протекающих в межчастичных контактах порошкового образца при воздействии на него высоковольтного импульса тока длительностью менее 300 микросекунд и амплитудой до 500 кА см² одновременно с механическим давлением, выявил следующее. Тепловая мощность, выделяемая в межчастичных контактах, увеличивается с ростом амплитуды высоковольтного импульса тока и уменьшается с увеличением давления, приложенного к порошковому образцу за счет снижения контактного сопротивления между частицами порошка. Совместное влияние данных технологических параметров (амплитуды импульса тока и приложенного давления) на процесс высоковольтной консолидации характеризуется нелинейностью и не

монотонностью. Ранее в работе [1] установлено предельное значение плотности тока в межчастичных контактах порошковой заготовки, превышение которого приводит к локализации температуры в контактных областях и электрическому взрыву межчастичных контактов:

$$j_* = \sqrt{\frac{2\xi\sigma}{\rho h}} T_b^2, \quad (1)$$

где σ – постоянная Стефана – Больцмана; $\xi \leq 1$; T_b – температура кипения (потери проводимости) порошкового материала, h – толщина межчастичного контакта. Температура поверхности порошковой заготовки в течение процесса высоковольтной консолидации является важным параметром, регистрация которого позволяет оптимизировать процесс высоковольтной консолидации. Для этого был разработан и испытан измерительный комплекс [2], позволяющий одновременно регистрировать в течение процесса высоковольтной консолидации интенсивность теплового излучения поверхности образца методом импульсной фотометрии и параметры высоковольтного импульса тока (амплитуду и длительность импульса с помощью пояса Роговского), а также падение напряжения на порошковом образце. Принципиальная схема измерения параметров высоковольтного импульса тока и теплового излучения консолидируемого образца представлена на рис. 1.

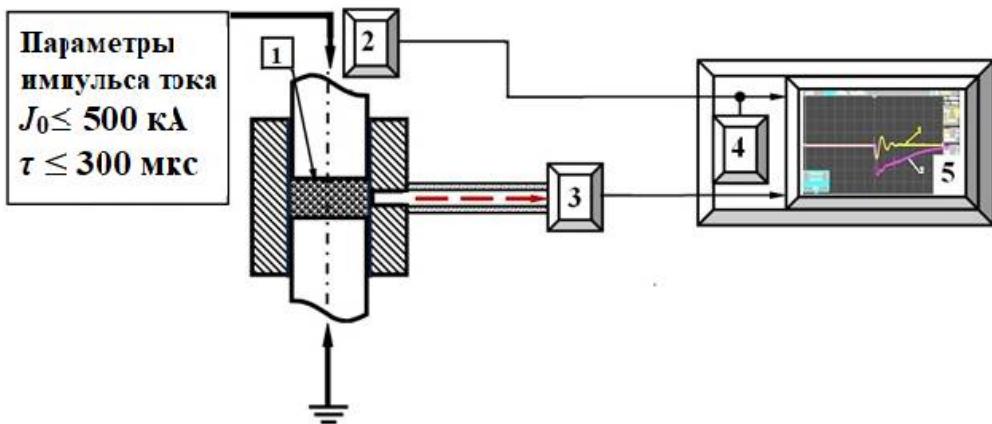


Рис. 1. Принципиальная схема измерения электротепловых параметров порошкового образца в процессе высоковольтной консолидации: 1 – порошок, 2 – пояс Роговского, 3 – фотодиод, 4 – блок контроля, 5 – электронный осциллограф

Измерительный комплекс включает пояс Роговского с интегрирующей схемой, который регистрирует параметры высоковольтного импульса тока, фотодиодные датчики, регистрирующие интенсивность теплового излучения, которое передается по специальному оптическому волноводу от излучающей поверхности консолидируемого порошкового образца, системы запуска и синхронизации компонентов измерительного комплекса, электронного осциллографа.

На рис. 2 приведен пример регистрации измерительным комплексом яркостной температуры поверхности порошкового образца и параметров импульса тока в процессе высоковольтной консолидации.

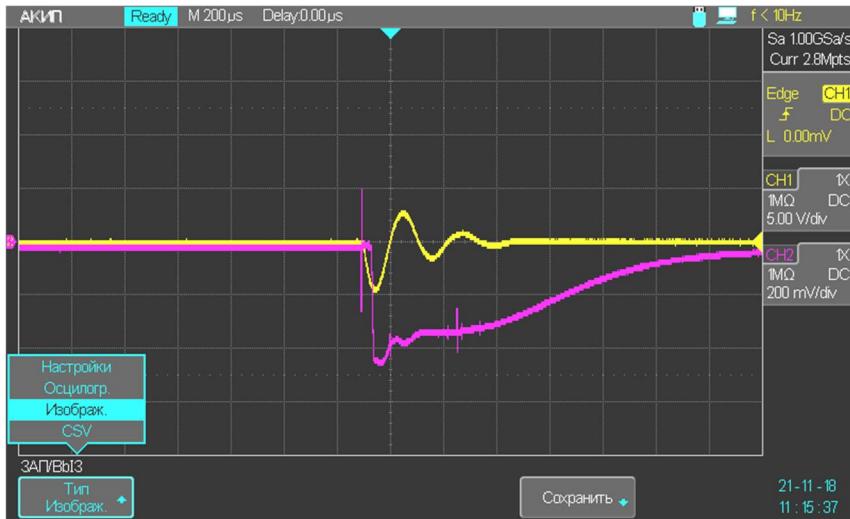


Рис. 2. Синхронные осциллограммы высоковольтного импульса тока (желтый цвет) и яркостной температуры поверхности (фиолетовый цвет) консолидируемого порошкового образца

Регистрация температуры порошкового образца в процессе консолидации позволяет прогнозировать изменение предела текучести и динамической вязкости материала порошка во время высоковольтного воздействия. Процесс уплотнения порошковой заготовки за счет высокоскоростной деформации существенно зависит от вязкопластических свойств уплотняемого материала.

Математическое моделирование процесса высоковольтной консолидации порошковых материалов проводилось на основе решения системы дифференциальных уравнений, выражающих законы сохранения массы, импульса, энергии, совместно с уравнениями электродинамики [3]:

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \operatorname{div}(\gamma \vec{v}) = 0, \quad (2)$$

$$\gamma \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}, \nabla) \vec{v} \right)_i = \left(\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \right)_i + F_i, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \gamma \left(\varepsilon + \frac{\vec{v}^2}{2} \right) = -\operatorname{div} \left(\gamma \vec{v} \left(w + \frac{v^2}{2} \right) - (\vec{v}, \hat{\sigma}') - \kappa \nabla T \right) + \frac{\vec{j}^2}{\sigma}, \quad (4)$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \vec{H} = \vec{j}, \quad \operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad (5)$$

$$\vec{F} = [\vec{j}, \vec{B}], \quad \vec{j} = \sigma (\vec{E} + [\vec{v}, \vec{B}]), \quad (6)$$

здесь γ – плотность, \vec{v} – скорость, ε – внутренняя энергия, w – энталпия, $\hat{\sigma}$ – тензор внутренних напряжений, $\hat{\sigma}'$ – тензор вязких напряжений, T – температура, \vec{E} , \vec{H} – напряженность электрического и магнитного поля, \vec{B} – индукция магнитного поля, \vec{j} – плотность электрического тока, \vec{F} – сила Ампера, κ –

теплопроводность, σ – проводимость среды. Система уравнений (2) – (6) дополняется соответствующими уравнениями состояния. Для материалов пресс-оснастки предполагается выполнение закона Гука. Уравнение состояния порошкового материала описывается вязко-пластической моделью материала [4]:

$$P = \frac{2}{3} Y(T) \ln \frac{\alpha}{\alpha(\alpha-1)} - \frac{4}{3} \eta \frac{\dot{\alpha}}{\alpha(\alpha-1)} - \frac{\gamma_m a_0^2}{3(\alpha_0-1)^{2/3}} \frac{d}{d\alpha} \left\{ \frac{\dot{\alpha}^2}{2} \left[(\alpha-1)^{-1/3} - \alpha^{-1/3} \right] \right\}, \quad (7)$$

здесь P – давление на порошок со стороны пuhanсонов, $\alpha = \gamma_m / \gamma$ ($\dot{\alpha}$ – дифференцирование α по времени), γ и γ_m – плотность порошка и компактного композиционного материала, $Y(T)$ – предел текучести вещества порошка, η – динамическая вязкость вещества порошка, a_0 – начальный размер пор в порошковом материале, α_0 – начальное значение α . Решение системы уравнений (2) – (7) с соответствующими начальными и граничными условиями выявляет основные закономерности макроскопических процессов, протекающих в порошковых материалах при высоковольтной электроимпульсной консолидации. Численные оценки параметров задачи позволяют существенно упростить исходную систему (2) – (7) при сохранении приемлемой точности получаемых решений [3].

На основе результатов математического моделирования совместно с экспериментальными данными по исследованию процесса высоковольтной консолидации порошковых материалов установлено, что процесс уплотнения порошкового образца имеет волновой характер, при котором высокоскоростное захлопывание пор между частицами порошка происходит на фронте волны. При этом процесс уплотнения порошкового материала под действием постоянного давления со стороны пuhanсонов представляет собой стационарную волну, распространяющуюся по образцу с постоянной скоростью. Изменение плотности консолидируемого материала происходит на фронте волны за счет пластического течения материала в межчастичные поры. Процесс захлопывания пор в порошковом материале анализируется с помощью уравнения, описывающего изменение безразмерной скорости изменения радиуса межчастичной поры u от безразмерного радиуса поры ξ , которое следует из уравнения (7).

$$\frac{du}{d\xi} + \frac{u}{\xi} \left(2 - \frac{1}{2} \frac{1 - \varphi^{-4/3}}{1 - \varphi^{-1/3}} \right) + \frac{1}{u\xi} \left(1 - \frac{2}{3} \beta \ln \varphi \right) (1 - \varphi^{-1/3})^{-1} + \frac{4}{R} \frac{1}{\xi^2} \left[\varphi (1 - \varphi^{-1/3}) \right]^{-1} = 0, \quad (8)$$

где $\varphi = 1 + 1 / \xi^3 (\alpha_0 - 1)$, $\xi = \frac{a(t)}{a_0} = \left(\frac{\alpha(t) - 1}{\alpha_0 - 1} \right)^{1/3}$, $u = \frac{da}{dt} \sqrt{\frac{\gamma_m}{P}}$, $a(t)$ – текущий радиус поры, $R = (a_0 / \eta) \cdot (P \times \gamma_m)^{1/2}$, $\beta = Y(T) / P$.

Начальное условие к уравнению (8) при $t = 0$: $\xi = 1$, $u = 0$. Особая точка этого уравнения ($\xi = 0$, $u^{-1} = 0$) является сложной и аналогична особой точке уравнения, описывающего захлопывание пустой сферической полости в вязкой жидкости [5]. Захлопывание поры в вязкопластическом материале может происходить либо при $u \rightarrow 0$, либо с кумуляцией энергии в точке $\xi = 0$, при этом $u \sim \xi^{-3/2}$. Сепаратриса, являющаяся особым решением уравнения (8) и разделя-

ющая на фазовой плоскости различные типы решений, определяет закон изменения скорости $u = -8\xi^{-1}$. Кумуляция энергии приводит к неограниченному нарастанию давления в момент захлопывания полости и образованию расходящейся ударной волны. Кумулятивные режимы захлопывания межчастичных пор в процессе уплотнения порошкового материала при высоковольтной консолидации приводят к экспериментально наблюдаемым неустойчивым режимам уплотнения консолидируемого материала. Поэтому важно установить область параметров кумулятивных режимов захлопывания полости. Для вязкопластического материала, граница области кумулятивных режимов определяется безразмерными параметрами R_* , β_* . Удобно рассматривать условия возникновения кумулятивных режимов в плоскости параметров $(1/R_*)$ и β_* [3]. На рис. 3 показаны области, отвечающие параметрам с различными режимами уплотнения ($1 - \alpha_0 = 1.10$, $2 - \alpha_0 = 1.25$, $3 - \alpha_0 = 1.43$, $4 - \alpha_0 = 2.00$, $5 - \alpha_0 = 2.33$).

Область I отвечает режимам с кумуляцией, область II – устойчивым режимам уплотнения с остаточной пористостью материала ($\alpha > 1$). Линии $(1/R_*) = f(\beta_*, \alpha_0)$ ограничивают область параметров, приводящих к кумулятивным режимам захлопывания поры. Точка $(1/R_*) = 0, \beta = \beta_{*0}$, где

$$\beta_{*0} = \frac{3}{2} \left(\ln \frac{\alpha_0}{\alpha_0 - 1} + \frac{\ln \alpha_0}{\alpha_0 - 1} \right)^{-1}, \quad (9)$$

соответствует границе кумулятивных режимов в порошковом материале без учета влияния вязкости. В общем случае значения функции $f(\beta_*, \alpha_0)$ определяются численным интегрированием уравнения (8) для функции $u(\xi)$.

Результаты математического моделирования кумулятивных режимов процесса высоковольтной консолидации подтверждены экспериментальными исследованиями высоковольтной электроимпульсной консолидации порошков тугоплавких материалов на основе вольфрама [2, 3, 6]. Проведенными исследованиями выявлены механизмы и закономерности процессов, протекающих при высоковольтной консолидации порошков. На начальном этапе процесса высоковольтной консолидации при превышении плотности импульсного тока критического значения может возникать эффект «электрического взрыва» материала в контактах между частицами порошка, см. выражение (1). Если амплитуда импульса тока не превышает критического значения, процесс нагрева образца импульсом тока протекает в устойчивом режиме. На этапе высокоскоростного уплотнения порошкового материала при постоянном давлении, создаваемом пневмосистемой, также возможно формирование неустойчивых режимов кон-

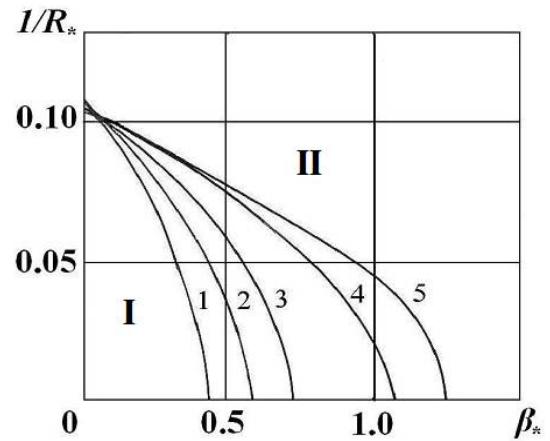


Рис. 3. Области значений безразмерных параметров, характеризующие режимы уплотнения [3]

солидации. Механизм, приводящий к неустойчивости в данном случае, связан с волновым характером процесса уплотнения порошкового материала. Уплотнение материала определяется процессом захлопывания межчастичных пор во фронте волны в порошковом материале, который может иметь различный характер. При устойчивом режиме консолидации скорость сокращения размера пор монотонно уменьшается за счет вязко-пластических свойств порошкового материала. Неустойчивый режим консолидации возникает, когда межчастичные поры захлопываются с возрастанием скорости в момент схлопывания – «режим кумуляции» [3]. При неустойчивом режиме, как правило, формируется неоднородная структура консолидированного материала [2, 3, 6].

Литература

1. Grigoryev E.G., Olevsky E.A. Thermal processes during high-voltage electric discharge consolidation of powder materials. *Scripta Materialia*, vol. 66, Iss. 9 (2012) p. 662-665.
2. Григорьев Е.Г., Стрижаков Е.Л., Нескоромный С.В., Агеев С.О., Чумаков А.Н., Никончук И.С., Кузнецик О.О. Электротепловые процессы при высоковольтной электроимпульсной консолидации тугоплавких порошковых материалов. Неравновесные процессы. Под ред. С.М. Фролова, А.И. Ланшина. – Москва, ТОРУС ПРЕСС, 2024, с. 342-342.
3. Grigoryev E., Abedi M., Goltsev V., Osintsev A., Plotnikov A., Moskovskikh D. Specific features of high-voltage consolidation of powders: theoretical and experimental study, *Metall. Mater. Trans. B* 53 (3) (2022) 1552–1563, <https://doi.org/10.1007/s11663-022-02465-x>, 2022/06/01.
4. Carroll, M.M., Kim, K.T., Nesterenko, V.F. The effect of temperature on viscoplastic pore collapse. *Journal of Applied Physics* 1986, Volume 59, p. 1962-1967, doi: <https://doi.org/10.1063/1.336426>.
5. Забабахин Е.И., Нечаев М.Н. Заполнение пузырьков в вязкой жидкости. *ПММ*, 1960, т.24, вып.6, с.1129-1131.
6. Григорьев Е.Г., Гольцев В.Ю., Осинцев А.В., Плотников А.С., Стрижаков Е.Л., Нескоромный С.В. Моделирование процессов высоковольтной консолидации порошков тугоплавких материалов. Физико-математическое моделирование систем. Материалы XXIII Международного семинара, Воронеж, 26-27 ноября 2021 г., с. 44-49.

MODELING OF ELECTRIC -THERMAL PROCESSES OF HIGH-VOLTAGE CONSOLIDATION OF POWDERS

**E.G. Grigoriev¹, V.Yu. Goltsev², A.V. Osintsev², E.L. Strizhakov³,
S.V. Neskromny³, A.N. Chumakov⁴, O.O. Kuznechik⁵**

¹Merzhanov Institute of Structural MacrokINETICS and Materials Science Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

²National Research Nuclear University “MEPhI”, Moscow

³Don State Technical University, Rostov-on-Don

⁴B.I. Stepanov Institute of Physics, Minsk, Belarus

⁵State Scientific Institution "Powder Metallurgy Institute", Minsk, Belarus

Abstract: the electrothermal processes at contacts between powder particles and at the scale of a powder blank during high-voltage electropulse consolidation are considered. The results of mathematical modeling of high-voltage powder consolidation modes, in which the consolidation process becomes unstable, are presented. The ranges of optimal parameter values for high-voltage consolidation modes of refractory tungsten-based powders are established.

Keywords: high-voltage consolidation, electrothermal explosion, powders of refractory materials, cumulative mode of interparticle pore collapse.

АНАЛИЗ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ СЖАТИЯ СИГНАЛОВ

А.В. Седов, К.О. Жариков

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)
имени М.И. Платова, Новочеркасск
jarikov.kirill@yandex.ru

Аннотация: сравниваются математические модели сжатия информации в цифровых системах, основанных на различных типах преобразований: разложении Фурье, дискретном косинусном преобразовании и разложении по окаймляющим функциям. Проводится их сравнительный анализ и рассматриваются их вычислительная эффективность, а также возможности в сжатии и восстановлении сигналов. Основной целью является обеспечение сокращения объема данных при сохранении и передаче информации без значительных потерь качества.

Ключевые слова: модели сжатия сигналов, преобразование Фурье, дискретное косинусное преобразование, метод окаймляющих функций.

Современные цифровые системы контроля, мониторинга и управления реализуют измерение, обработку сигналов, а также накопление и передачу информации по каналам связи. Для эффективной реализации накопления и передачи информации требуется применение специальных моделей анализа, сжатия и восстановления данных. Рассмотрим применение для этих целей следующих математических моделей сжатия сигналов: быстрое преобразование Фурье (БПФ), дискретное косинусное преобразование (ДКП) и разложение по окаймляющим функциям (РОФ) [1]. В рассмотренных случаях, как сжатие сигнала будем рассматривать замену исходного сигнала коэффициентами разложения.

БПФ широко применяется для спектрального анализа и обработки сигналов в реальном времени, ему характерна сложность, связанная с работой с комплексными значениями. ДКП – ключевой компонент в алгоритмах сжатия данных, таких как JPEG и MP3, по вычислительной сложности близок к дискретному преобразованию Фурье (ДПФ), но обрабатываются действительные величины. Метод окаймляющих функций, являясь по сути разложением по тригонометрическим функциям, но в котором в качестве коэффициентов разложения использует сами отсчеты сигнала, чем вычислительно он подобен полиному Лагранжа. По реализации вычислений он наиболее прост.

Остановимся подробнее на каждой из перечисленных моделей сжатия сигналов. ДКП – это специальное преобразование, подобное ДПФ, но использующее только косинусные функции, действительные коэффициенты разложения и особое представление разлагаемого сигнала. Оно хорошо подходит для обработки сигналов с высокой корреляцией отсчетов, таких как изображения или аудио. ДКП стремится сосредоточить большую часть энергии сигнала в нескольких первых коэффициентах, что упрощает сжатие.

Прямое ДКП определяется формулой [2]:

$$y_k = \sqrt{\frac{2}{N}} c(k) \sum_{j=0}^{N-1} x_j \cos\left(\frac{\pi k}{N}\left(j + \frac{1}{2}\right)\right), \quad k = \overline{0, N-1},$$

$$c(k) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}, & \text{при } k = 0; \\ 1, & \text{при } k \neq 0. \end{cases}$$

Для восстановления преобразованного сигнала используется обратное ДКП, которое имеет выражение [2]:

$$x_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{k=0}^{N-1} c(k) y_k \cos\left(\frac{\pi k}{N}\left(j + \frac{1}{2}\right)\right), \quad j = \overline{0, N-1}.$$

Для иллюстрации применения перечисленных моделей сжатия возьмем в качестве исходного сжимаемого сигнала $x(t)$, сигнал, состоящий из четырех гармоник с кратными частотами и на интервале измерения (периоде) заданный равноточечными отсчетами $x_j, j = \overline{0, N-1}$, причем $N = 250$ отсчетов (рис. 1).

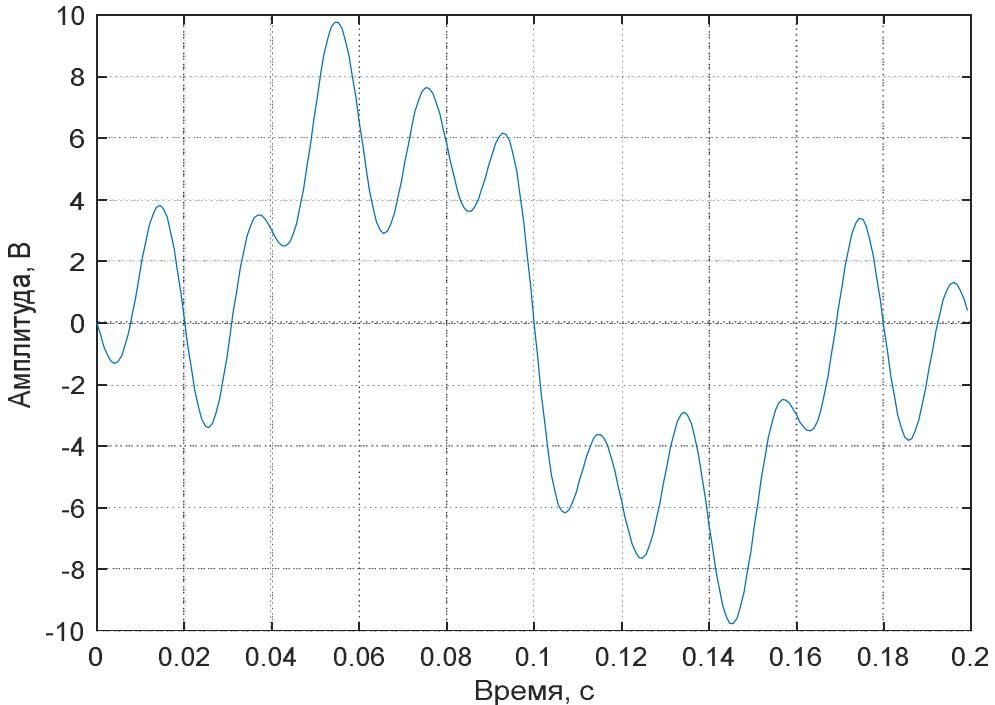


Рис. 1. Исходный сжимаемый сигнал $x(t)$

После применения прямого ДКП к $x_j, j = \overline{0, N-1}$ было выделено 39 первых значимых коэффициентов ДКП (рис. 2). По этим коэффициентам было выполнено восстановление исходного сигнала с использованием обратного ДКП. Относительная среднеквадратическая погрешность восстановления составила 0.02% при уплотнении информации более, чем в 5 раз.

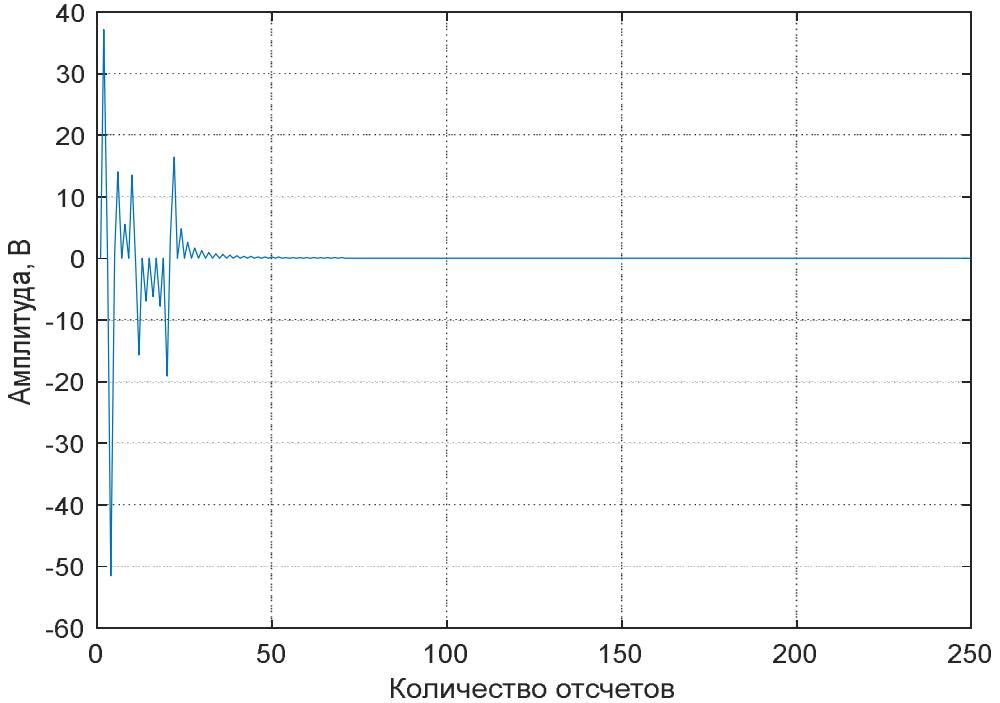


Рис. 2. Коэффициенты разложения ДКП y_k исходного сигнала

Модель сжатия сигнала $x(t)$ на основе ДПФ или БПФ определяется выражением:

$$X_k = \sum_{i=0}^{N-1} x_i e^{-j2\pi kn/N}.$$

Основное преимущество БПФ заключается в его низкой вычислительной сложности — $O(N \log N)$, что делает его особенно полезным для обработки данных в реальном времени. БПФ широко применяется в спектральном анализе, фильтрации сигналов и радиосвязи. Однако его слабая сторона — чувствительность к резким изменениям в сигнале и его не периодичности.

Применив модель сжатия на основе БПФ, получим результат — амплитудный спектр, изображенный на рис. 3.

На графике выделены четыре гармоники исходного сигнала $x(t)$. Следовательно, восемь отсчетов X_k комплексного спектра, определенных на основе БПФ полностью восстановят исходный сигнал $x(t)$ — 250 значений. Это значительно меньше, чем при использовании того же ДКП. Коэффициент сжатия сигнала при использовании модели на основе БПФ в 31 раз.

Модель сжатия сигнала на основе окаймляющих функций определяется формулой [1, 3]

$$x(t) = \sum_{i=0}^{N-1} x_i \left[\frac{1}{N} + \frac{2}{N} \sum_{n=1}^{<N/2>} \cos \left(2\pi n \left(\frac{t}{T} - i \right) / N \right) \right] = \sum_{i=0}^{N-1} x_i S_N^{\frac{t}{T}-i}.$$

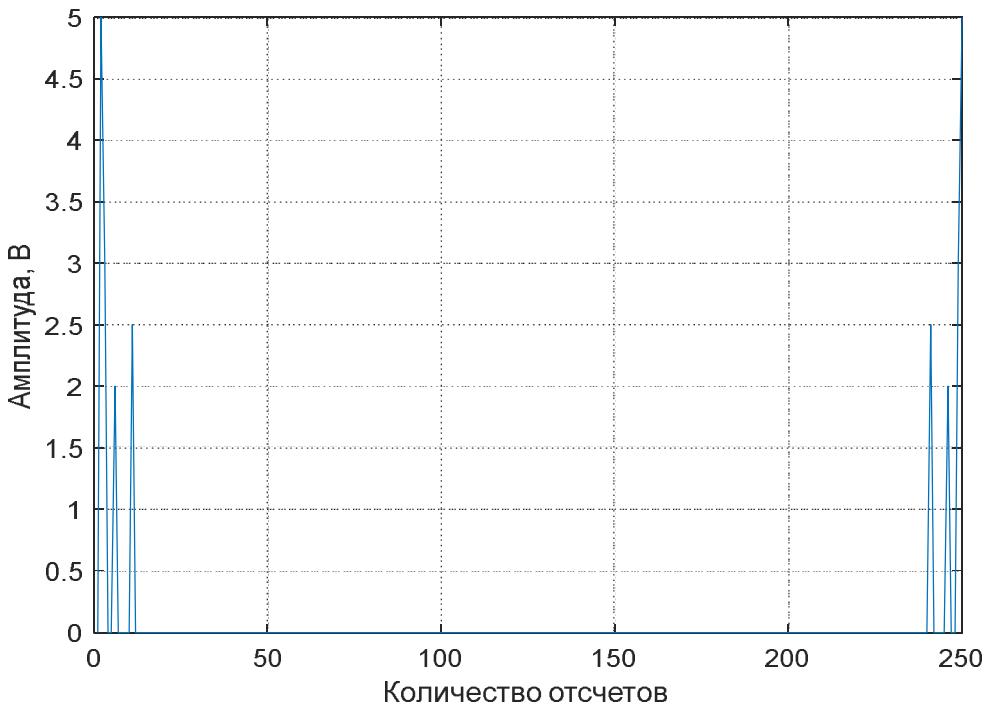


Рис. 3. Амплитудный спектр $|X_k|$ сигнала, вычисленный по БПФ

Важно, что в этом случае сжатия сигнала не требуется расчет каких-либо коэффициентов разложения. В качестве таких коэффициентов выступают сами отсчеты исходного сигнала x_i , но прореженные во времени. То есть, вместо 250 отсчетов в нашем случае берется 9 равномерно прореженных отсчетов x_i .

Эта модель сжатия хорошо подходит для восстановления сигналов и применяется в ситуациях, когда требуется высокая скорость при работе с ограниченными интервалами времени или частоты. Он позволяет точно восстановить сигнал, если известны его ключевые частоты, а также может быть адаптирован под конкретные задачи, где априорно известны важные частоты.

Преобразовав и восстановив исходный сигнал с помощью этой модели, получим практически отсутствие ошибки в значении $1.0319 \cdot 10^{-15}$, а коэффициент сжатия в 28 раз.

Вывод

Каждая из рассмотренных моделей имеет свои собственные особенности. БПФ эффективен для анализа спектра и обработки данных в реальном времени. ДКП является универсальным методом, но в тоже время он менее эффективен в подобных периодических задачах. Метод окаймляющих функций предлагает более быстрое и точное преобразование при практически таком же показателе сжатия, как у БПФ.

Литература

1. Седов А.В. Восстановление, фильтрация и аппроксимация дискретных сигналов с использованием окаймляющих функций // Вестник Южного научного центра РАН. Том 4, № 4, 2008. С. 83-89.

2. Умняшкин С.В. Теоретические основы цифровой обработки сигналов. М.: ИНФРА-М, 2008. -320 с.
3. Седов А.В. Моделирование объектов с дискретно-распределенными параметрами. Декомпозиционный подход. М.: Наука, 2010. 438 с.

ANALYSIS OF MATHEMATICAL MODELS OF SIGNAL COMPRESSION

A.V. Sedov, K.O. Zharikov

South-Russian State Polytechnic University (NPI) named after M.I. Platov, Novocherkassk

Abstract: mathematical models of information compression in digital systems based on different types of transformations are compared: Fourier expansion, discrete cosine transform and expansion by bordering functions. Their comparative analysis is carried out and their computational efficiency is considered, as well as the possibilities in compression and restoration of signals. The main goal is to ensure reduction of the data volume while preserving and transmitting information without significant loss of quality.

Keywords: signal compression models, Fourier transform, discrete cosine transform, fringing function method.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И СТАБИЛЬНОСТИ БИКАТИОННОГО КОМПЛЕКСА $\text{ZnMg}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$

А.С. Зюбин¹, Т.С. Зюбина¹, О.В. Кравченко¹, М.В. Соловьев¹,
В.П. Васильев^{1,2}, А.А. Зайцев¹, А.В. Шиховцев^{1,2}, Ю.А. Добровольский^{1,2}

¹Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии РАН, Черноголовка

²ООО «Центр водородной энергетики» (ПАО АФК «Система»), Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

Аннотация: в рамках метода функционала плотности с использованием периодических граничных условий и кластерного приближения выполнено моделирование структуры и ИК-спектра комплекса $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$. Найдено, что в модельном кристалле формируются группы $(\text{BH}_4^-)_2\text{M}^{2+}(\text{NH}_3)_2$. Наиболее близко расположенные атомы Zn и Mg образуют искаженные ромбы, объединенные в гофрированные пластины. В кластерном приближении рассчитаны ИК-спектры для тетраамиаката и энергии Гиббса для систем с разным количеством молекул NH_3 . Найдено, что модельный ИК-спектр неплохо согласуется с экспериментальным. Изменения энергии Гиббса указывают на то, что смешанный борогидрид $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4$ может удерживать до пяти молекул аммиака на пару MgZn при температурах 400 - 450 К.

Ключевые слова: водородная энергетика, химические источники водорода, аммиакаты борогидридов металлов, квантово-химическое моделирование, функционал плотности.

В течение нескольких последних десятилетий ведется активный поиск и изучение конденсированных веществ, содержащих большое количество водорода (не менее 10-12 массовых процентов), способных отдавать его при умеренных температурах (150-300 °C) [1, 2]. Одной из групп таких веществ являются аммиакаты комплексных борогидридов, устойчивых при комнатной температуре и разлагающихся без выделения диборана [3]. В этой области подробно изучаются аммиакаты борогидрида магния, содержащие до 16.8 масс. % H_2 , но их температура разложения все же довольно высока (более 200 °C), а водород содержит примеси аммиака. В качестве возможного пути снижения температуры разложения и содержания примесей рассматриваются комплексные борогидриды с разными катионами [4]. Как одна из таких систем в нашем отделе синтезирован и подробно изучается тетраамиакат смешанного борогидрида с катионами цинка и магния $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$.

Целью данной работы является определение с помощью квантово-химического моделирования основных структурных характеристик данного диаммиаката, основные черты его ИК-спектра и возможность удержания максимального количества молекул аммиака. Для решения этой задачи на первом этапе был выполнен расчет кристалла $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$ в приближении периодических граничных условий (ПГУ) с помощью программного комплекса VASP [5, 6] с функционалом PBE и базисом проектированных плоских волн

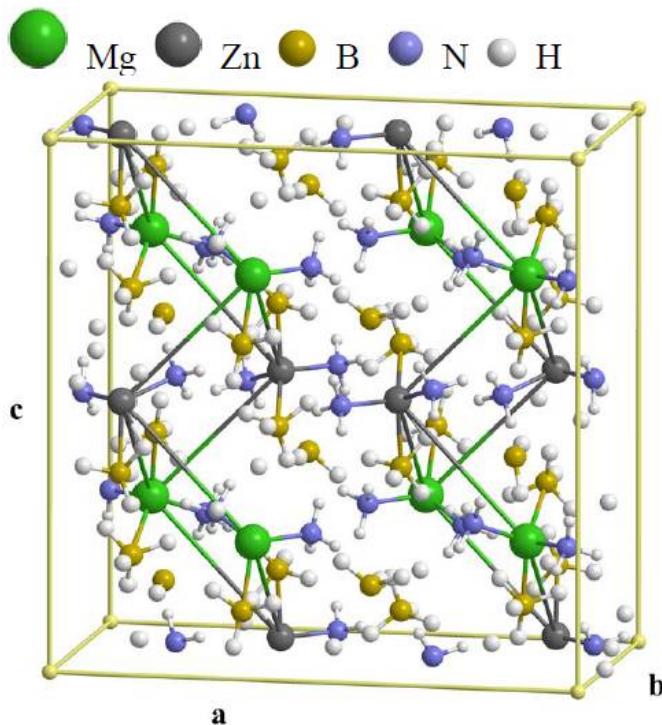


Рис. 1. Размножаемая ячейка, моделирующая кристалл $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$ в рамках ПГУ.

$a = 17.40$, $b = 9.40$, $c = 17.60$ Å

ромбы со сторонами 6.1 – 6.2 Å и диагоналями (рис. 1). Однако можно построить и другую пространственную сетку, состоящую из зигзагообразных цепочек, связывающих пары Zn–Zn, Mg–Zn и Mg–Mg с расстояниями 6.3, 6.1 и 6.4 Å.

К сожалению, в рамках данного приближения нет алгоритма аналитического расчета вторых производных полной энергии системы по координатам атомов, что не дает возможности расчета колебательных спектров и энергии Гиббса, необходимой для оценки стабильности системы к отщеплению молекул аммиака. Моделирование этих характеристик возможно лишь в рамках кластерного приближения. Согласно [7, 8], для аммиакатов борогидрида магния взаимное влияние структурных блоков $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2 \cdot n\text{NH}_3$ не приводит к их существенным изменениям, и кластерное приближение адекватно воспроизводит основные характеристики конденсированной фазы, прежде всего взаимное расположение базовых структурных фрагментов и расстояния между ними. Поэтому и для $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4 \cdot n\text{NH}_3$ моделирование было выполнено в рамках кластерного приближения с использованием того же подхода, что и в [7, 8], с применением гибридного функционала плотности B3LYP и валентно-двуухэкспонентного базиса 6–31G* с помощью программного комплекса GAUSSIAN [9]. Полученные в рамках самосогласованного поля (CCP, или SCF) энергии корректировались введением поправок на энергию нулевых колебаний (ЭНК, или ZPE) и энтропийных вкладов при нормальных условиях (1 атм., 20°C). При определении энергетических характеристик изучаемых систем их геометрические параметры были полностью оптимизированы.

(PAW) с пределом по энергии 600 эВ. Для моделирования была использована размножаемая ячейка, включающая восемь формульных единиц данного соединения (рис. 1). Как координаты атомов, так и параметры ячейки были оптимизированы.

Согласно полученным результатам, в этой системе формируются группы $(\text{BH}_4^-)_2\text{M}^{2+}(\text{NH}_3)_2$, т.е. катионы металла являются четырехкратно координированными ($\text{КЧ}=4$), причем расстояния Zn–N немногим меньше, чем Mg–N (табл. 1), что согласуется с более низким значением ионного радиуса у цинка. Наиболее близко расположенные атомы Zn и Mg формируют слегка искаженные

6.4 и 10.5 Å, объединенные в гофрированные пластины (рис. 1). Однако можно построить и другую пространственную сетку, состоящую из зигзагообразных цепочек, связывающих пары Zn–Zn, Mg–Zn и Mg–Mg с расстояниями 6.3, 6.1 и 6.4 Å.

С учетом полученных выше результатов достаточно хорошей моделью данной системы является кластер $2[\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3]$, включающий четыре атома щелочноземельного металла, но возможны два варианта: чередование атомов Zn и Mg в четырехугольнике и их попарное расположение. Для краткости далее такие кластеры будут обозначаться как M1,M2,M3,M4 i,j,k,m, где M – Zn или Mg, i,j,k,m – количество молекул аммиака, координированных к M1,M2,M3,M4. Структурные и энергетические параметры у кластеров Zn,Mg,Zn,Mg 2,2,2,2 и Zn,Zn,Mg,Mg 2,2,2,2 оказываются практически одинаковыми (табл. 1, 2). Как и в кристалле, в них вокруг катионов металла формируются искаженные тетраэдры, в вершинах которых находятся анионы BH_4^- и молекулы NH_3 . Различия в расстояниях M–B невелики и составляют ~ 0.05 и 0.03 Å для магния и цинка соответственно. Для расстояний M–N разница еще меньше – 0.03 и 0.01 Å (табл. 1). Наиболее существенными оказываются различия в форме группировки M1,M2,M3,M4 – в кластере она близка к квадрату, а в кристалле – к вытянутому ромбу (рис. 1, 2).

Таблица 1

Равновесные расстояния (Å) в комплексах $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$

	R(MgB)	R(MgN)	R(ZnB)	R(ZnN)	R(MgZn)
Крист., расчет	2.27 - 2.41	2.12 - 2.13	2.30 - 2.34	2.08 - 2.10	6.13 - 6.21
Zn,Mg,Zn,Mg 2,2,2,2	2.21 - 2.46	2.15 - 2.17	2.27 - 2.34	2.07 - 2.09	5.20 - 5.43
Zn,Zn,Mg,Mg 2,2,2,2	2.21 - 2.46	2.16 - 2.17	2.26 - 2.34	2.08 - 2.10	5.22 - 5.38

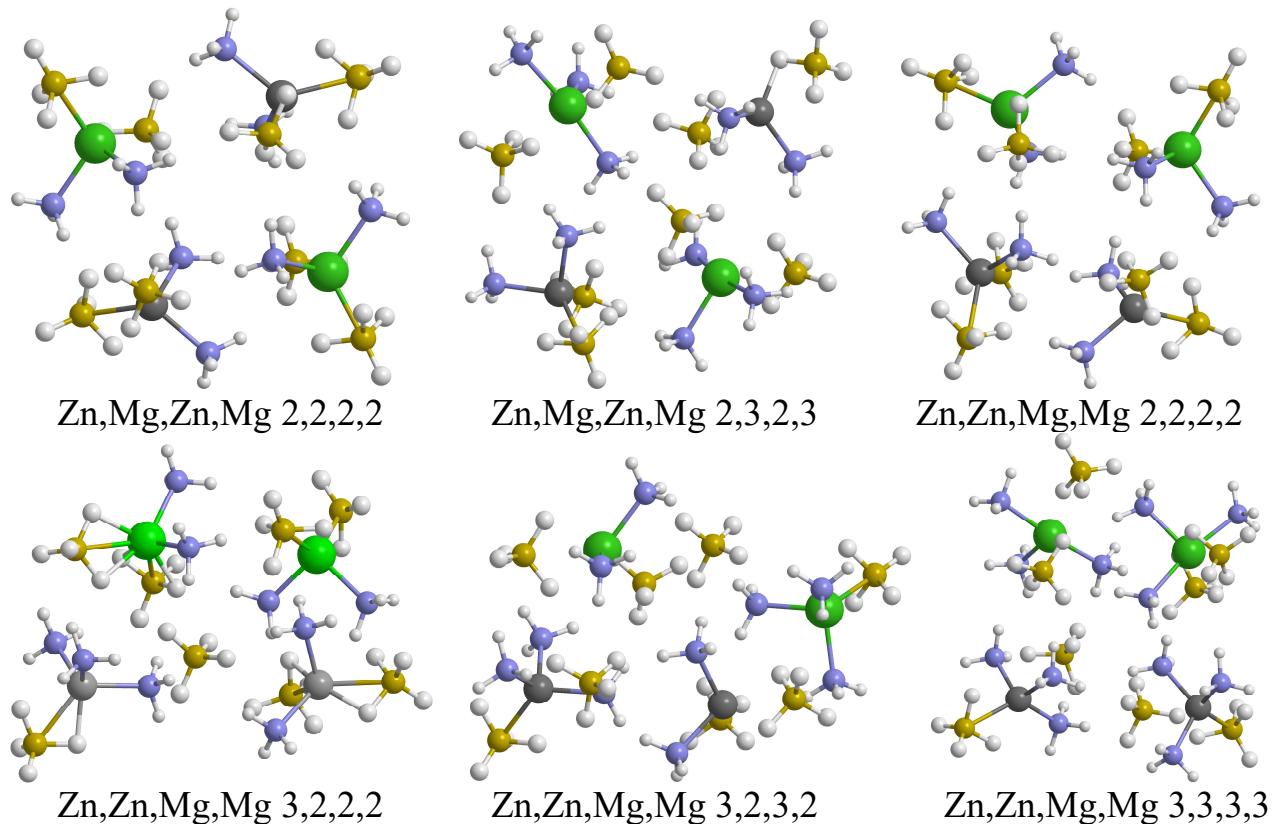


Рис. 2. Избранные структуры комплексов $2(\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4) \cdot n\text{NH}_3$

Рассчитанные для этих систем ИК-спектры (рис. 3, черная и красная кривые) визуально неразличимы. В них можно выделить следующие группы колебаний: пик в области 3400 1/см – асимметричные, а в области 3300 1/см – симметричные колебания связей N–H в молекулах аммиака. Колебания терминальных связей B–H в анионах, координированных к катионам цинка, дают полосу 2500 - 2400 1/см, а к катионам магния – 2380 - 2360 1/см. Колебания мостиковых связей B–H_b (т.е. ориентированных к катиону металла) генерируют полосы 2300 - 2200 1/см у фрагментов B_{Mg}–H_b и 2075 1/см у B_{Zn}–H_b. Следующая интенсивная полоса при 1650 1/см сформирована угловыми колебаниями связей N–H, далее идет широкая полоса, включающая колебания разных групп: угловые колебания связей B–H_b дают пик в области 1340 1/см, зонтичные колебания связей N–H – при 1270 1/см, при 1150 1120 1/см – угловые искажения формы анионов BH₄⁻. Широкая полоса в области 700 - 600 1/см сформирована поворотами молекул NH₃, слабый пик при 745 1/см – смещениями и вращениями анионов BH₄⁻. В целом рассчитанный спектр вполне удовлетворительно согласуется с полученным экспериментально (рис. 4).

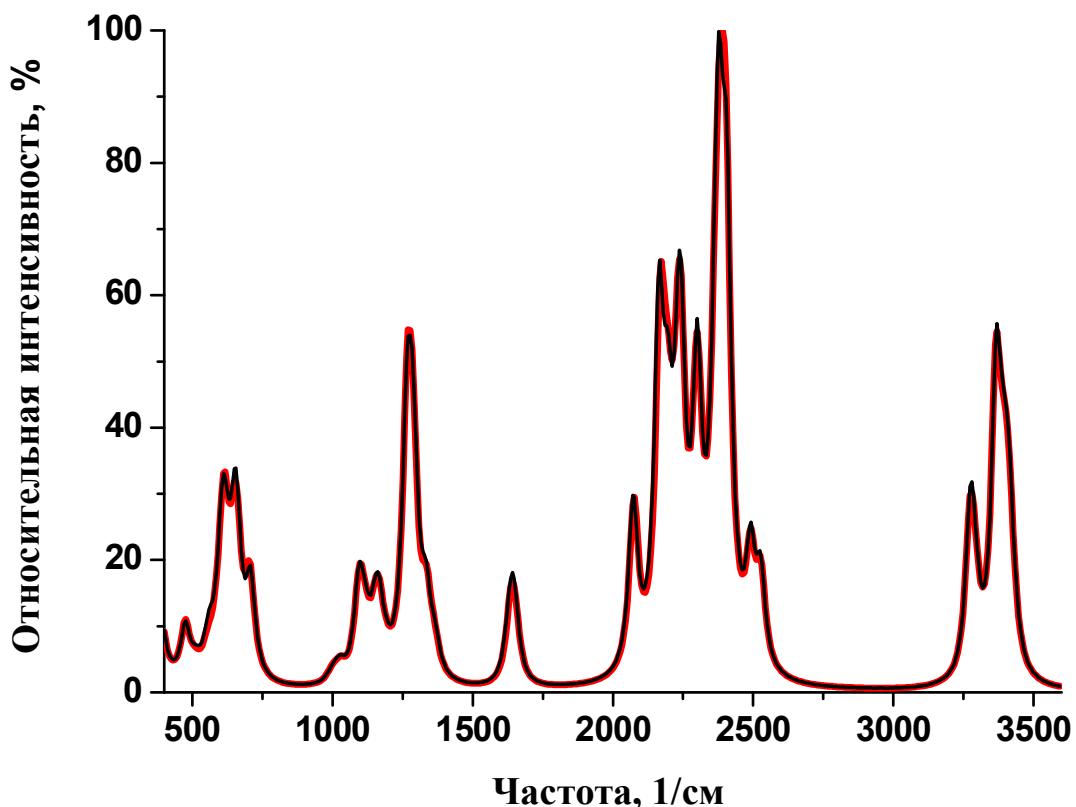


Рис. 3. Инфракрасные спектры комплексов Zn,Mg,Zn,Mg 2,2,2,2 (a) и Zn,Zn,Mg,Mg 2,2,2,2 (b)

Для выяснения тенденций в энергиях присоединения молекул аммиака смешанному борогидриду цинк - магний было выполнено моделирование кластеров Zn,Zn,Mg,Mg 2,2,2,2 и Zn,Mg,Zn,Mg 2,2,2,2 с постепенным увеличением количества молекул аммиака до трех у каждого катиона. Энергии этих систем относительно кластера [MgZn(BH₄)₄] и соответствующего количества молекул

NH_3 приведены в табл. 2, а изображения наиболее интересных структур – на рис. 2. Как и следовало ожидать, энергии на уровне самосогласованного поля (Ессп) и теплоты образования (H) монотонно, хотя и нелинейно снижаются при увеличении количества молекул аммиака, причем эта разница постепенно уменьшается. Энергия Гиббса (G) тоже снижается в этом ряду, но гораздо слабее (табл. 2).

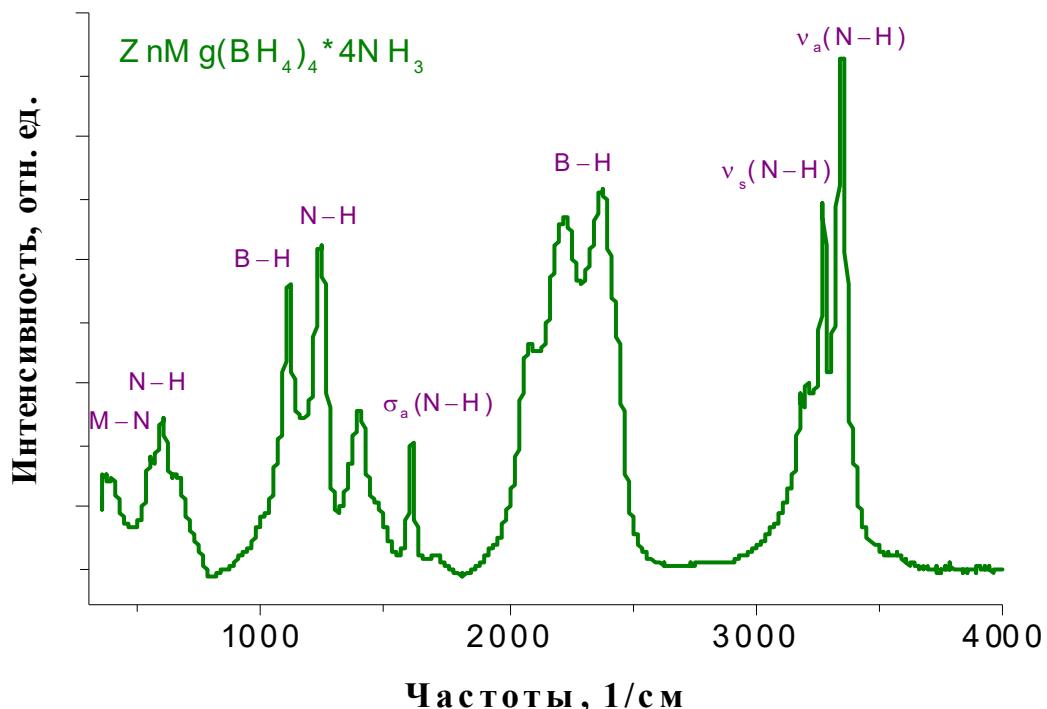


Рис. 4. Полученный экспериментально инфракрасный спектр комплекса $\text{ZnMg}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$

Таблица 2

Энергии Гиббса (в эВ) при температуре 298 К и давлении 1 атм. для комплексов $\text{M}_1\text{M}_2\text{M}_3\text{M}_4(\text{BH}_4)_8 \cdot i\text{NH}_3 \cdot j\text{NH}_3 \cdot k\text{NH}_3 \cdot m\text{NH}_3$ ($\text{M}_1, \text{M}_2, \text{M}_3, \text{M}_4 = \text{Mg, Zn}$) относительно $(\text{M}_1(\text{BH}_4)_2\text{M}_2(\text{BH}_4)_2)_2$ и $(i+j+k+m)\text{NH}_3$.

$$\Delta G = G[(\text{Zn}(\text{BH}_4)_2\text{Mg}(\text{BH}_4)_2)_2] + 2(i+j+k+m)G[\text{NH}_3] - G[\text{M}_1(\text{BH}_4)_2i\text{NH}_3 \cdot \text{M}_2(\text{BH}_4)_2j\text{NH}_3 \cdot \text{M}_3(\text{BH}_4)_2k\text{NH}_3 \cdot \text{M}_4(\text{BH}_4)_2m\text{NH}_3].$$

$\text{M}_1, \text{M}_2, \text{M}_3, \text{M}_4, i, j, k, m$	ΔG	$\text{M}_1, \text{M}_2, \text{M}_3, \text{M}_4, i, j, k, m$	ΔG	$\text{M}_1, \text{M}_2, \text{M}_3, \text{M}_4, i, j, k, m$	ΔG
$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 2, 2, 2, 2$	-3.98	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 2, 2, 2, 2$	-3.98	$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 3, 3, 2, 2$	-4.00
$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 3, 2, 2, 2$	-3.85	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 2, 2, 2, 3$	-4.15	$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 3, 3, 3, 2$	-4.42
$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 2, 3, 2, 2$	-4.01	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 3, 2, 2, 2$	-4.23	$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 3, 3, 2, 3$	-4.43
$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 2, 3, 2, 3$	-4.34	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 3, 3, 2, 2$	-4.19	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 3, 3, 3, 2$	-4.49
$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 3, 2, 3, 2$	-4.29	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 3, 3, 2, 2$	-4.30	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 2, 3, 3, 3$	-4.58
$\text{Zn, Mg, Zn, Mg } 3, 2, 2, 3$	-4.03	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 3, 2, 3, 2$	-4.19	$\text{Zn, Zn, Mg, Mg } 3, 3, 3, 3$	-4.73

Согласно полученным результатам, при переходе от Zn, Zn, Mg, Mg 1,2,2,2 к Zn, Zn, Mg, Mg 2,2,2,2 или к Zn, Mg, Zn, Mg 2,2,2,2 разница для ΔG составляет ~ 0.4 эВ, а в конце ряда (Zn, Zn, Mg, Mg 2,3,3,3 и Zn, Zn, Mg, Mg 3,3,3,3) она снижается более чем вдвое. Однако изменение величины ΔG является немонотонным, и в некоторых случаях ее понижение при присоединении новой молекулы NH_3 оказывается существенным. Так, при переходе от Zn, Zn, Mg, Mg 2,2,2,2 к Zn, Zn, Mg, Mg 3,2,2,2 ΔG снижается на 0.25 эВ, а при переходе к Zn, Zn, Mg, Mg 3,2,3,2 еще примерно на такую же величину (табл. 2). Существенное понижение энергии Гиббса имеет место и при формировании Zn, Mg, Zn, Mg 2,3,2,3. Для этих систем было выполнено моделирование зависимости энергии Гиббса от температуры (табл. 3). Согласно полученным результатам, для Zn, Mg, Zn, Mg 2,2,2,2 величина ΔG начинает понижаться при отрыве NH_3 после 550 К, для Zn, Zn, Mg, Mg 3,2,2,2 – после 450 К, а для Zn, Zn, Mg, Mg 3,2,3,2 – примерно после 440 К. Конечно, полученные в кластерном приближении результаты не могут считаться достаточно точными для конденсированной фазы, однако они указывают на то, что смешанный борогидрид $MgZn(BH_4)_4$ может достаточно прочно удерживать до пяти молекул NH_3 на пару $MgZn$, и это предположение стоило бы проверить экспериментально, поскольку массовое содержание водорода в таких комплексах будет выше.

Таблица 3
Энергии Гиббса (в эВ) для кластеров Zn, Mg, Zn, Mg *B8*An и Zn, Zn, Mg, Mg *B8*An при разных температурах относительно Zn, Mg, Zn, Mg *B8 и $n NH_3$

Система	298.15 K	400 K	450 K	500 K	550 K	600 K	650 K
Zn, Mg, Zn, Mg 1,2,2,2	-3.57	-2.50	-1.98	-1.46	-0.95	-0.45	0.06
Zn, Mg, Zn, Mg 2,2,2,2	-3.98	-2.74	-2.14	-1.54	-0.95	-0.36	0.22
Zn, Zn, Mg, Mg 2,2,2,2	-3.98	-2.73	-2.13	-1.53	-0.94	-0.36	0.23
Zn, Zn, Mg, Mg 3,2,2,2	-4.23	-2.82	-2.14	-1.47	-0.80	-0.13	0.53
Zn, Zn, Mg, Mg 3,2,3,2	-4.49	-2.89	-2.12	-1.35	-0.58	0.17	0.92
Zn, Mg, Zn, Mg 2,3,2,3	-4.34	-2.77	-2.01	-1.26	-0.51	0.23	0.97

Данная работа выполнена на ВЦ ФИЦПХФиМХ РАН в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования РФ, регистрационный номер 124013000692-4.

Литература

1. Huang Y., Cheng Y., Zhang J. // Ind. Eng. Chem. Res. 2021. V. 60. P. 2737-2771.
2. Ouyang L., Chen K., Jiang J., Yang X-S., Zhu M. // J. Alloys and Comp. 2020. V. 829. P. 154597.
3. Staubitz A., Robertson A. P. M., Manners I. // Chem. Rev. 2010. V. 110. P. 4079-4124.
4. Ravnsbæk D., Filinchuk Y., Cerenius Y., at al. // Angew. Chem. Int. Ed. 2009. V. 48. P. 6659.
5. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1993. V.47. P. 558.
6. Hafner J. // J. Comput. Chem. 2008. V.29. P.2044.

7. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В. и др. // Ж. Неорг. Химии. 2022. Т. 67. С. 1425.
8. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В. и др. // Ж. Неорг. Химии. 2024. Т. 69. DOI: 10.1134/S0036023624600874
9. Gaussian 09, Revision B.01. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.

QUANTUM CHEMICAL MODELING OF THE STRUCTURE AND STABILITY OF THE BICATIONIC $\text{ZnMg}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$ COMPLEX

**A.S. Zyubin¹, T.S. Zyubina¹, O.V. Kravchenko¹, M.V. Solov'ev¹, V.P. Vasiliev^{1,2},
A.A. Zaitsev¹, A.V. Shikhovtsev^{1,2}, Yu.A. Dobrovolsky^{1,2}**

¹Federal Research Center for Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry,
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

²Hydrogen energy center of AFK “Sistema”, Chernogolovka

Abstract: in the frame of the density functional theory with periodic boundary conditions and cluster approximation were modeled the structure and IR spectrum of the $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4 \cdot 4\text{NH}_3$ complex. It was found that $(\text{BH}_4^-)_2 \text{M}^{2+}(\text{NH}_3)_2$ groups are formed in the model crystal. The most closely spaced Zn and Mg atoms form distorted rhombuses combined into corrugated plates. The IR spectra for tetraamiate and Gibbs energy for systems with different numbers of NH_3 molecules are calculated in the cluster approximation. It was found that the model spectrum agrees well with the experimental one. Changes in the Gibbs energy indicate that the mixed borohydride $\text{MgZn}(\text{BH}_4)_4$ can hold up to five ammonia molecules per MgZn pair at temperatures up to 400-450 K.

Keywords: hydrogen energy, chemical sources of hydrogen, ammoniacates of metal borohydrides, quantum chemical modeling, density functional.

УДАЛЕНИЕ АТОМОВ СЕРЕБРА С ОКИСЛЕННОЙ ПОВЕРХНОСТИ Ag(111). КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Т.С. Зюбина¹, А.С. Зюбин¹, А.Е. Укш¹,
А.А. Глухов¹, Ю.А. Добровольский^{1,2}

¹Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии РАН, Черноголовка

²ООО «Центр водородной энергетики» (ПАО АФК «Система»), Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

Аннотация: в приближении периодических граничных условий с использованием функционала плотности РВЕ и базиса проектированных плоских волн PAW выполнено моделирование адсорбции атомов кислорода на поверхность Ag(111). Рассмотрена миграция атомов кислорода по поверхности и в объеме кристалла и влияние окисления на энергию отрыва атомов серебра от поверхности. Найдено, что окисление облегчает удаление атомов серебра с поверхности, снижая энергию отрыва с 3.11 эВ (для исходной поверхности) до 1.95 - 2.86 эВ (в зависимости от степени окисления).

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, поверхность кристалла Ag(111), адсорбция кислорода на поверхность кристалла серебра.

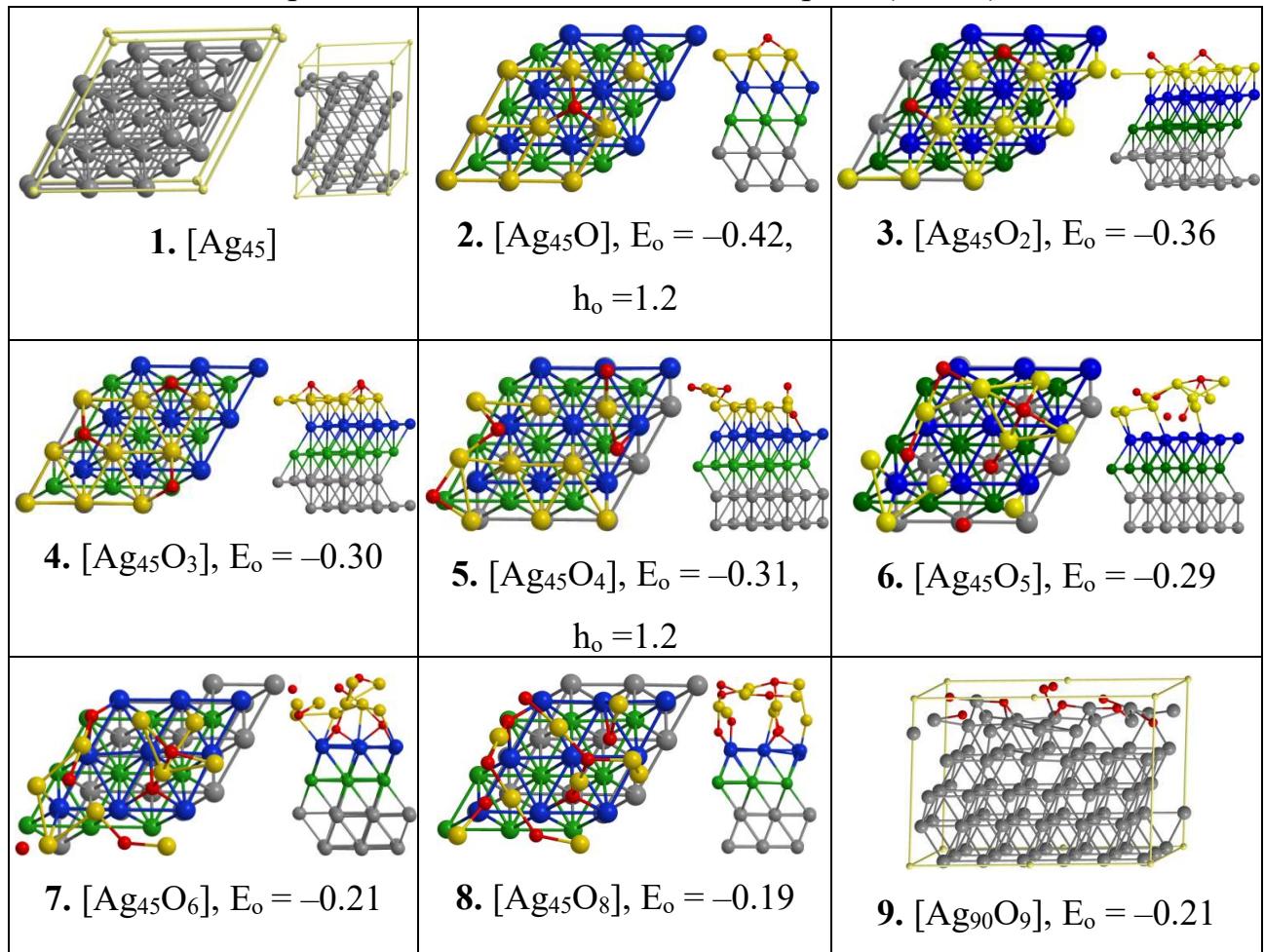
Известно, что серебро, формально не окисляясь на воздухе, содержит значительное количество кислорода, как на поверхности, так и в приповерхностном слое. Было обнаружено влияние этого кислорода на скорости электрохимических реакций с серебром, однако механизм воздействия на реакционную способность поверхности кристаллического серебра не был исследован. Можно только предполагать, что наличие кислородных атомов способно значительно увеличить количество адсорбированных (т.е. не встроенных в кристаллическую решетку) ионов серебра.

Из эксперимента ясно, что O_2 адсорбируется вначале в молекулярной форме, а затем при небольших покрытиях поверхности молекулы диссоциируют с образованием адсорбированных атомов. При этом атомы кислорода могут диффундировать в решетки переходных металлов в заметных количествах, вызывая различные макроскопические явления, такие как коррозия и охрупчивание. По мере увеличения покрытия кислородом наблюдается значительная адсорбционно-индукционная реконструкция поверхности вплоть до того, что верхний слой Ag изгибаются, образуя оксидоподобный слой со структурой O-Ag-O. Эти данные свидетельствуют о том, что O может играть важную роль в реакциях с участием Ag, однако детально этот процесс не исследовался. Наша работа посвящена моделированию процессов последовательного отрыва атомов серебра от поверхности кристалла и влиянию на этот процесс адсорбции кислорода.

Моделирование выполнено в рамках периодических граничных условий с использованием функционала РВЕ и базиса проектированных плоских волн (PAW) с пределами по энергии 400 и 600 эВ с помощью программного комплекса VASP.

В качестве модели поверхности серебра была выбрана пластина, соответствующая кристаллической поверхности $\text{Ag}(111)$, которая является для металлического серебра наиболее стабильной. Эта пластина имитировалась размножаемым 45-атомным фрагментом $[\text{Ag}_{45}]$ из пяти слоев, каждый из которых включает девять атомов серебра ($\text{Ag}_9 \times 5$, структура 1, табл. 1).

Таблица 1
Структуры кластеров $[\text{Ag}_n\text{O}_m]$ ($n = 45, 90$, $m = 1-18$), высота расположения атома кислорода над поверхностью атомов серебра (h_o , Å) и энергия адсорбции, приходящаяся на один атом кислорода (E_o , eV)



Расстояние между пластинами принималось равным 20 Å. На некоторых рисунках для наглядности девять атомов серебра поверхностного слоя окрашены желтым, атомы второго от поверхности слоя – синим, третьего – зеленым, четвертого и пятого слоев – серым цветом, красным цветом отмечены атомы кислорода. Повторяющиеся фрагменты, использованные для размножения, заключены в квадратные скобки.

Энергия адсорбции, приходящаяся на один атом кислорода E_o (средняя энергия связи), определяется относительно суммы энергий размножаемого фрагмента и соответствующего количества молекул кислорода:

$$E_o = \{E[\text{Ag}_n\text{O}_m] - E[\text{Ag}_{45}] - m(E(\text{O}_2)/2)\}/m,$$

где $E[Ag_{45}O_m]$ – энергия фрагмента кристалла с адсорбированными на нем m атомами кислорода, $E[Ag_{45}]$ и $E(O_2)$ – энергии фрагмента кристалла и молекулы кислорода, соответственно. Более низкому значению величины E_o соответствует более энергетически выгодная структура. Отрицательное значение E_o определяет наличие связи. Высота кислорода над поверхностным слоем обозначена буквой h_o , отрицательная величина ($-h_o$) соответствует глубине погружения под поверхность, высота над подповерхностным слоем обозначена штрихом (h_o').

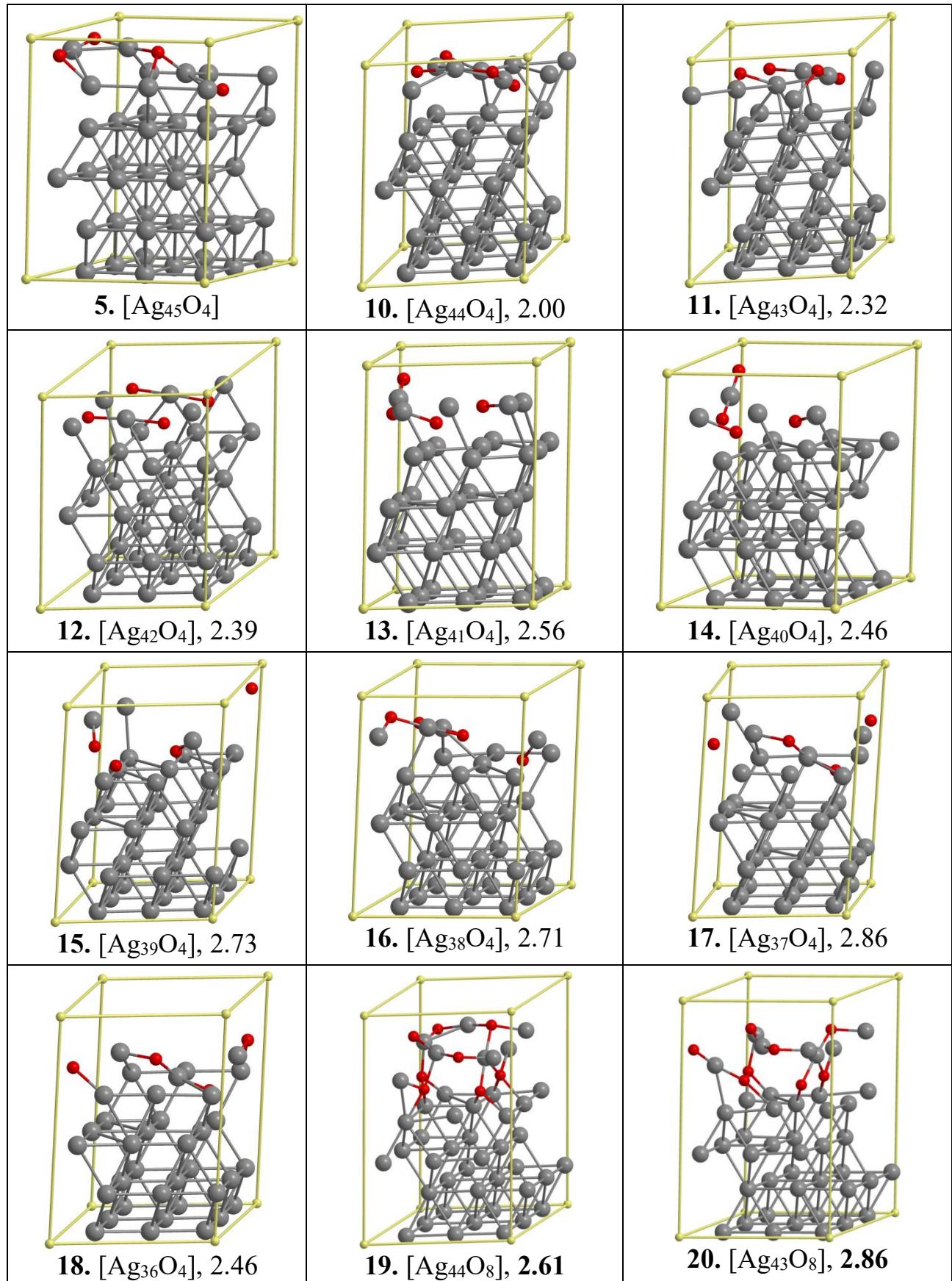
Адсорбция кислорода. Для адсорбции кислорода на поверхности имеется два типа лунок: глубокие (A) – над атомами из третьего от поверхности слоя атомов серебра и мелкие (B) – над атомами из второго от поверхности слоя (поверхностный слой считается первым). Энергетическая разница для положения атома кислорода в этих лунках ~ 0.1 эВ, а разделяющий их барьер – ~ 0.3 эВ (табл. 1-2).

В табл. 1 приведены наиболее стабильные изомеры, отвечающие указанному количеству адсорбированных атомов кислорода. На поверхности повторяющегося фрагмента $[Ag_{45}]$ (структура 1, 9 поверхностных атомов серебра) для 1-3 атомов кислорода наиболее низкой энергии на энергетической шкале отвечают изомеры, в которых эти атомы удалены на максимальное расстояние друг от друга (структуры 2-4, табл. 1). Положение О над поверхностью энергетически выгодно, деформация поверхности мала. Однако, начиная с адсорбции четырех атомов кислорода ($m/n_{Ag_s} \approx 1/2$), наиболее низко на энергетической шкале лежит изомер, в котором образуются два фрагмента, в которых атомы кислорода (расположенные под углом $O-Ag-O \sim 180^\circ$) поднимают атом серебра над слоем на ≈ 1.2 Å (структура 5, табл. 1). В структуре 6 ($[Ag_{45}O_5]$, $E_o = -0.29$ eV, $h' = 1.2$ Å) на поверхности будет по-прежнему три атома кислорода, а четвертый и пятый оказываются под поверхностью на высоте $h' = 1.2$ Å над подповерхностным слоем. Для шести адсорбированных атомов наименее энергии отвечает изомер со структурой 7 ($[Ag_{45}O_6]$, $E_o = -0.21$), в котором четыре атома расположены над поверхностью, а два – под поверхностью. Далее идет заполнение подповерхностного слоя (структура 8, $[Ag_{45}O_8]$, $E_o = -0.19$). Повторяющийся фрагмент $[Ag_{90}O_9]$ (структура 9, $E_o = -0.21$ eV) в качественном плане похож на фрагмент $[Ag_{45}O_4]$: два атома Ag подняты над поверхностью значительно (на 1.1 Å), еще два слабее (на 0.6 Å), и дополнительно сформировался один пероксидный фрагмент.

Отрыв атома Ag от поверхности. Из полученных результатов следует, что в нашем случае наиболее энергетически выгодным является покрытие поверхности при соотношении $m_O/n_{Ag_s} \approx 1/2$ (где m_O – количество атомов кислорода на поверхности, n_{Ag_s} – количество поверхностных атомов серебра), т.е. 4 атома О для используемого кластера. При этом наиболее низкую энергию имеет структура 5 (табл. 1) с двумя фрагментами O-Ag-O. Один из этих фрагментов расположен параллельно поверхности и поднят над ней на 1.2 Å (т.е. $h_o = h_{Ag_s} = 1.2$ Å), а второй наклонен к поверхности так, что один из атомов кислорода опускается и находится чуть ниже поверхностного слоя, $h_o \approx 0$. Å.

Таблица 2

Энергии последовательного отрыва атома Ag от поверхностного слоя ячейки $[Ag_{45}O_4]$ (ΔE , эВ) и образовавшиеся при этом структуры



Рассмотрим цепочку актов последовательного удаления атомов серебра из верхнего слоя структуры **5** (табл. 2). Удаление одного из поднявшихся над поверхностью атомов требует затрат энергии $\Delta E = 2.0$ эВ, что значительно меньше, чем в случае неокисленной поверхности ($\Delta E = 3.11$ эВ). В этом случае остается структура **10** ($[Ag_{44}O_4]$, табл. 2), где один фрагмент O-Ag-O сохраняется, а два атома O (из разрушенного фрагмента) опускаются под поверхность.

Для отрыва атома Ag из $[Ag_{44}O_4]$ потребуется затратить $\Delta E = 2.32$ эВ, в результате образуется структура **11** $[Ag_{43}O_4]$. Удаление Ag с ее поверхности ($\Delta E = 2.39$ эВ) приводит к формированию ячейки **12** $[Ag_{42}O_4]$. Отрыв Ag с поверхности $[Ag_{42}O_4]$ ($\Delta E = 2.56$ эВ) приводит к образованию структуры **13** $[Ag_{41}O_4]$. Дальнейшее последовательное удаление 5, 6, 7, 8, 9-го атомов серебра (структуры **14-18**) поверхностного слоя проходит с энергиями 2.46, 2.73, 2.71, 2.86, 2.46 эВ, соответственно, (табл. 2). При этом атомы кислорода постепенно опускаются на поверхность второго слоя кристалла, который по окончании описанного процесса становится первым. Таким образом, последовательный отрыв атома металла с поверхности тем труднее, чем большее количество атомов кислорода опускается к подповерхностному слою.

Еще труднее оторвать атом металла, когда подповерхностный слой заполнен атомами кислорода, например, в случае $[Ag_{45}O_8]$. Удаление поверхностного атома Ag от $[Ag_{45}O_8]$ ($\Delta E = 2.61$ эВ) ведет к образованию структуры **19** $[Ag_{44}O_8]$, а удаление Ag от $[Ag_{44}O_8]$ ($\Delta E = 2.86$ эВ) – к образованию структуры **20** $[Ag_{43}O_8]$. Тем не менее, все эти окисленные поверхности требуют затрат энергий для отрыва Ag значительно меньших, чем в случае не окисленной поверхности ($\Delta E = 3.11$ эВ).

Выводы. Анализ адсорбции кислорода на поверхность кристалла серебра показывает, что на поверхности существует много близких по энергии (в пределах 0.1 эВ) структур. Их разделяют низкие барьеры (в пределах 0.1-0.4 эВ). Наиболее энергетически выгодно соотношение кислорода и поверхностных атомов серебра 1:2. При этом для наиболее энергетически выгодной структуры **5** два атома Ag и три атома O подняты над поверхностью, четвертый атом O находится на уровне поверхности из вдвое большего количества атомов серебра. Переход кислорода из положения над поверхностью вглубь кристалла связан с преодолением барьера ~ 0.8 эВ.

Образование вакансии по серебру на окисленной поверхности легче, чем в случае неокисленной. При последовательном отрыве атомов серебра от этой поверхности соответствующие затраты энергии возрастают по мере уменьшения количества атомов металла и связей между ними в поверхностном слое, однако остаются существенно ниже энергии, необходимой для отрыва атома серебра от неокисленной поверхности. При полном удалении атомов Ag из верхнего слоя повторяется первоначальная структура поверхности. Таким образом, окисление поверхности серебра приводит к снижению энергии отрыва металла от нее.

Данная работа выполнена на ВЦ ФИЦПХФиМХ РАН в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования РФ, регистрационный номер 124013000692-4.

REMOVAL OF SILVER ATOMS FROM OXIDIZED Ag(111) SURFACE. QUANTUM CHEMICAL MODELLING

T.S. Zyubina¹, A.S. Zyubin¹, A.E. Ukshe¹, A.A. Glukhov¹, Yu.A. Dobrovolsky^{1,2}

¹Federal Research Center for Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry
of the Russian Academy of Sciences, Chernogolovka

²Hydrogen Energy Center, LLC (PJSC AFK Sistema), Chernogolovka

Abstract: in the approximation of periodic boundary conditions using the density functional PBE and the basis of projected plane waves PAW, the adsorption of oxygen atoms on the Ag(111) surface is simulated. The migration of oxygen atoms over the surface and in the bulk of the crystal and the effect of oxidation on the energy of detachment of silver atoms from the surface are considered. It is found that oxidation facilitates the removal of silver atoms from the surface, reducing the detachment energy from 3.11 eV (for the initial surface) to 1.95 - 2.86 eV (depending on the oxidation state).

Keywords: quantum chemical simulation, Ag(111) crystal surface, oxygen adsorption on the surface of a silver crystal.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ПОЛНОЙ ЭНЕРГИИ ПРИМЕСНОГО АТОМА ВОДОРОДА С ПОМОЩЬЮ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Д.И. Зюзин¹, А.В. Маркидонов²

¹Алтайский государственный технический университет
им. И. И. Ползунова, Барнаул

²Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского
государственного университета, Новокузнецк
denis.physic96@mail.ru

Аннотация: компьютерное моделирование является отличным инструментом для реализации любых теорий, идей. В настоящее время на одном уровне с реальным экспериментом в физике конденсировано состояния ученые стали применять методы компьютерного моделирования. С применением метода молекулярной динамики, проведено исследование влияния величины упругой деформации вдоль одной и двух осей на энергию примесного атома водорода и его расположения внутри октапор и тетрапор. Получаемые данные отображают картину, при которой при увеличении величины сжатия происходит увеличение полной энергии примесного атома водорода, а в случае с растяжением – значение полной энергии уменьшается.

Ключевые слова: молекулярная динамика, компьютерное моделирование, полная энергия, упругая деформация.

Введение

В настоящее время большая часть производимых исследований в физике конденсированного состояния с применением методов компьютерного моделирования происходит с применением метода молекулярной динамики. Этот метод описывает эволюцию системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения. Большая часть молекулярно-динамических расчетов выполнены с использованием классической механики Ньютона. Впрочем, существуют работы, в которых этот метод комбинируется с решением уравнений квантовой механики Шредингера [1].

Среди всех возможных методов исследований – метод молекулярной динамики можно считать одним из самых мощных вычислительных и расчетных методов компьютерного моделирования, что позволяет эффективно применять его для большого количества процессов и систем. С помощью данного метода с высокой точностью в рамках заданной модели возможно учитывать и контролировать параметры анализируемого явления, исследовать процессы в динамике, протекающие на атомном уровне с помощью различных визуализаторов [2-4].

Метод молекулярной динамики способен вычислять траектории отдельных атомов или скоплений атомов, динамику взаимодействия различных частиц, в том числе в конденсированных средах на молекулярном уровне.

Основой метода молекулярной динамики являются материальные точки, ведь суть метода заключается в том, что времененная эволюция системы взаимодействующих частиц отслеживается с помощью интегрирования уравнения их движения, что описывается в свою очередь законом Ньютона.

Вне зависимости от того, в что настоящее время существуют и успешно применяются в исследованиях методы электронной и атомно-силовой микроскопии, благодаря которой возможно исследовать атомную структуру веществ, ее динамику, метод компьютерного моделирования перекрывает многие задачи, неподвластные реальному эксперименту. В первую очередь это касается быстро-протекающих процессов с выделением большого количества энергии и длительных по времени процессов.

Поэтому, стоит сказать, что весомая часть исследований производится с применением методов компьютерного моделирования, основываясь на методе молекулярной динамики. Метод молекулярной динамики может рассчитывать любые свойства системы:

1. Термодинамические – энергию, давление и энтропию.
2. Кинетические – коэффициенты диффузии, частоты колебаний атомов.

Стоит упомянуть, что идея, лежащая в основе любого подхода к молекулярному моделированию, проста: подготовить реалистичную молекулярную модель интересующей системы и дать ей развиваться с течением времени.

Если описать кратко суть метода молекулярной динамики, то он сводится к следующему:

1. Задаются исходные координаты частиц в соответствии с кристаллической структурой исследуемого вещества, его плотностью и температурой.
2. Рассчитывается движение некоторого числа частиц исследуемого вещества под действием прикладываемых сил.
3. Определяются макроскопические характеристики состояния вещества.

Настоящая работа нацелена на исследование влияния величины упругой деформации вдоль одной и двух осей на энергию примесного атома водорода и его расположения внутри октапор и тетрапор интерметаллида Ni₃Al с помощью метода компьютерного моделирования

Результаты и обсуждение

Суть производимого исследования – анализ взаимодействия примесных атомов с металлами, а также их поведение внутри материалов, так как это давно являются объектом исследований в материаловедении.

Водород, располагающийся внутри металла, сплава или на его поверхности определяется как примесный или внутренний водород. Он вводится в металлы и сплавы в процессе изготовления материала [5].

Водород, находясь в металлах и сплавах, оказывает большое влияние на их свойства, вызывая водородное охрупчивание. В процессе воздействия на металл механических напряжений, атомы водорода перемещаются по решетке, создавая локальные сгущения примеси. Данное поведение водорода способно создавать флуктуации физико-механических и химических характеристик металлов, приводя к определённой потере механических, антикоррозионных и др. свойств. Важную роль подвижности водорода играет водородная хрупкость металлов. Водород не оказывает значительного влияния на предел прочности при растяжении,

но предел прочности зависит от значения пластичности материала, который, в свою очередь значительно снижается при процессе наводороживания.

Процесс водородного охрупчивания связан с потерей пластичности металла и/или добавления ему хрупкости из-за внедрения в него водорода. Даже небольшое количество водорода способно привести к охрупчиванию металлов [6, 7]. В настоящий момент существует большое количество исследований, касающихся механизмов водородного охрупчивания, в том числе исследования на чистом никеле [8] и некоторых сталях [9].

Настоящая работа посвящена исследованию с применением компьютерного моделирования и метода молекулярной динамики влияния упругой деформации кристаллической решетки ГЦК – интерметаллида Ni_3Al .

В рассматриваемой экспериментальной ячейке воспроизводилось расположение примесного атома как в работах [10-12], где производилось исследование влияния различных величин упругой деформации ГЦК решетки при присутствии примесного атома.

Основная часть исследования – помещение примесного атома водорода в октаэдрическую и тетраэдрической поры в ГЦК решетке (рис. 1).

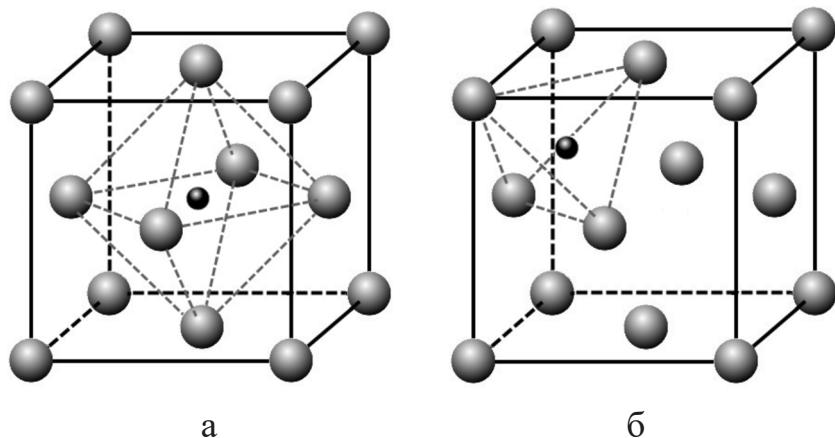


Рис. 1. Расположение примесного атома (выделен черным цветом) в октаэдрической (а) и тетраэдрической (б) порах в ГЦК решетке

После введения примесного атома в поры производилась деформация расчетной ячейки вдоль одной из осей. Конечным действием производилась динамическая релаксация с постепенным охлаждением до 0° К. Полученные результаты по деформации вдоль всех трех осей приведены в табл. 1 и на рис. 2.

Упругая деформация расчетной ячейки задавалась с помощью изменения межатомных расстояний вдоль осей. Рассматриваемая, деформация варьировалась от сжатия (максимальная величина достигала -3%) до растяжения (максимальная величина деформации составляла $+3\%$).

Вторым этапом исследования было оценка влияния двухосной упругой деформации решетки при присутствии примесного атома. Результаты данных работ приведены в табл. 2 и на рис. 3.

Таблица 1
Энергия примесного атома в октаэдрической тетраэдрической порах
при одноосной деформации

%	Деформация вдоль осей						
	Еполн, эВ						
	X		Y		Z		
октапора	тетрапора	октапора	тетрапора	октапора	тетрапора		
-3	13,0	14,1	13,0	14,2	12,7	14,1	
-2	12,6	13,7	12,6	13,7	12,4	13,7	
-1	12,2	13,3	12,2	13,3	12,1	13,3	
0	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	
+1	11,5	11,8	11,5	11,8	5,9	11,8	
+2	11,1	12,2	11,1	12,1	6,3	12,2	
+3	10,8	12,5	10,8	12,5	11,1	12,5	

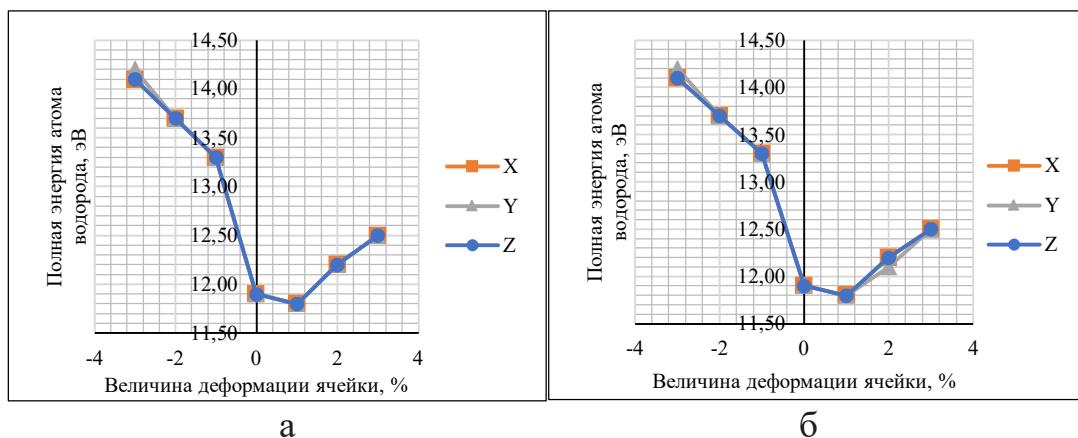


Рис. 2. График зависимости полной энергии примесного атома в октаэдрической (а) и тетраэдрической (б) пора от величины одноосной деформации расчетной ячейки

Таблица 2
Энергия примесного атома в октаэдрической тетраэдрической порах
при двухосной деформации

%	Деформация вдоль осей						
	Еполн, эВ						
	XY		XZ		YZ		
октапора	тетрапора	октапора	тетрапора	октапора	тетрапора		
-3	14,3	15,5	14,0	15,4	14,0	15,5	
-2	13,4	14,6	13,2	14,5	13,2	14,6	
-1	12,6	13,7	12,5	13,7	12,5	13,7	
0	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	
+1	11,1	10,8	11,2	10,9	11,2	10,8	
+2	10,5	11,4	10,6	11,5	10,6	11,5	
+3	9,9	12,1	10,1	12,5	10,1	12,2	

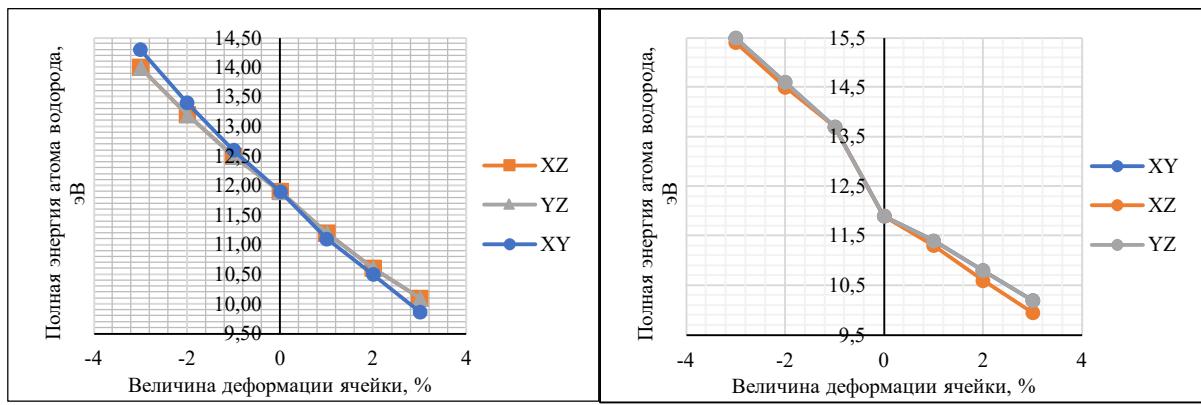


Рис. 3. График зависимости полной энергии примесного атома в октаэдрической (1) и тетраэдрической (2) порах от величины двухосной деформации расчетной ячейки

Согласно полученным результатам исследования, можно отметить, что увеличение энергии примесного атома водорода происходит при снижении величины сжатия и повышении величины удлинения расчетного образца. При оценке результатов влияния расположения примесного атома в тетраэдрической и октаэдрической порах заметны различия в получаемых значениях полной энергии, как при одноосной деформации, так и при двухосной деформации.

Заключение

Можно сделать выводы о нескольких преимуществах компьютерного моделирования над реальным экспериментом:

1. Проведение исследований и рассмотрения вопроса о возможном существовании новых материалов, которые в настоящем эксперименте сложно или невозможно получить.
2. Упрощает объяснение экспериментальных результатов. Благодаря моделированию возможно проводить оценку разных факторов и их сочетаний, после чего соотнести с теоретическими или экспериментальными данными
3. Моделирование материалов с необходимыми для эксперимента свойствами.

Поэтому возможно сделать вывод, что компьютерное моделирование помогает проводить исследования существующих гипотез и разрабатывать новые теории.

С применением метода молекулярной динамики проведено исследование влияния упругой деформации вдоль одной и двух осей на величину полной энергии примесного атома водорода (H), располагающегося в тетраэдрической и октаэдрической порах интерметаллида Ni₃Al.

Для рассматриваемой модели были произведены ряд экспериментов прикладывания упругой деформации в диапазоне от -3% (упругое сжатие) до +3% (упругое растяжение) вдоль одной и вдоль двух осей одновременно. Также два главных отличающихся факторов, оказывающих влияние на эксперимент, было расположение примесного атома – в тетраэдрической и октаэдрической порах. Полученные результаты показывают, как влияет величина и направление

деформации на получаемую энергию атома, а также зависимость энергии от расположения атома внутри расчетной ячейки.

Литература

1. Малинецкий Г.Г. Новое в синергетике. Взгляд в третье тысячелетие / Г.Г. Малинецкий, С.П. Курдюмов. М.: Наука, 2002. – 478 с.
2. Bachurin D.V. Atomistic simulation of the deformation of nanocrystalline palladium: The effect of voids / D.V. Bachurin, P. Gumbsch // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2014. – Vol. 22, No. 2. – P. 025011.
3. Molecular dynamics simulation of the effect of dislocations on the martensitic transformations in a two-dimensional model / S.V. Dmitriev, M.P. Kashchenko, Ju.A. Baimova [et al.] // Letters on Materials. – 2017. – Vol. 7, No. 4(28). – P. 442-446.
4. Murzaev R.T. Drift of dislocation triples under ultrasound influence / R.T. Murzaev, D.V. Bachurin, A.A. Nazarov // Ultrasonics. – 2016. – V. 64. – P. 77-82.
5. Umeda H., G. Itoh and Y. Kato: Effect of heat treatment condition on the hydrogen content in Al-4%Mg alloys J. JILM 56, 2006, Volume 56, Issue 4, Pages 203-209.
6. Nagumo, M. Function of hydrogen in embrittlement of high-strength steels / M. Nagumo // ISIJ International. – 2001. – Vol. 41, No. 6. – P. 590-598.
7. Neeraj T., Srinivasan R., Li J., Hydrogen embrittlement of ferritic steels: observations on deformation microstructure, nanoscale dimples and failure by nanovoiding, Acta Mater, 2012, V 60 p 5160-5171.
8. Martin M.L., Somerday B.P., Ritchie R.O., Sofronis P. and Robertson I.M. Hydrogen-induced intergranular failure in nickel revisited Acta Materialia, 2012, V 60, p 2739-2745
9. Martin M.L., Fenske J.A., Liu G.S., Sofronis P., Robertson I.M., On the formation and nature of quasi-cleavage fracture surfaces in hydrogen embrittled steels, Acta Mater, 2011, V 59.
10. Зоря И. В. Энергия связи и миграции примесных атомов углерода, азота и кислорода в кристаллических решетках никеля, серебра и алюминия / И. В. Зоря, Г. М. Полетаев, М. Д. Старостенков // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2019. – Т. 16, № 3. – С. 291-297. – DOI 10.25712/ASTU.1811-1416.2019.03.001. – EDN UHKWKM.
11. Зоря И.В. Влияние упругой деформации кристаллической решетки ГЦК металлов на энергию связи и миграции примесных атомов легких элементов / И.В. Зоря, Г.М. Полетаев // Химическая физика и мезоскопия. – 2019. – Т. 21, № 1. – С. 135-141. – DOI 10.15350/17270529.2019.1.17. – EDN MJQMBH.
12. Емелин Д.А. Молекулярно-динамическое моделирование влияния двухосных деформаций на растворимость водорода в ОЦК-железе с использованием ЕАМ-потенциалов / Д.А. Емелин, А.А. Мирзоев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Металлургия. – 2016. – Т. 16, № 2. – С. 40-45. – DOI 10.14529/met160206. – EDN WBOWHX.

INVESTIGATION OF THE DEPENDENCE OF THE TOTAL ENERGY OF AN IMPURITY HYDROGEN ATOM USING COMPUTER MODELING

D.I. Zyuzin¹, A.V. Markidonov²

¹Altai State Technical University named after I. I. Polzunov, Barnaul

²Kuzbassky Humanitarian Pedagogical Institute of Kemerovo State University, Novokuznetsk

Abstract: computer modeling is an excellent tool for the implementation of any theories and ideas. Currently, at the same level as a real experiment in condensed matter physics, scientists have begun to apply computer modeling methods. Using the method of molecular dynamics, the influence of the magnitude of elastic deformation along one and two axes on the energy of an impurity hydrogen atom and its location inside octapores and tetrapores was studied. The obtained data show a picture in which, with an increase in the amount of compression, the total energy of the adjacent hydrogen atom increases, and in the case of stretching – the value of the total energy decreases.

Keywords: molecular dynamics, computer simulation, total energy, elastic deformation.

ОЦЕНКА ПОЛЯРИЗОВАННОСТИ ПОЛИМЕРОВ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В НЕОДНОРОДНОМ ТЕМПЕРАТУРНОМ ПОЛЕ

Н.С. Камалова, Н.Н. Матвеев, В.И. Лисицын, Н.Ю. Евсикова

Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г.Ф. Морозова
rc@icmail.ru

Аннотация: в докладе предложен наиболее вероятный механизм изменения надмолекулярной структуры полимера в процессе кристаллизации в неоднородном температурном поле. В рамках классической термодинамики получено аналитическое выражение для оценки поляризованности кристаллизующегося полимерного пироэлектрика. Продемонстрированы возможности применения физико-математического моделирования к описанию частично самоорганизующихся структур.

Ключевые слова: фазовые переходы в полимерах, поляризованность высокомолекулярных соединений, неоднородное температурное поле, кинетика надмолекулярной структуры.

Полимерные пироэлектрики применяются для преобразования тепловых сигналов в электрические. В настоящий момент они широко используются в измерительной цифровой аппаратуре при решении таких задач, как организация проведения аэросъемки пожаров (в частности, подземных) [1-3]. Сравнительно недавно была рассмотрена возможность использования этих материалов (например, пленок поликарилонитрила) для прямой трансформации энергии солнечного излучения в электрическую. Область их использования в современных технологиях неуклонно расширяется, особенно в цифровой электронике [3-5]. Поэтому исследование механизмов поляризации высокомолекулярных пироэлектриков в условиях неоднородного температурного поля является перспективной фундаментальной задачей.

Сложность проблемы состоит в том, что в отличие от металлов, в которых центры кристаллизации формируются при охлаждении расплава до температуры затвердевания и представляют собой группы атомов, макромолекулы полимера образуют цепи. Кристаллизация полимера является специфичным кооперативным процессом, кинетика которого усложняется тем, что отдельные звенья (фрагменты) длинных цепных молекул не могут перемещаться независимо. Например, полимерный кристалл наряду с характерными для металлов дефектами структуры (пустоты и примеси) содержит только ему присущие дефекты, вызванные непосредственно в процессе формирования конформациями молекул (разветвления макромолекулярных цепей, возникающие при их складывании, «неправильности» и т.п) [5]. При достаточно высокой скорости кристаллизации и сравнительно небольшой концентрации зародышей в структуре полимера из ламелей формируются сферически симметричные образования (сферолиты), которые в результате радиального роста приобретают вид много-

гранников. В зависимости от степени гомогенности центров ламели комплектуются в сферолиты с вытянутыми (КВЦ) или сложенными (КСЦ) цепями макромолекул, характеризующиеся разной энергией [5, 6]. Поэтому в полимере в одном образце одновременно присутствуют обе эти топологии сферолитов (топоморфизм). Кроме того, кристаллизация полимера осуществляется частично, что подтверждается результатами рентгенографии закристаллизованных полимеров (на рентгенограммах наблюдается характерное для аморфных образований диффузное гало). Плотность ρ образца после кристаллизации всегда лежит в интервале $\rho_k < \rho < \rho_a$, где ρ_k и ρ_a – плотности полностью кристаллического и чисто аморфного полимеров соответственно [5, 6]. В отличие от моно-кристаллов плавление закристаллизованных образцов полимеров происходит в достаточно широком интервале температур ΔT_k , на величину которого влияют внешние условия и специфика процесса кинетики надмолекулярной структуры. Результаты экспериментов позволяют достаточно обоснованно предположить, что не существует температуры, при которой аморфная и кристаллическая фазы полимера находились бы в равновесии [5, 6]. Таким образом, фазовые переходы в высокомолекулярных соединениях имеют следующие характерные особенности:

- 1) в механизме кристаллизации полимеров большое влияние на форму и дефекты ламелей оказывают процессы их самоорганизации (изгиб, закручивание и разветвление) при увеличении скорости изменения температуры;
- 2) в закристаллизованном состоянии всегда присутствуют и аморфная, и кристаллическая (содержащая сферолиты с вытянутыми (КВЦ) или сложенными (КСЦ) цепями макромолекул) составляющие;
- 3) аморфная и кристаллическая компоненты не находятся в равновесном состоянии, и степень кристалличности полимеров при различных температурах может быть разной.

Поэтому моделирование кинетики и динамики формирования кристаллических структур в полимерах не приводит к однозначному результату (с некоторыми дефектами, обусловленными наличием в расплаве примесей и т.д.), а во многом определяется внутренними процессами, природа которых уникальна для каждого образца и условий проведения эксперимента.

Целью данной работы является теоретическое обоснование механизма поляризации полимеров при кристаллизации из расплава в неоднородном температурном поле в рамках классической термодинамики с учетом неоднозначности кинетики исследуемого процесса.

Поскольку информации о динамике изменений микроструктуры полимера в образце в процессе кристаллизации недостаточно для формирования ее модельного отображения, то в рамках общего подхода классической термодинамики ее устойчивое (стационарное) состояние соответствует минимуму функций Гиббса (G) и Гельмгольца (F). Поэтому для бесконечно тонкого слоя полимера толщиной h запишем [7]:

$$dF = dU - T_k dS = 0 \quad \text{и} \quad dG = dU - T_k dS - dTS + m \left(\frac{dP}{\rho} - P \frac{d\rho}{\rho^2} \right) = 0, \quad (1)$$

где dU – изменение внутренней энергии образца за время кристаллизации; T_k – температура кристаллизации; S – энтропия; m – масса образца; T и P – температура и давление текущего состояния (вместо объема используется его определение через массу и плотность). Из первого равенства в (1) следует, что

$$dU = T_k dS = \delta Q = \lambda \sigma \frac{dT}{h} \tau, \quad (2)$$

где λ и σ – теплопроводность и площадь исследуемого образца; τ – длительность процесса кристаллизации. Второе равенство в (1) с учетом малости изменения объема V в установившемся состоянии матрицы ($dV = |md\rho/\rho^2| \approx 0$) преобразуется к виду:

$$m \frac{dP}{\rho} - dTS = 0. \quad (3)$$

Физически это означает, что в полимере в условиях кристаллизации в неоднородном температурном поле, в силу невозможности равновесного состояния между аморфной и кристаллической фазами полимера, происходит формирование потенциала силы давления $\frac{dP}{\rho}$, во многом определяемого энтропией состояний его макромолекул. Из (3) получаем

$$S = \chi \frac{m}{\rho}, \quad (4)$$

где $\chi = dP/dT$ определяется отношением дифференциалов давления и температуры непосредственно в образце в данный момент времени. Предположим, что коэффициент χ не зависит от плотности. Тогда зависимость изменения энтропии от плотности будет иметь вид:

$$dS = \chi \frac{m}{\rho} \frac{d\rho}{\rho} = \chi \sigma h (1 + \beta_T \Delta T) \frac{d\rho}{\rho}, \quad (5)$$

где β_T – коэффициент температурного расширения полимера; ΔT определяется величиной градиента неоднородного температурного поля ∇T .

Плотность полимера будет характеризоваться текущим неустойчивым равновесием кристаллической и аморфной фаз в образце. Поэтому будем моделировать ее как

$$\rho = \frac{\langle M \rangle}{N_A} (n + (n_0 - n)) = n_0 (1 - C_k) \left(1 + \frac{n}{n_0 - n}\right) \frac{\langle M \rangle}{N_A} \approx \frac{\langle M \rangle}{N_A} n_0 (1 - C_k) \frac{n}{n_0 - n}, \quad (6)$$

где $\langle M \rangle$ – средняя молекулярная масса полимера; N_A – число Авогадро, n_0 – число макромолекул в единице объема; n – текущее число сферолитов в единице объема; C_k – степень кристалличности полимера. В (6) учтено, что в процес-

се кристаллизации кристаллическая составляющая в исследуемом интервале температур ΔT_k превалирует над аморфной ($n \gg n_0 - n$). С учетом (6) соотношение (5) перепишется в виде:

$$dS = \chi\sigma h(1 + \beta_T \Delta T) \frac{dn}{n(1 - \mu n)} \quad (7)$$

где $\mu = 1/n_0$. Из (2) получаем

$$dS = \frac{\delta Q}{T_k} = \lambda\sigma \frac{dT}{T_k h} \tau. \quad (8)$$

Из (7) с учетом (8) следует, что

$$\frac{dn}{n(1 - \mu n)} = \frac{\lambda\sigma\Delta T}{\chi\sigma h(1 + \beta_T \Delta T)T_k} dT, \quad (9)$$

После введения обозначения

$$\alpha = \frac{\lambda\sigma\Delta T}{\chi\sigma h(1 + \beta_T \Delta T)T_k} \quad (10)$$

соотношение (9) преобразуется в дифференциальное уравнение первого порядка, аналитическое решение которого при условии, что число сферолитов $n = n^*$ при температуре $T_0 = T_k + \Delta T_k$, можно записать как

$$n = \frac{n^* \exp(\alpha(T - T_0))}{1 + \mu n^* (\exp(\alpha(T - T_0)) - 1)}. \quad (11)$$

Параметр α характеризует относительное изменение надмолекулярной структуры полимера при изменении его температуры на один кельвин в исследуемое время процесса кристаллизации.

Кристаллы полимеров, как и полярные кристаллы определенной симметрии, оказываются поляризованными в отсутствие внешнего электрического поля [5, 6]. Такое состояние принято характеризовать спонтанной поляризованностью P_c , которая в данной ситуации не равна нулю ($P_c \neq 0$). Для сравнительно небольших интервалов температуры ΔT ее изменение можно определить как

$$P_c = p_n \Delta T, \quad (12)$$

где p_n – пироэлектрический коэффициент, являющийся в рассматриваемых материалах суммой коэффициентов первичного p_1 и вторичного p_2 пироэлектрических эффектов, экспериментальное разделение которых весьма затруднительно. Учет в модели особенностей конформаций сферолитов приводит к более комплексному подходу к оценке p_n [5, 6]. Для оценки уровня спонтанной поляризованности запишем выражение:

$$P_c = n p_{\Pi}, \quad (13)$$

где $p_{\Pi} = \sqrt{\langle p_{\Pi}^2 \rangle}$ – квадратный корень из усредненного квадрата дипольного момента макромолекулы полимера с учетом ее возможных конформаций.

Учитывая (11), соотношение (13) преобразуем к виду:

$$P_c = \frac{p_{II} n^* \exp(\alpha(T - T_0))}{1 + \mu n^* (\exp(\alpha(T - T_0)) - 1)}. \quad (14)$$

Из (14) следует, что максимальная величина $P_{max} = p_{II} / \mu = p_{II} n_0$ будет определяться параметрами, которые зависят от особенностей кинетики надмолекулярной структуры образца в процессе кристаллизации, а температурный интервал ΔT_k можно оценить как

$$\Delta T_k = \frac{2}{\alpha} \ln\left(\frac{1 - \mu n^*}{\mu n^*}\right). \quad (15)$$

На рис. 1 показаны типичные зависимости поляризованности от температуры при охлаждении (нагревании) образцов полидиметилсилоксана (ПДМС) со скоростью $\beta = (0,05 \pm 0,01)$ К/с в неоднородном температурном поле, которые были рассчитаны по экспериментальным измерениям плотностей токов поляризации и деполяризации $j(T)$. Величина градиента температуры варьировалась в пределах $(1,2 \dots 7,7) \cdot 10^4$ К/м. Оценка поляризованности P_c при фиксированной температуре T определялась численным интегрированием соответствующего участка зависимости $j(T)$ (рис. 2) [5]:

$$P(T') = \frac{1}{\beta} \int_{T'}^{\infty} j(T) dT. \quad (15)$$

Интеграл в соотношении (15) рассчитывался с помощью рекуррентного соотношения:

$$P(T_i) = P(T_{i-1}) + \frac{j(T_{i-1}) + j(T_i)}{2} (T_i - T_{i-1}),$$

в котором начальные значения $P(T_0), j(T_0)$ выбирались эмпирически.

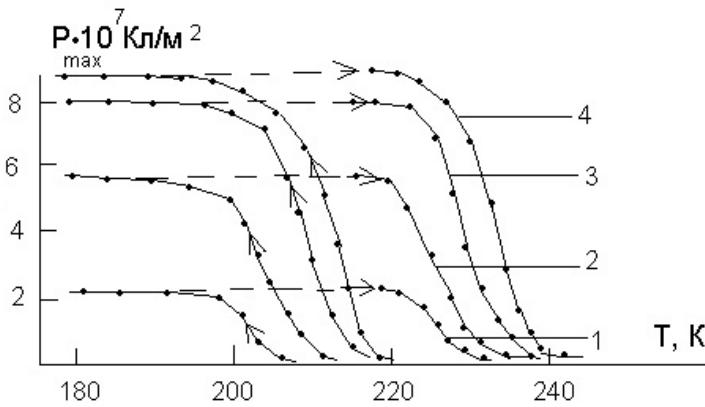


Рис. 1. Температурные зависимости поляризованности ПДМС в области фазовых переходов I рода для величин градиента ∇T :

1 – $1,2 \cdot 10^4$ К/м; 2 – $3,8 \cdot 10^4$ К/м;
3 – $6,5 \cdot 10^4$ К/м; 4 – $7,7 \cdot 10^4$ К/м

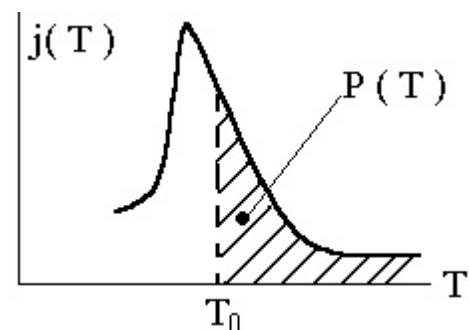


Рис. 2. Оценка величины P_c по участку зависимости $j(T)$ [5]

Характер зависимостей $P_c(T)$ совпадает с полученным соотношением (14). Величина P_{max} существенно возрастает с увеличением градиента неоднородного

температурного поля, что качественно подтверждает адекватность предложенных подходов. Из соотношения (15) на основе экспериментальных данных температурной зависимости токов деполяризации $j(T)$ можно рассчитать не только $P_c(T)$, но и оценить параметр α в приближении $\mu n^* \ll 1$.

Таким образом, в рамках классического термодинамического подхода удалось получить модельное соотношение для оценки спонтанной поляризованности полимера, возникающей в процессе кристаллизации в неоднородном температурном поле.

Литература

1. Синтез и термические свойства полидиметилсилоксанов, модифицированных децильными и метилундекиленатными заместителями / Т.А. Пряхина, Д.И. Шрагин, Т.В. Стрелкова, В.М. Котов, М.И. Бузин, Н.В. Демченко, А.М. Музрафов // Известия Академии Наук. Серия химическая. – 2014. – № 6. – С. 1416-1422.
2. Соболевский, М.В. Свойства и области применения кремнийорганических продуктов / М.В. Соболевский, О.А. Музовская, Г.С. Попелева. – Москва: Химия, 1975. – 296 с.
3. Linear and hyperbranched liquid crystalline polysiloxanes / T. Ganicz, T. Pakula, W. Fortuniak, E. Białcka-Florjańczyk // Polymer. – 2005. – Vol. 46, Iss. 25. – P. 11380-11388.
4. Влияние структурных неоднородностей на формирование пироэлектрической фазы в полимерах / Н.Н. Матвеев, О. Farberovich, Н.С. Камалова, Н.Ю. Евсикова // Физика твердого тела. – 2015. – Т. 57, №. 6. – С. 1131-1133.
5. Матвеев, Н.Н. Поляризационные явления в кристаллизующихся полимерах и биокомпозиционных материалах в неоднородном температурном поле / Н.Н. Матвеев, Н.С. Камалова, Н.Ю. Евсикова. – Воронеж: М-во науки и высшего образования РФ. ФГБОУ ВО «ВГЛТУ», 2022. – 311 с.
6. Влияние конформаций гибкоцепных полимеров на изменение поляризованности в неоднородном температурном поле / Н.Н. Матвеев, В.И. Лисицын, В.В. Саушкин, Н.С. Камалова // Пластические массы. – 2021. – № 1-2. – С. 44-45.
7. К вопросу о термодинамике процесса поляризации древесины в неоднородном температурном поле / Н.Н. Матвеев, Н.С. Камалова Н.Ю. Евсикова, В.И. Лисицын, Ю.В. Крутских, А.М. Хворых // Физические основы научно-исследований: Материалы Всероссийской научно-методической конференции, Воронеж, 17 апреля 2024 года. – Воронеж: Воронежский государственный лесотехнический университет им. Г.Ф. Морозова, 2024. – С. 10-17.

ESTIMATION OF POLYMERS POLARIZATION DURING CRYSTALLIZATION IN NON-UNIFORM TEMPERATURE FIELD

N.S. Kamalova, N.N. Matveev, V.I. Lisitsyn, N.Yu. Evsikova

Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G.F. Morozov

Abstract: the report proposes the most probable mechanism for changing the supramolecular structure of a polymer during crystallization in a non-uniform temperature field. Within the framework of classical thermodynamics, an analytical expression is obtained for estimating the polarization of a crystallizing polymer pyroelectric. The possibilities of applying physical and mathematical modeling to the description of partially self-organizing structures are demonstrated.

Keywords: phase transitions in polymers, polarization of high-molecular compounds, non-uniform temperature field, kinetics of supramolecular structure.

ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ РАЗВЕТВЛЕННЫХ ФТОРАЛКАНОВ

А.В. Котомкин, Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет
prospectpobedy@mail.ru

Аннотация: создание корреляционной модели «строение-свойство» для фторалканов требует расширения базы значений ΔH_f^0 для формирования обучающего множества. В работе рассчитаны энталпии образования фторзамещенных изобутана $C_4H_mF_k$, где $0 \leq m \leq 9$, $k = 10 - m$ и неопентана $C_5H_mF_k$, $0 \leq m \leq 11$, $k = 12 - m$.

Ключевые слова: термодинамические свойства, энталпия образования, фторалканы, изобутан, неопентан.

Органические соединения фтора широко применяются в промышленности, на их основе производят фреоны, тефлоны, термо- и химически стойкие материалы, материалы для медицины и т.д. В то же время для этих веществ недостаточно экспериментальных данных по термодинамическим характеристикам, важнейшей из которых является стандартная энталпия образования из простых веществ ΔH_f^0 . Так, в [1] имеются значения ΔH_f^0 только для 14 соответствующих соединений. В [2] методом G-4 найдены значения энталпий образования для молекул фторпропанов и фторэтанов, в [3] для фторбутанов. Недостаток реперных значений ΔH_f^0 и сильное индуктивное влияние атомов фтора [4] являются основными трудностями для построения надежной корреляционной модели «строение-свойство».

Целью данной работы является поиск энталпий образования фторзамещенных изобутана $C_4H_mF_k$, где $0 \leq m \leq 9$, $k = 10 - m$ и неопентана $C_5H_mF_k$, $0 \leq m \leq 11$, $k = 12 - m$.

Для расчета энталпии образования ΔH_f^0 молекул использовалось соотношение:

$$\Delta H_f^0(M) = H(M) - [\sum H(A) - \sum \Delta H_f^0(A)], \quad (1)$$

где $H(A)$ и $H(M)$ – соответственно энталпии атомов A составляющих соединение M и энталпии соединения, $\Delta H_f^0(A)$ – энталпия образования атомов. Значения $H(A)$ и $H(M)$ были получены методом G-4 [5]. Значения $\Delta H_f^0(A)$ взяты из [1]: $\Delta H_f^0(F) = 79,34$ кДж/моль, $\Delta H_f^0(H) = 218$ кДж/моль, $\Delta H_f^0(C) = 716,67$ кДж/моль. Все рассчитанные в работе величины ΔH_f^0 приведены в табл. 1 и 2.

Рассчитанные значения энталпий образования ΔH_f^0
фторзамещенных изобутана, в кДж/моль

Таблица 1

Молекула	ΔH_f^0	Молекула	ΔH_f^0
$(CH_3)_2-(CH)-(CH_2F)$	-321,6	$(CH_3)_2-(CF)-CH_2F$	-533,5
$(CH_3)-(CH)-(CH_2F)_2$	-504,6	$(CH_3)-(CF)-(CH_2F)_2$	-706,9
$(CH_3)_2-(CH)-(CHF_2)$	-551,7	$(CH_3)_2-(CF)-(CHF_2)$	-751,2
$(CH_2F)_3-(CH)$	-684,1	$(CH_2F)_3-(CF)$	-877,8
$(CH_3)-(CH)-(CHF_2)(CH_2F)$	-730,5	$(CH_3)-(CF)-(CHF_2)(CH_2F)$	-926,8
$(CH_3)_2-(CH)-(CF_3)$	-801,6	$(CH_3)_2-(CF)-(CF_3)$	-999,1
$(CHF_2)-(CH)-(CH_2F)_2$	-898,4	$(CHF_2)-(CF)-(CH_2F)_2$	-1080,6
$(CH_3)-(CH)-(CH_2F)(CF_3)$	-977,9	$(CH_3)-(CF)-(CH_2F)(CF_3)$	-1165,9
$(CH_3)-(CH)-(CHF_2)_2$	-947,3	$(CH_3)-(CF)-(CHF_2)_2$	-1125,3
$(CH_3)-(CH)-(CHF_2)(CF_3)$	-1196,2	$(CH_3)-(CF)-(CHF_2)(CF_3)$	-1372,5
$(CHF_2)_2-(CH)-(CH_2F)$	-1111,0	$(CHF_2)_2-(CF)-(CH_2F)$	-1281,2
$(CH_2F)_2-(CH)-(CF_3)$	-1147,3	$(CH_2F)_2-(CF)-(CF_3)$	-1325,2
$(CHF_2)_3-(CH)$	-1324,6	$(CHF_2)_3-(CF)$	-1479,7
$(CH_3)-(CH)-(CF_3)_2$	-1435,7	$(CH_3)-(CF)-(CF_3)_2$	-1609,1
$(CH_2F)(CHF_2)-(CH)-(CF_3)$	-1359,5	$(CH_2F)(CHF_2)-(CF)-(CF_3)$	-1526,9
$(CHF_2)_2-(CH)-(CF_3)$	-1569,9	$(CHF_2)_2-(CF)-(CF_3)$	-1724,6
$(CH_2F)-(CH)-(CF_3)_2$	-1597,6	$(CH_2F)-(CF)-(CF_3)_2$	-1763,2
$(CHF_2)-(CH)-(CF_3)_2$	-1808,3	$(CHF_2)-(CF)-(CF_3)_2$	-1961,5
$(CF_3)_3-(CH)$	-2037,9	$(CF_3)_3-(CF)$	-2191,6
$(CH_3)_3-(CF)$	-356,8		

Таблица 2

Рассчитанные значения энталпий образования ΔH_f^0
фторзамещенных неопентана, в кДж/моль

Молекула	ΔH_f^0	Молекула	ΔH_f^0
$(CH_3)_3-C-(CH_2F)$	-356,5	$(CH_3)-C-(CF_3)(CHF_2)(CH_2F)$	-1399,5
$(CH_3)_2-C-(CHF)_2$	-535,3	$(CH_2F)_3-C-(CF_3)$	-1353,4
$(CH_3)_3-C-(CHF_2)$	-586,2	$(CH_2F)_2-C-(CHF_2)(CF_3)$	-1562,9
$(CH_3)_3-C-(CF_3)$	-835,4	$(CH_3)(CH_2F)-C-(CF_3)_2$	-1635,0
$(CH_3)_2-C-(CH_2F)(CHF_2)$	-764,3	$(CH_2F)-C-(CF_2)_3$	-1536,1
$(CH_3)-C-(CH_2F)_3$	-721,3	$(CH_3)-C-(CHF_2)_2(CF_3)$	-1612,8
$(CH_2F)_4-C$	-899,5	$(CH_3)-C-(CHF_2)(CF_3)_2$	-1842,9
$(CH_3)-C-(CHF_2)(CH_2F)_2$	-929,2	$(CH_2F)_2-C-(CF_3)_2$	-1790,0
$(CHF_2)_2-C-(CH_3)_2$	-975,3	$(CHF_2)_4-C$	-1745,2
$(CH_3)_2-C-(CH_2F)(CF_3)$	-1012,1	$(CH_2F)-C-(CHF_2)_2(CF_3)$	-1769,6
$(CH_3)_2-C-(CHF_2)(CF_3)$	-1232,0	$(CH_3)-C-(CF_3)_3$	-2078,6
$(CH_3)-C-(CH_2F)(CHF_2)_2$	-1160,0	$(CH_2F)-C-(CHF_2)(CF_3)_2$	-1960,0
$(CH_3)-C-(CH_2F)_2(CF_3)$	-1176,9	$(CHF_2)_3-C-(CF_3)$	-2005,2
$(CH_2F)_3-C-(CHF_2)$	-1103,3	$(CH_2F)-C-(CHF_2)(CF_3)_2$	-2234,5
$(CH_3)-C-(CHF_2)_3$	-1373,7	$(CH_2F)-C-(CF_3)_3$	-2195,9
$(CH_2F)_2-C-(CHF_2)_2$	-1326,6	$(CF_2H)_2-C-(CF_3)_2$	-2436,9
$(CH_3)_2-C-(CF_3)_2$	-1470,4	$(CF_2H)-C-(CF_3)_3$	-1790,0

Всего в работе найдены значения ΔH_f^0 для 73 разветвленных молекул фторалканов. Полученные величины планируется использовать для построения корреляционной модели «строение-свойство».

Литература

1. NIST chemistry webbook, NIST standard reference database number 69. Available at: <http://webbook.nist.gov>. (accessed 1.01.2024). DOI: 10.18434/T4D303.

2. Котомкин А.В. Квантово-механический расчет структурных и энергетических характеристик С2 и С3 фторалканов / А.В. Котомкин, Ю.Д. Орлов // Физико-химические аспекты изучения кластеров,nanoструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 456-464.
3. Котомкин А.В. Квантово-механический расчет структурных и энергетических характеристик фторзамещенных бутана / А.В. Котомкин, Ю.Д. Орлов, Е.М. Чернова // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. – 2024. – № 1. – С. 20-29. DOI: 10.26456/vtchem2024.1.3
4. Исследование электронных параметров и электроотрицательностей групп радикалов монофторалканов $\text{CH}_3\text{-}(\text{CH}_2)_n\text{-C}^*\text{HF}$ / А.В. Котомкин, Н.П. Русакова, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. – 2014. – № 2. – С. 76-81.
5. Curtiss L.A., Redfern P.C., Raghavachari K. Gaussian-4 theory, The Journal of Chemical Physics, 2007, vol. 126, issue 8, pp. 084108-1-084108-12. DOI: 10.1063/1.2436888.

ENTHALPY OF FORMATION OF BRANCHED FLUORINALCANES

A.V. Kotomkin, Yu.D. Orlov

Tver State University

Abstract: creating of the correlation structure – property relationship model for fluoroalkanes require the expanding of the ΔH_f^0 database to form a training set. The enthalpy of formation (ΔH_f^0) of molecules fluorinated isobutane $\text{C}_4\text{H}_m\text{F}_k$, where $0 \leq m \leq 9$, $k = 10 - m$ and neopentane $\text{C}_5\text{H}_m\text{F}_k$, where $0 \leq m \leq 11$, $k = 12 - m$ has been calculated by the G4 method.

Keywords: thermodynamic properties, enthalpy of formation, fluorine alkanes, neopentane, isobutane.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕХОДОВ $\gamma^* \gamma^* \rightarrow \eta, \gamma^* \gamma^* \rightarrow \eta'$
В ОБЫЧНОЙ СХЕМЕ η - η' СМЕШИВАНИЯ**

Е.В. Мамедова

Бакинский государственный университет, Институт прикладной математики
mamedova_yegana@yahoo.com

Аннотация: переходный формфактор $F_{M\gamma^*}(Q^2, \omega)'$ переходов $\gamma^* \gamma^* \rightarrow \eta, \gamma^* \gamma^* \rightarrow \eta'$ легких псевдоскалярных η и η' мезонов вычислен с помощью факторизационной формулы КХД и в приближении фиксированной константы взаимодействия. В вычислениях использована амплитуда распределения мезонов, учитывающая инфракрасные ренормационные поправки, а также обычная октет-синглетная схема смешивания цветовой $SU_f(3)$ группы.

Ключевые слова: переходный формфактор, инфракрасные ренормалоны, степенные поправки, легкие псевдоскалярные мезоны.

Введение

Рассмотрим формфактор перехода виртуальный фотон – псевдоскалярный мезон $F_{M\gamma^*}(Q^2, \omega)$ [1-9]:

$$\gamma^*(q_1) + \gamma^*(q_2) \rightarrow M(P). \quad (1)$$

Мы ограничиваемся изучением только пространственноподобного формфактора, т.е. в выражении (1) q_1^2 и q_2^2 подчиняются ограничениям $q_1^2 \leq 0, q_2^2 < 0$ или $q_1^2 < 0, q_2^2 \leq 0$.

Формфактор $F_{M\gamma^*}(Q^2, \omega)$ определяется амплитудой процесса (1)

$$\Gamma_{\mu\nu} = e^2 F_{M\gamma^*}(Q^2, \omega) \epsilon_{\mu\nu\alpha\beta} P^\alpha \left(\frac{q_1 - q_2}{2} \right)^\beta, \quad (2)$$

здесь Q^2 – полная виртуальность фотона, ω – параметр асимметрии

$$Q^2 = Q_1^2 + Q_2^2; \quad \omega = \frac{Q_1^2}{Q^2}, \quad (3)$$

где $Q_1^2 = -q_1^2, Q_2^2 = -q_2^2; P = q_1 + q_2$ – импульс мезона. Параметр асимметрии ω принимает значения в области $0 \leq \omega \leq 1$. Значения $\omega = 0, 1$ относятся к формфактору перехода реальный фотон \rightarrow мезон, $\omega = 1/2$ – случаю, когда фотоны имеют равные виртуальности: $Q_1^2 = Q_2^2$.

Для больших Q^2 этот формфактор в согласии с факторизационной формулой пКХД, может быть представлен в форме свертки амплитуды жесткой части $T_H(x, Q^2, \omega, \mu_F^2, \mu_R^2)$ и ФР $\Phi_M(x, \mu_F^2)$ мезона

$$F_{M\gamma^*}(Q^2, \omega) = \int_0^1 T_H(x, Q^2, \omega, \mu_F^2, \mu_R^2) \Phi_M(x, \mu_F^2) dx. \quad (4)$$

Функция T_H в следующем порядке зависит от масштаба факторизации μ_F^2 и ренормализационного масштаба μ_R^2 . Мы выбираем их равными друг другу и полной виртуальности фотона $\mu_F^2 = \mu_R^2 = Q^2$. Такой выбор масштабов исключает из выражения функции T_H члены, пропорциональные $\ln(Q^2/\mu_F^2)$ и $\ln(Q^2/\mu_R^2)$, что упрощает конечное выражение для T_H , и мы находим [10]

$$T_H(x, Q^2, \omega) = \frac{N}{Q^2} \frac{1}{\bar{x}\omega + x\bar{\omega}} \left[1 + C_F \frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi} t(x, \omega) \right] + (x \rightarrow \bar{x}), \quad (5)$$

здесь $\bar{\omega} = 1 - \omega$; $x, \bar{x} = 1 - x$ – продольная часть импульса мезона, разделенная между кварком и антискварком, соответственно, а функция $t(x, \omega)$ имеет следующую форму

$$\begin{aligned} t(x, \omega) = & \left\{ \frac{\omega - x}{2\omega - 1} - \left[\frac{z}{2\omega - 1} \right]^2 \right\} \left\{ \left[\frac{L_1}{x} + \frac{L_2}{\bar{x}} \right] \ln z - \frac{1}{2} \left[\frac{L_1^2}{x} + \frac{L_2^2}{\bar{x}} \right] \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \frac{1-z}{2\omega-1} (L_1 - L_2) (2 \ln z - L_1 - L_2) + \frac{3}{2} (\ln z - 3) - \left\{ \frac{3}{2} \frac{\omega - x}{2\omega - 1} - \left[\frac{z}{2\omega - 1} \right]^2 \right\} \times \\ & \times \left[\frac{L_1}{x} + \frac{L_2}{\bar{x}} \right] - \frac{1}{2} \frac{3-2z}{2\omega-1} (L_1 - L_2), \end{aligned} \quad (6)$$

здесь

$$z = \bar{x}\omega + x\bar{\omega}, \quad L_1 = \ln \frac{z}{\omega}, \quad L_2 = \ln \frac{z}{\bar{\omega}}. \quad (7)$$

В значениях $\omega \rightarrow 0; 1$ оно вновь обретает форму амплитуды жесткой части $T_H(x, Q^2)$ для перехода реальный фотон-мезон $\gamma^* + \gamma \rightarrow M$.

Функция $t(x, \omega)$ имеет замечательные особенности симметрии

$$t(x, \omega) = t(\bar{x}, \bar{\omega}), \quad t(\bar{x}, \omega) = t(x, \bar{\omega}), \quad (8)$$

отражающую тот факт, что два фотона не могут отличаться в рассматриваемом процессе.

Асимптотическая ФР, учитывающая инфракрасные ренормационные поправки, имеет вид

$$\Phi^{asy}(x, \alpha) = f_M \frac{\Gamma(4+2\alpha)}{2\sqrt{3}\Gamma^2(2+\alpha)} [x(1-x)]^{1+\alpha}. \quad (9)$$

В полном выражении для формфактора мы не уточняем кварковую структуру мезона и постоянную распада f_M . Поэтому полученные результаты могут быть использованы для вычисления формфактора перехода $\eta\gamma^*$ и $\eta'\gamma^*$.

Схема $\eta - \eta'$ смешивания

Здесь мы обсудим электромагнитные $\eta\gamma^*$, $\eta'\gamma^*$ переходные формфакторы. Известно, что $\eta - \eta'$ смешивание может быть описано как октет-синглетной си-

стемой цветовой $SU_f(3)$ группы, так и в кварково-цветовом базисе. В первом случае, физические η и η' состояния выражаются суперпозицией октетной η_8 и синглетной η_1 состояний группы $SU_f(3)$.

$$\begin{aligned} |\eta\rangle &= \cos\theta |\eta_8\rangle - \sin\theta |\eta_1\rangle, \\ |\eta'\rangle &= \sin\theta |\eta_8\rangle + \cos\theta |\eta_1\rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

здесь θ – угол смешивания физических состояний в октет-синглетной схеме смешивания. Значения угла θ берутся из экспериментальных данных [11-13] и оценены в различных теоретических работах [14-19].

Синглетное η_1 и октетное η_8 состояния имеют следующие кварково-антикварковые структуры

$$\begin{aligned} |\eta_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |u\bar{u} + d\bar{d} + s\bar{s}\rangle, \\ |\eta_8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} |u\bar{u} + d\bar{d} - 2s\bar{s}\rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

В кварково-цветовом базисе физические η и η' состояния могут содержать суперпозицию странной η_S и нестранный η_q компонент

$$\begin{aligned} |\eta\rangle &= \cos\varphi |\eta_q\rangle - \sin\varphi |\eta_S\rangle, \\ |\eta'\rangle &= \sin\varphi |\eta_q\rangle + \cos\varphi |\eta_S\rangle, \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} |\eta_q\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u\bar{u} + d\bar{d}\rangle, \\ |\eta_S\rangle &= |s\bar{s}\rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

здесь φ – угол смешивания физических состояний в кварково-цветовом базисе, $\theta = \varphi - \arctg\sqrt{2}$.

Состояния η_1 и η_8 и угол смешивания θ в октет-синглетной схеме могут быть выражены через η_q , η_S состояния и угол смешивания φ кварк-цветового базиса и наоборот.

Формфакторы переходов $\gamma^* \gamma^* \rightarrow \eta$, $\gamma^* \gamma^* \rightarrow \eta'$ в обычной схеме $\eta - \eta'$ смешивания

Для описания $\eta - \eta'$ системы мы пользуемся октет-синглетной схемой смешивания. В рамках этой схемы $\eta - \eta'$ смешивания отношения между базовыми состояниями η_1 и η_8 в $SU_f(3)$ и физическими η и η' (10) приводят к похожим отношениям между формфакторами переходов $\eta\gamma$, $\eta'\gamma$ и $\eta_1\gamma$, $\eta_8\gamma$

$$\begin{aligned} F_{\eta\gamma^*}(Q^2, \omega) &= \cos\theta F_{\eta_8\gamma^*}(Q^2, \omega) - \sin\theta F_{\eta_1\gamma^*}(Q^2, \omega), \\ F_{\eta'\gamma^*}(Q^2, \omega) &= \sin\theta F_{\eta_8\gamma^*}(Q^2, \omega) + \cos\theta F_{\eta_1\gamma^*}(Q^2, \omega). \end{aligned} \quad (14)$$

В модифицированной HSA, в которой учитываются поперечные импульсы, формфакторы $\eta\gamma$ и $\eta'\gamma$ вычислены в работе [18] и получено $\theta = -18^\circ \pm 2^\circ$. Более общая схема с двумя углами смешивания θ_1 и θ_8 , исследованы в работе [16]. В этих работах получены значения, как для параметров θ_1 , θ_8 , f_1 , f_8 , так и для угла смешивания физических состояний: $\theta = -15.4^\circ$ [16]. Результаты работ [16, 18] хорошо согласуются с данными [20].

Постоянные нормировки N_1 и N_8 для мезонов η_1 и η_8 имеют вид

$$N_1 = 2\sqrt{2}(e_u^2 + e_d^2 + e_s^2), \quad N_8 = 2(e_u^2 + e_d^2 - 2e_s^2), \quad (15)$$

здесь e_q – заряд кварка.

Как мы уже подчеркивали, в литературе приводились разные значения для θ . Например, в киральной пертурбативной теории получено значение $\theta = -20^\circ$ [13], $\theta = -18^\circ \pm 2^\circ$ [18]. Мы полагаемся на феноменологические анализы, проведенные в [16] и пользуемся в численных вычислениях следующими значениями параметров f_1 , f_8 , θ :

$$f_1 = 1.17 f_\pi = 0.108 \text{ ГэВ}, \quad f_8 = 1.26 f_\pi = 0.116 \text{ ГэВ}, \quad \theta = -15.4^\circ. \quad (16)$$

В наших численных расчетах мы учитываем вклад в ФР мезонов η_1 и η_8 только полиномов Гегенбауэра $C_2^{3/2+\alpha}(2x-1)$ и $C_4^{3/2+\alpha}(2x-1)$.

Результаты наших численных расчетов показаны на рис. 1 и 2.

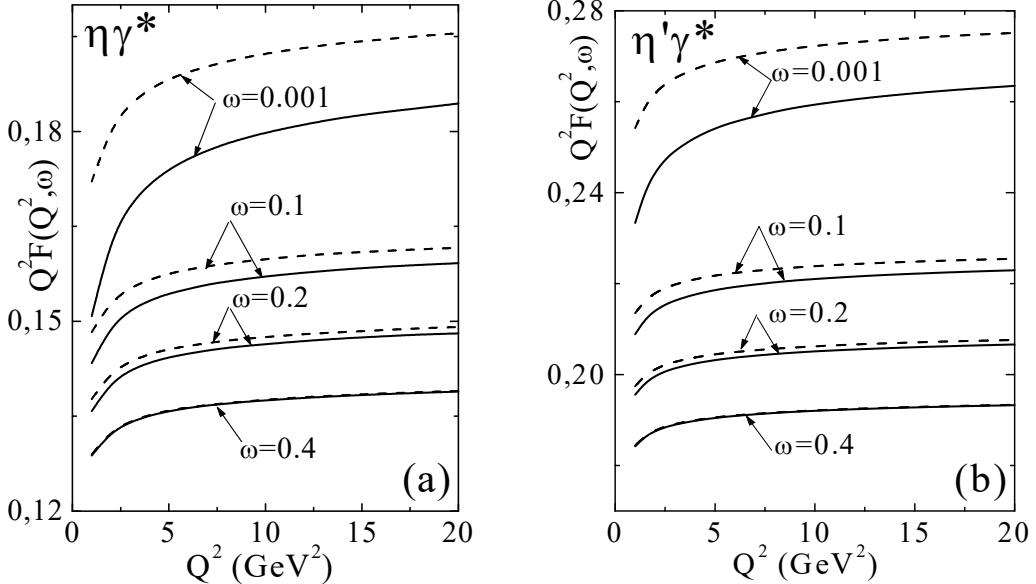


Рис. 1. Зависимость формфактора перехода $\eta\gamma^*$ ($\eta'\gamma^*$) от Q^2 при различных фиксированных значениях параметра асимметрии. Угол октет-синглетного смешивания $\theta = -15.4^\circ$. Использованы обычная асимптотическая (пунктирные) ФР и ФР с инфракрасными ренормалонными поправками (сплошные кривые) η_1 и η_8 мезонов

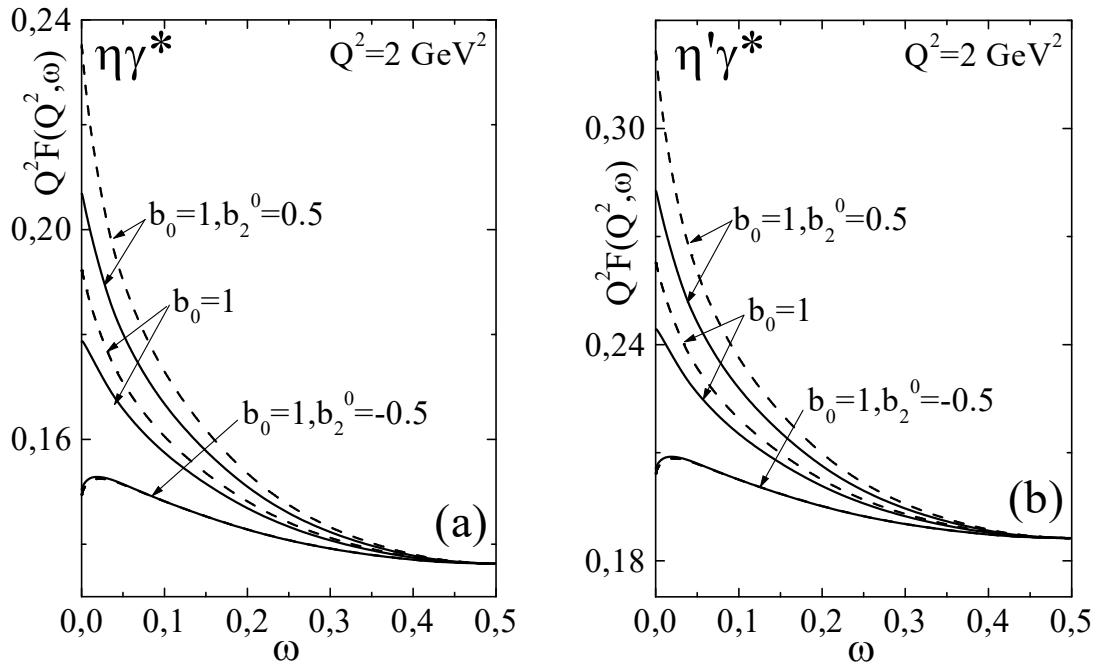


Рис. 2. Зависимость формфактора $\eta\gamma^*$ ($\eta'\gamma^*$) перехода от параметра асимметрии ω при фиксированном $Q^2 = 2$ ГэВ 2 и $\theta = -15.4^\circ$. Значения введенных параметров b_2^0 и b_4^0 одинаковы для обоих η_1 и η_8 мезонов. Сплошные кривые получены с помощью ФР с инфракрасными ренормалонными поправками, пунктирные кривые с использованием обычной ФР

Заключение

Формфактор $[F_{M\gamma^*}(Q^2, \omega)]^0$, вычисленный с применением обычных и более узких, чем $\Phi^{asy}(x)$ ФР, для легких η, η' мезонов достигает своего максимума в точке $\omega_{max} > 0$ ($\omega_{max} < 1$). Этот же формфактор $F_{M\gamma^*}(Q^2, \omega)$, полученный с помощью ФР с инфракрасными ренормалонными поправками обладает этим свойством при всех типах ФР. Степенные поправки уменьшают обычные $\eta\gamma^*$ и $\eta'\gamma^*$ формфакторы. Для асимптотической ФР мезона и для всех ФР, широких, чем $\Phi^{asy}(x, \alpha)$, эти эффекты значительны в области $0 \leq \omega \leq 0.2$ и $0.8 \leq \omega < 1$. Для ФР узких, чем $\Phi^{asy}(x, \alpha)$, они незначительны.

Литература

1. Azizi K., Sundu H., Sungü J. Y., Yinelek N. Transition Form Factors of meson in QCD. Advances in High Energy Physics. Hindawi. 2016, 8 p.
2. Denig A., BABAR collaboration. Measurement of the π^0, η, η' transition form factors at BABAR. Nucl. Phys. B - Proceedings Supplements, v. 234, 2013, p. 283-286.
3. Melikhov D., Bertold Stech. Universal behavior of the $\gamma^*\gamma \rightarrow (\pi^0, \eta, \eta')$ transition form factors. Phys.Lett. B, 2012, v. 718, N 2, pp.488-491.
4. Agaev S.S., Mukhtarov A.I., Mamedova Y.V. Infrared renormalon effects on light mesons' M distribution amplitudes and $F_M(Q^2), F_{\pi\gamma}(Q^2)$ form factors. Fizika, 2000, v. 6, N 1, p. 3-8.

5. Agaev S.S., Mukhtarov A.I., Mamedova Y.V. Mesons infrared renormalon corrected distribution amplitudes and the $\eta\gamma, \eta'\gamma$ transition form factors. *Fizika*, 2001, v. 7, N 2, p. 43-47.
6. Lees J.P. et al. Measurement of $\gamma * \gamma * \rightarrow \eta'$ transition form factor. *Phys. Rev. D* 98, 112002 2018, pp.1-9.
7. Ding M., Raya K., et al. $\gamma\gamma * \rightarrow \eta, \eta'$ transition form factors. *Physical Review D* 99, 2019, 16 p.
8. Mamedova Y.V. Infrared renormalon effects on light mesons' distribution amplitudes and $F_{M\gamma}(Q^2)$ transition form factors. Proc. of the 8th International Conference on Control and Optimization with Industrial Applications (*COIA-2022*), 24-26 August, 2022, Baku, Azerbaijan, pp. 303-305.
9. Mamedova Y.V. Investigation of $\gamma * +\gamma \rightarrow \eta(\eta')$ transitions using the mesons infrared renormalon corrected distribution amplitudes. Abstracts of VII World Congress of the Turkic World Mathematicians (TWMS Congress2023) September 20-23, 2023, Turkestan, Kazakhstan.
10. Braaten E. Quantum chromodynamic corrections to meson-photon transition form factors. *Phys. Rev. D*, 1983, v. 28, No 3, p. 524-533.
11. Ball P., Frere J.-M., Tytgat M. Phenomenological evidence for the gluon content of η and η' . *Phys. Lett. B*, 1996, v. 365, No 1-4, p. 367-376.
12. Bramon A., Escribano R., Scadron M. The $\eta - \eta'$ prime mixing angle. *Eur. Phys. J. C*, 1999, v. 7, No 2, p. 271-278.
13. Venugopal E., Barry R. Chiral anomaly and $\eta - \eta'$ mixing. *Phys. Rev. D*, 1998, v. 57, No 7, p. 4397-4402.
14. Benayoun M., Del Buono L., O'Connell H. The third mixing angle. *Eur. Phys. J. C*, 2000, v. 17, No 4, p. 593-610.
15. Cao J., Cao F.-G., Huang T. and Ma B.- Q. Electromagnetic transition form factor of pseudoscalar mesons and $\eta - \eta'$ mixing. *Phys. Rev. D*, 1998, v. 58, No 11, 113006, 8 p.
16. Feldman Th., Kroll P., Stech B. Mixing and decay constants of pseudoscalar mesons. *Phys. Rev. D*, 1998, v. 58, No 11, 114006, 8 p.
17. Feldman Th. Quark structure of pseudoscalar mesons. *Int. J. Mod. Phys.A*, 2000, v. 15, No 2, p. 159-207.
18. Jakob R., Kroll P., Raulfs M. Meson-photon transition form factors. *J. Phys. G*, 1996, v. 22, No 1, p.45-58.
19. Kaiser R., Leutwyler H. Large N_c in chiral perturbation theory. *Eur. Phys. J.C*, 2000, v. 17, No 4, p. 623-649.
20. Gronberg J., Hill T., Kutschke R. et al. CLEO Collaboration. Measurements of the meson-photon transition form factors of light pseudoscalar mesons at large momentum transfer. *Phys. Rev. D*, 1998, v. 57, No 1, p. 33-54.

INVESTIGATION OF THE $\gamma * \gamma * \rightarrow \eta, \gamma * \gamma * \rightarrow \eta'$ TRANSITIONS IN THE ORDINARY $\eta - \eta'$ MIXING SCHEME

Y.V. Mamedova

Baku State University, Institute of Applied Mathematics

Abstract: the light pseudoscalar η and η' mesons electromagnetic transition $\gamma * \gamma * \rightarrow \eta, \gamma * \gamma * \rightarrow \eta'$ form factors $F_{M\gamma^*}(Q^2, \omega)$ are calculated, applying the perturbative QCD factorization formula and the frozen coupling constant approximation. In the calculations the mesons' infrared renormalon corrected distribution amplitudes and the $SU_f(3)$ ordinary octet-singlet mixing scheme are used.

Keywords: transition form factor, infrared renormalons, power correction, light pseudoscalar mesons.

О ФУНДАМЕНТАЛЬНОМ РЕШЕНИИ СИНГУЛЯРНОГО ОПЕРАТОРА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Д.А. Моисеев

Воронежский государственный технический университет
dimonmoiseev48@mail.ru

Аннотация: в настоящей работе рассматривается задача о нахождении фундаментального решения сингулярного оператора теплопроводности, содержащего оператор Бесселя $B_{-\gamma}$ с индексом $-1 < -\gamma < 0$. Введено преобразование Бесселя специального вида, которое позволяет свести поставленную задачу к вычислению известного интеграла Вебера. Полученное фундаментальное решение при $\gamma = 0$ представляет собой фундаментальное решение классического оператора теплопроводности.

Ключевые слова: сингулярный оператор теплопроводности, оператор Бесселя, билинейная форма, распределение Дирака-Киприянова, преобразование Бесселя, фундаментальное решение.

Введение

Сингулярный дифференциальный оператор теплопроводности имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} - a^2 B_{-\gamma}, \quad B_{-\gamma} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\gamma}{x} \frac{\partial}{\partial x}, \quad -1 < -\gamma < 0, \quad \mu = \frac{\gamma + 1}{2}. \quad (1)$$

В работе [1] использованы $\mathbb{J}_\mu(x)$ и $\mathbb{J}_{-\mu}(x)$ функции Бесселя, которые являются линейно независимыми решениями сингулярного дифференциального уравнения

$$B_{-\gamma}u + u = 0$$

и имеют следующее представление через функции Бесселя 1-го рода:

$$\mathbb{J}_\mu(x) = \Gamma(1 + \mu) 2^\mu t^\mu J_\mu(x), \quad (2)$$

$$\mathbb{J}_{-\mu}(x) = \Gamma(1 - \mu) 2^{-\mu} t^\mu J_{-\mu}(x). \quad (3)$$

Рассматривается подпространство основных функций Л. Шварца $S_{ev}(0, \infty)$, состоящее из четных функций. Соответствующее пространство обобщенных функций, порожденное весовой билинейной формой

$$(u, v)_{-\gamma} = \int_0^\infty u(x)v(x)x^{-\gamma} dx, \quad -1 < -\gamma < 0, \quad (4)$$

будем обозначать $S'_{ev, -\gamma}$.

Обобщенная функция Дирака-Киприянова $\delta_{-\gamma} \in S'_{ev, -\gamma}$ определена в [1]:

$$(\delta_{-\gamma}, \varphi)_{-\gamma} = \varphi(0), \quad \forall \varphi(x) \in S_{ev}.$$

Также из работы [1] известно, что оператор $B_{-\gamma}$ эрмитов (самосопряжен по Лагранжу) в весовой билинейной форме (4):

$$(B_{-\gamma}u, v)_{-\gamma} = (u, B_{-\gamma}v)_{-\gamma}.$$

Определение: Фундаментальным решением сингулярного оператора теплопроводности будем называть регулярную обобщенную функцию $\mathcal{E}(x, t) \in S'_{ev, -\gamma}$, которая является решением уравнения

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - a^2 B_{-\gamma} \right) \mathcal{E}(x, t) = \delta_{-\gamma}(x) \delta(t).$$

Пусть μ определено в (1). Для нахождения фундаментального решения оператора (1) в данной работе введено $\mathbb{J}_{-\mu}$ -преобразование Бесселя, которое определено как:

$$F_{B_{-\gamma}}[f](\xi) = \hat{f}(\xi) = \int_0^\infty \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) f(x) x^{-\gamma} dx,$$

$$F_{B_{-\gamma}}^{-1}[f](x) = \frac{2^{2\mu}}{\Gamma^2(1-\mu)} \int_0^\infty \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) f(\xi) \xi^{-\gamma} d\xi.$$

1. $\mathbb{J}_{-\mu}$ – преобразование Бесселя

Взаимообратное преобразование Ханкеля произвольного порядка $\mu > -1$ для $f(x) \in L_2(0, \infty)$ определено в работе [3], с. 205:

$$H_\mu f(x) = \int_0^\infty \sqrt{xt} J_\mu(xt) f(t) dt, \quad \mu > -1 \quad (5)$$

Пусть $f(x)x^{-\mu}\sqrt{x} \in L_2(0, \infty)$ и $\mu = \frac{\gamma+1}{2}$. Учитывая равенства (5) и (3), запишем:

$$f(x)x^{-\mu} = \int_0^\infty J_{-\mu}(x\xi) \xi d\xi \int_0^\infty J_{-\mu}(y\xi) f(y) y^{-\mu} y dy =$$

$$= \frac{2^{2\mu}}{\Gamma^2(1-\mu)} \int_0^\infty (x\xi)^{-\mu} \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) \xi d\xi \int_0^\infty (y\xi)^{-\mu} \mathbb{J}_{-\mu}(y\xi) f(y) y^{-\mu} y dy =$$

$$= \frac{2^{2\mu}}{\Gamma^2(1-\mu)} x^{-\mu} \int_0^\infty \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) \xi^{-\gamma} d\xi \int_0^\infty \mathbb{J}_{-\mu}(y\xi) f(y) y^{-\gamma} dy.$$

Следовательно, если $f(x)x^{-\mu}\sqrt{x} \in L_2(0, \infty)$, то:

$$f(x) = \frac{2^{2\mu}}{\Gamma^2(1-\mu)} x^{-\mu} \int_0^\infty \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) \xi^{-\gamma} d\xi \int_0^\infty \mathbb{J}_{-\mu}(y\xi) f(y) y^{-\gamma} dy.$$

Таким образом, мы имеем два взаимно обратных преобразования

$$F_{B_{-\gamma}}[f](\xi) = \hat{f}(\xi) = \int_0^\infty \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) f(x) x^{-\gamma} dx. \quad (6)$$

$$F_{B_{-\gamma}}^{-1}[f](x) = \frac{2^{2\mu}}{\Gamma^2(1-\mu)} \int_0^\infty \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) f(\xi) \xi^{-\gamma} d\xi. \quad (7)$$

Преобразования (6) и (7) в дальнейшем будем называть $\mathbb{J}_{-\mu}$ -преобразованиями Бесселя.

$\mathbb{J}_{-\mu}$ -преобразование Бесселя обладает всеми необходимыми свойствами для нахождения фундаментального решения оператора (1).

Лемма 1. $F_{B_{-\gamma}}[B_{-\gamma}f](\xi) = (i\xi)^2 F_{B_{-\gamma}}[f](\xi)$.

Доказательство.

$$\begin{aligned} F_{B_{-\gamma}}[B_{-\gamma}f](\xi) &= \int_0^{+\infty} \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) B_{-\gamma}f(x) x^{-\gamma} dx = \int_0^{+\infty} (B_{-\gamma}\mathbb{J}_{-\mu})(x\xi) f(x) x^{-\gamma} dx = \\ &= -\xi^2 \int_0^{+\infty} \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) f(x) x^{-\gamma} dx = (i\xi)^2 F_{B_{-\gamma}}[f](\xi). \end{aligned}$$

Лемма 2. $F_{B_{-\gamma}}[\delta_{-\gamma}](\xi) = 1$.

Доказательство. Доказательство напрямую следует из определения распределения Дирака-Киприянова (см [1]).

2. Фундаментальное решение сингулярного оператора теплопроводности

Для нахождения фундаментального решения оператора (1) применим к обеим частям уравнения

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - a^2 B_{-\gamma} \right) \mathcal{E}(x, t) = \delta_{-\gamma}(x) \cdot \delta(t)$$

$\mathbb{J}_{-\mu}$ -преобразование Бесселя и воспользуемся леммами 1 и 2. В результате получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{E}}(\xi, t) + a^2 \xi^2 \hat{\mathcal{E}}(\xi, t) = \delta(t).$$

Это обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка, решение которого хорошо известно, например, см. [5]:

$$\hat{\mathcal{E}}(\xi, t) = e^{-a^2 \xi^2 t}. \quad (8)$$

Теперь нам необходимо найти обращение $\mathbb{J}_{-\mu}$ -преобразования Бесселя от функции (8):

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(x, t) &= \frac{2^{2\mu}}{\Gamma^2(1-\mu)} \int_0^{+\infty} \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) \hat{\mathcal{E}}(\xi, t) \xi^{-\gamma} d\xi = \\ &= \frac{2^{2\mu}}{\Gamma^2(1-\mu)} \int_0^{+\infty} \mathbb{J}_{-\mu}(x\xi) e^{-a^2 \xi^2 t} \xi^{-\gamma} d\xi = \\ &= \frac{2^\mu}{\Gamma(1-\mu)} x^\mu \int_0^\infty J_{-\mu}(x\xi) e^{-a^2 \xi^2 t} \xi^{-\mu+1} d\xi. \end{aligned}$$

Последний интеграл представляет собой первый экспоненциальный интеграл Вебера (см [4], с. 431), используя который, запишем:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(x, t) &= \frac{2^\mu}{\Gamma(1-\mu)} x^\mu \int_0^\infty J_{-\mu}(x\xi) e^{-a^2 \xi^2 t} \xi^{-\mu+1} d\xi = \\ &= \frac{2^{\frac{\gamma+1}{2}}}{\Gamma(\frac{1-\gamma}{2})} x^{\frac{\gamma+1}{2}} \frac{x^{-(\frac{\gamma+1}{2})}}{(2a^2 t)^{\frac{1-\gamma}{2}}} e^{-\frac{x^2}{4a^2 t}} = \frac{1}{2^{-\gamma} \Gamma(\frac{1-\gamma}{2}) (a^2 t)^{\frac{1-\gamma}{2}}} e^{-\frac{x^2}{4a^2 t}}.\end{aligned}$$

Таким образом, с помощью $J_{-\mu}$ -преобразования Бесселя и интеграла Вебера мы получили формулу фундаментального решения уравнения (2) при условии $-1 < -\gamma < 0$:

$$\mathcal{E}(x, t) = \frac{1}{2^{-\gamma} \Gamma(\frac{1-\gamma}{2}) (a^2 t)^{\frac{1-\gamma}{2}}} e^{-\frac{x^2}{4a^2 t}}. \quad (9)$$

Заключение

В настоящей работе получено фундаментальное решение сингулярного оператора теплопроводности, которое выражается формулой (9). Кроме того, при $\gamma = 0$ формула (9) представляет собой фундаментальное решение классического оператора теплопроводности.

Автор работы выражает искреннюю благодарность профессору Л.Н. Ляхову за поставленную задачу и консультации в процессе ее решения.

Литература

1. Ляхов Л.Н. Фундаментальное решение сингулярного дифференциального оператора Бесселя с отрицательным параметром / Л.Н. Ляхов, Ю.Н. Булатов, С.А. Рошупкин, Е.Л. Санина // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2023. – № 7. – С. 52-65.
2. Ляхов Л.Н. Дифференциальные и интегральные операции в скрытой сферической симметрии и размерность кривой Коха / Л.Н. Ляхов, Е.Л. Санина // Математические заметки. – 2023. – № 133:4. – С. 517-528.
3. Земанян А.Г. Интегральные преобразования обобщенных функций. – М.: Наука, 1974. – 399 с.
4. Ватсон Г.Н. Теория бесселевых функций. Ч. 1, пер. с англ. В.С. Бермана. – М.: Издво иностр. лит-ры, 1949. – 799 с.
5. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1976. – 528 с.
6. Heywood P., Rooney P.G. // Can. J. Math. 1988. V.40. № 4. P. 989 -1009.

ON THE FUNDAMENTAL SOLUTION OF THE SINGULAR THERMAL CONDUCTIVITY OPERATOR

D.A. Moiseev

Voronezh State Technical University

Abstract: in this paper, we consider the problem of finding a fundamental solution to the singular thermal conductivity operator containing the Bessel operator $B_{-\gamma}$ with index $-1 < -\gamma < 0$. The Bessel transformation of a special kind is introduced, which allows us to reduce the task to calculating the well-known Weber integral. The obtained fundamental solution for $\gamma = 0$ is a fundamental solution of the classical thermal conductivity operator.

Keywords: singular heat conduction operator, Bessel operator, bilinear form, Dirac-Kipriyanov distribution, Bessel transformation, fundamental solution.

**АППРОКСИМАЦИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ
В ЗАДАЧАХ КОЛЕБАНИЙ УПРУГИХ КОНТИНУУМОВ
С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ПЕРЕМЕННОЙ НА ГРАФЕ**

И.В. Перова

Воронежский государственный университет
writeira@mail.ru

Аннотация. Рассматривается дифференциальный оператор эллиптического типа, а также аппроксимация в анализе решений задач колебаний упругих континуумов с пространственной переменной, изменяющейся на графе. Анализ математических моделей малых упругих колебаний конструкций, структурно ассоциированных с графом-деревом, в прикладных задачах направлен на описание количественных характеристик изменения амплитуд колебаний для предотвращения нежелательных (и даже опасных) колебаний, ведущих к различного рода неустойчивостям механических конструкций. Рассматриваются разностные аналоги дифференциального оператора, соответствующие математическим моделям вышеупомянутых конструкций.

Ключевые слова: аппроксимация дифференциального оператора, граничные задачи на графе, вычислительные методы анализа упругих колебаний.

Современные промышленные устройства и системы зачастую допускают представление в виде одномерных континуумов, взаимодействующих только через концы. Протекающие в таких устройствах процессы допускают формирование соответствующих математических моделей, реализуемых на геометрическом графе. На рёбрах графа устанавливаются соотношения, описывающие закономерности функционирования системы, во внутренних узлах – условия взаимодействия смежных континуумов, в граничных узлах – граничные условия, характерные для конкретной системы (устройства). Таким образом, математические модели разных прототипов изначально имеют общее свойство быть граничными задачами для уравнений, в большинстве своём являющихся уравнениями с распределёнными параметрами на графе.

Введем следующие обозначения, принятые в работе [2]. Обозначим через \mathfrak{J}_0 простейший граф (последовательно соединенные отрезки, называемые ребрами графа и обозначаемые $\gamma_i, i = 1, 2, \dots, M$), $\partial\mathfrak{J}_0$ – граница графа \mathfrak{J}_0 ; \mathfrak{J}_1 – граф-звезда (конечное число ребер, имеющих одну общую точку, называемую узлом и обозначенную ξ_i , – внутренние узлы, ζ – граничные узлы), \mathfrak{J}_L – цепочка из L последовательно соединенных звёзд.

Пусть $\mathcal{R}(\mathfrak{J}_0)$ – множество функций $y(x) \in C(\mathfrak{J}_0) \cap C^2[\mathfrak{J}_0]$, где через $C(\mathfrak{J}_0)$ обозначено множество непрерывных на \mathfrak{J}_0 функций, через $C^2[\mathfrak{J}_0]$ – множество функций, имеющих во всех точках каждого ребра, исключая концевые точки, производные второго порядка. При этом первая производная $y(x)$ множества $\mathcal{R}(\mathfrak{J}_0)$ удовлетворяет условиям:

$$y' \left(i \frac{\pi}{M} \right)_{\gamma_i} - y' \left(i \frac{\pi}{M} \right)_{\gamma_{i+1}} = a_i y \left(i \frac{\pi}{M} \right)_{\gamma_{i+1}}, i = \overline{1, M-1}, \quad (1)$$

где a_i – коэффициент, фиксированная постоянная.

Обозначим через $\mathcal{R}(\mathfrak{J}_L)$ – множество функций $y(x) \in C(\mathfrak{J}_L) \cap C^2[\mathfrak{J}_L]$, удовлетворяющих условиям согласования в узлах $\xi_j, j = 1, 2, \dots, L$:

$$\sum_{i=1}^{M_1-1} y' \left(\frac{\pi}{2} \right)_{\gamma_i^1} = y' \left(\frac{\pi}{2} \right)_{\gamma_1^1} \quad (2)$$

в узле ξ_1

$$y' \left(\frac{\pi}{2} \right)_{\gamma_{M_{j-1}}^{j-1}} + \sum_{i=1}^{M_j-1} y' \left(\frac{\pi}{2} \right)_{\gamma_i^j} = y' \left(\frac{\pi}{2} \right)_{\gamma_{M_j}^j}, \quad j = \overline{2, L}, \quad (3)$$

в узлах ξ_j , где M_j – число ребер в L -й звезде цепочки \mathfrak{J}_L

На функциях $y(x)$, принадлежащих многообразиям $\mathcal{R}(\mathfrak{J}_0)$ и $\mathcal{R}(\mathfrak{J}_L)$ определим дифференциальные операторы $\Lambda_{\mathfrak{J}_0}^0$ и $\Lambda_{\mathfrak{J}_L}^0$ соотношением

$$\Lambda_{\mathfrak{J}}^0 y = - \frac{d^2}{dx^2} y + q(x) y, \quad y(x) \in \mathcal{R}(\mathfrak{J}), \quad (4)$$

граф \mathfrak{J} – один из \mathfrak{J}_0 , \mathfrak{J}_L , $q(x) \in C(\mathfrak{J}_L)$. Областями определения операторов $\Lambda_{\mathfrak{J}_0}^0, \Lambda_{\mathfrak{J}_L}^0$ являются множества $\Phi_{\mathfrak{J}_0}^0, \Phi_{\mathfrak{J}_L}^0$ ($\Phi_{\mathfrak{J}_0}^0 \subset \mathcal{R}(\mathfrak{J}_0), \Phi_{\mathfrak{J}_L}^0 \subset \mathcal{R}(\mathfrak{J}_L)$), элементы $y(x)$ которых удовлетворяют граничным условиям:

$$y(b_\zeta) = 0, \quad \zeta \in \partial \mathfrak{J}, \quad (5)$$

где число b_ζ соответствует ζ .

На сетках $\mathfrak{J}_0^h, \mathfrak{J}_L^h$ графов $\mathfrak{J}_0, \mathfrak{J}_L$ рассмотрим конечно-разностные аналоги дифференциальных операторов $\Lambda_{\mathfrak{J}_0}^0, \Lambda_{\mathfrak{J}_L}^0$.

Конечно-разностные аналоги дифференциальных операторов на графике

Разобьем ребра γ графа \mathfrak{J} на интервалы длиной h (h – шаг сетки)

Введём разностные выражения

$$\begin{aligned} (\nabla^h y^h)_k^i &= \frac{1}{h} ((y^h)_k^i - (y^h)_{k-1}^i), \\ (\nabla^h y^h)_k^i &= \frac{1}{h} ((y^h)_{k+1}^i - (y^h)_k^i) \end{aligned}$$

для сеточных функций $y^h \in \mathfrak{J}^h$.

Рассмотрим случай $\mathfrak{J} = \mathfrak{J}_0$. Пусть y^h – сеточная функция с компонентами $(y^h)_k^i = y(x_k^i)$, $k = \overline{0, n}$, и пусть $\mathcal{R}_{\mathfrak{J}_0}^h$ – множество сеточных функций y^h , удовлетворяющих соотношениям:

$$\begin{aligned} (y^h)_n^i &= (y^h)_0^i, \\ \frac{1}{h} ((y^h)_1^i - (y^h)_0^i) - \frac{1}{h} ((y^h)_n^i - (y^h)_{n-1}^i) &= a_i (y^h)_0^i, \end{aligned} \quad (6)$$

Оператор $\Lambda_{\mathfrak{J}_0}^0$ имеет представление

$$\begin{aligned} (\Lambda_{\mathfrak{J}_0}^0 y^h)_k^i &= -(\Delta^h \nabla^h y^h)_k^i + (q^h)_k^i (y^h)_k^i = \\ &= -\frac{1}{h^2} ((y^h)_{k+1}^i + 2(y^h)_k^i + (y^h)_{k-1}^i) + (q^h)_k^i (y^h)_k^i, \\ k &= \overline{1, n-1}, \quad i = \overline{1, M}. \end{aligned} \quad (7)$$

Область определения $\Phi_{\mathfrak{J}_0}^0$ этого оператора – множество сеточных функций $y^h \in \mathcal{R}_{\mathfrak{J}_0}^h$, обращающихся в нуль на границе $\partial\Phi_{\mathfrak{J}_0}^0$ сетки $\Phi_{\mathfrak{J}_0}^0$, т. е. функции y^h удовлетворяют условиям:

$$(y^h)_0^1 = (y^h)_n^M = 0. \quad (8)$$

Соотношения (6)-(8) являются разностными аналогами соотношений (1), (4), (5).

Пусть далее $\mathfrak{J} = \mathfrak{J}_L$. Множество $\mathcal{R}_{\mathfrak{J}_L}^h$ сеточных функций y^h определяется соотношениями:

$$\begin{aligned} (y^h)_n^{i1} &= (y^h)_0^{M_1 1}, \quad i = \overline{1, M_1 - 1}, \\ \sum_{i=1}^{M_1-1} ((y^h)_n^{i1} - (y^h)_{n-1}^{i1}) &= ((y^h)_1^{M_1 1} - (y^h)_0^{M_1 1}), \\ (y^h)_n^{ij} &= (y^h)_0^{M_j j}, \quad i = \overline{1, M_j - 1}, \quad j = \overline{2, L}, \\ ((y^h)_n^{M_{j-1} j-1} - (y^h)_{n-1}^{M_{j-1} j-1}) + \sum_{i=1}^{M_j-1} ((y^h)_n^{ij} - (y^h)_{n-1}^{ij}) &= \\ &= (y^h)_1^{M_j j} - (y^h)_0^{M_j j}, \quad i = \overline{1, M_j - 1}, \quad k = \overline{1, n-1}. \end{aligned} \quad (10)$$

Оператор $\Lambda_{\mathfrak{J}_L}^0$ на сеточных функциях $y^h \in \mathcal{R}_L^h$ имеет представление:

$$\begin{aligned} (\Lambda_{\mathfrak{J}_L}^0 y^h)_k^{ij} &= -(\Delta^h \nabla^h y^h)_k^{ij} + (q^h)_k^{ij} (y^h)_k^{ij} = \\ &= -\frac{1}{h^2} ((y^h)_{k+1}^{ij} + 2(y^h)_k^{ij} + (y^h)_{k-1}^{ij}) + (q^h)_k^{ij} (y^h)_k^{ij}, \\ k &= \overline{1, n-1}, \quad i = \overline{1, M_j}, \quad j = \overline{2, L}, \end{aligned} \quad (11)$$

здесь M_j – число рёбер в j -й звезде цепочки \mathfrak{J}_L ($j = \overline{1, L}$); q^h – сеточная вещественная функция; областью определения $\Phi_{\mathfrak{J}_L}^0$ этого оператора является множество сеточных функций $y^h \in \mathcal{R}_{\mathfrak{J}_L}^h$, удовлетворяющих условиям

$$(y^h)_0^{ij} = (y^h)_n^{M_1 L} = 0, \quad i = \overline{1, M_j - 1}, \quad j = \overline{1, L}. \quad (12)$$

Соотношения (9)-(12) являются разностными аналогами соотношений (2)-(5).

Аппроксимации волнового уравнения на графике

Пусть $\mathfrak{R}(t)$ – линейное многообразие функций $\varphi(x, t)$, для каждого фиксированного $t \in [0, T]$, принадлежащих множеству \mathfrak{R} , каковым может быть одно из рассмотренных выше множеств $\mathcal{R}(\mathfrak{J}_0)$ и $\mathcal{R}(\mathfrak{J}_L)$. Рассмотрим задачу

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + \Lambda^0 \varphi = f, x, t \in \mathfrak{J} \setminus \partial \mathfrak{J} \cup (\mathfrak{J}), t \in [0, T] \quad (13)$$

на функциях $\varphi(x, t) \in \Phi$, где Φ – множество функций $\varphi \in \mathcal{R}$, удовлетворяющих условию

$$\varphi = g, x, t \in \partial \mathfrak{J} \times [0, T]. \quad (14)$$

Причем

$$\frac{d\varphi}{dt}(x, 0) = v1, \varphi = v, x \in \mathfrak{J} \setminus \partial \mathfrak{J}, t = 0,$$

здесь $g, v, v1 \in G$, G – множество функций, заданных на $\mathfrak{J} \setminus \partial \mathfrak{J}$, оператор Λ^0 – один из операторов $\Lambda_{\mathfrak{J}_0}^0$ и $\Lambda_{\mathfrak{J}_L}^0$. Будем считать, что сформулированная задача (13)-(14) имеет единственное решение φ , и это решение непрерывно в $\mathfrak{J} \times [0, T]$, производные $\frac{\partial^v \varphi}{\partial t^v}$ ($v = 1, 2$), $\frac{\partial^\zeta \varphi}{\partial t^\zeta}$ ($\zeta = 1, 2, 3, 4$) непрерывны в области $(\mathfrak{J} \setminus \partial \mathfrak{J} \cup (\mathfrak{J})) \times [0, T]$.

Аппроксимации задачи (13)-(14) имеет два этапа. Сначала эту задачу аппроксимируем в области $\mathfrak{J}^h \times [0, T]$ по пространственной переменной. В результате приходим к дифференциальному уравнению по времени и разностному по пространственной переменной. Предположим, что это проделано, приходим к задаче вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + \Lambda^{0h} \varphi^h &= f^h, \\ \frac{d\varphi^h}{dt} &= v1^h, \dots, \varphi^h = v^h, \end{aligned} \quad (15)$$

где $v^h, v1^h$ – проекции функций $v, v1$ на сетку φ^h, f^h – сеточные функции времени t ; конечно-разностный оператор Λ^{0h} может быть одним из операторов $\Lambda_{\mathfrak{J}_0}^{0h}$ и $\Lambda_{\mathfrak{J}_L}^{0h}$.

Для задачи (15) имеет место явная разностная схема с погрешностью $O(\tau^2 + h)$:

$$\begin{aligned} \frac{\varphi^{h\tau j+1} - 2\varphi^{h\tau j} + \varphi^{h\tau j-1}}{\tau^2} + \Lambda^{0h} \varphi^{h\tau j} &= f^{h\tau j}, \\ \varphi^{h\tau 0} &= v^h, \varphi^{h\tau j} = v1^h, \end{aligned}$$

где $f^{h\tau j}$ – компоненты проекции функции $f^{h\tau}$ на сетку

$$\{t_j: t_j = j\tau (j = \overline{0, M}), \tau = M\},$$

где можно принять $f^{h\tau j} = f^h(t_j)$.

Литература

1. Перова И.В. Априорные оценки для дифференциально-разностной системы с пространственной переменной на графе / И.В. Перова, В.В. Тимошенко // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий (ПМТУКТ-2022): сборник трудов Международной научной конференции. – Воронеж: Воронежский государственный педагогический университет, 2022. – С. 56-57.
2. Провоторов В.В. Собственные функции краевых задач на графах и приложения. - Воронеж: Научная книга, 2008. - 247 с.

APPROXIMATION DIFFERENTIAL OPERATORS IN PROBLEMS OF OSCILLATIONS OF ELASTIC CONTINUUMS WITH A SPATIAL VARIABLE ON A GRAPH

I.V. Perova

Voronezh State University

Abstract. An elliptic-type differential operator is considered, as well as an application in the analysis of solutions to problems of oscillations of elastic continua with a spatial variable changing on a graph. The analysis of mathematical models of small elastic vibrations of structures structurally associated with a graph tree in applied problems is aimed at describing the quantitative characteristics of changes in oscillation amplitudes to prevent undesirable (and even dangerous) fluctuations leading to various kinds of instabilities of mechanical structures. The difference analogues of the differential operator corresponding to the mathematical models of the above-mentioned constructions are considered.

Keywords: approximation of a differential operator, boundary value problems on a graph, computational methods for analyzing elastic vibrations.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ ОТ ЭЛЕКТРОННОГО И ПРОТОННОГО ИЗЛУЧЕНИЙ

А.Н. Панюшкин, И.П. Бирюкова, Н.Н. Панюшкин

Воронежский государственный лесотехнический университет им. Г.Ф. Морозова
nnpan@yandex.ru

Аннотация: рассмотрена модель дополнительной радиационной защиты электрорадиоиделий (ЭРИ) радиоэлектронной аппаратуры (РЭА), функционирующей на низких околоземных орбитах от электронного и протонного излучений естественного радиационного пояса Земли (ЕРПЗ). Проведены численные эксперименты, сформулированы требования к конструкции эффективных плоских дополнительных защит.

Ключевые слова: дополнительная радиационная защита, локальная дозовая нагрузка, метод секторирования, математическая модель, ионизирующее излучение космического пространства, плоская ограниченная защита.

Повышение функциональной и технологической сложности электрорадиоизделий (ЭРИ) космического применения является одной из основных причин снижения радиационной стойкости радиоэлектронной аппаратуры (РЭА), что ограничивает сроки активного существования (САС) космических аппаратов (КА). Для выполнения требований по радиационной стойкости и САС широко применяется пассивная радиационная защита, роль которой выполняют, чаще всего кожухи РЭА в форме прямоугольных параллелепипедов, или элементы конструкции корпуса КА. В некоторых случаях требуется устанавливать дополнительную локальную защиту (рис. 1) для наиболее радиационно-чувствительных ЭРИ [1]. Ограничения по массе КА требует точного расчета оптимальной геометрии дополнительной защиты. Для расчета локальной дозовой нагрузки (ЛДН) ЭРИ используют справочные данные по радиационным условиям на орбите, которые приводят заказчик для упрощённых моделей радиационных защит: сплошной сферы и полубесконечной плоскости. Наиболее точным является приближение сплошной сферы, которое наиболее широко используется на практике [2]. При моделировании плоских ограниченных радиационных защит необходимо применение лучевого метода, в которыми поверхность защиты (барьер) разбивается на множество элементов, для каждого из которых траектории лучей ионизирующего излучения (ИИ) можно было бы считать параллельными (необходимо для применения закона Ламберта-Буггера). На практике, при расчете радиационной стойкости ЭРИ, такой подход является нереализуемым. Как правило, используют метод секторирования, для которого количество секторов выбирают равным количеству граней параллелепипеда. При таком подходе теряется не только точность вычисления ЛДН, но, главное, теряется возможность анализа её связи с конструктивно-технологическими особенностями плоских радиационных защит, что не позволяет конструкторам рассчитать их оптимальную геометрию. Это относится и к дополнительным защитам, для которых вопрос

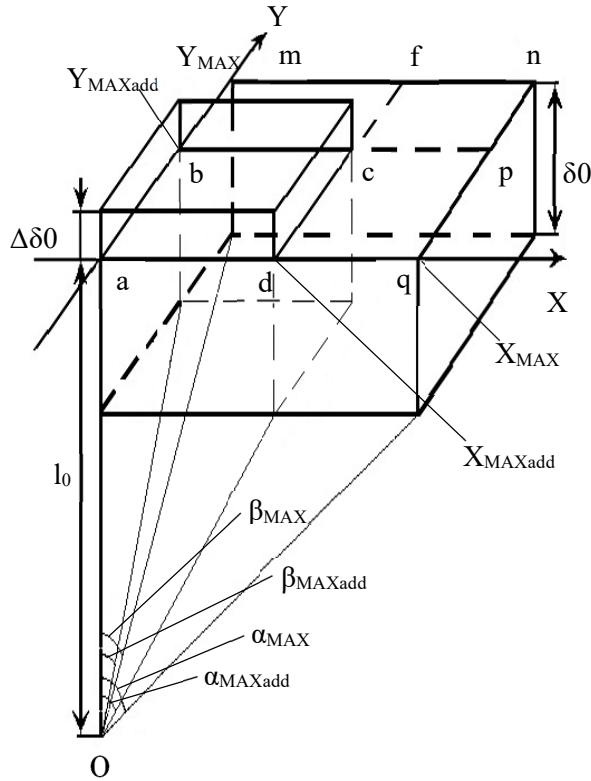


Рис. 1. Конструкция дополнительной защиты для плоской ограниченной защиты

влияния конструктивно-технологических параметров на ЛДН недостаточно изучен [1]. В данной работе рассмотрена модель дополнительной защиты, в которой для корректного перехода от лучевого метода к методу секторирования использован метод макромоделирования.

В основе предлагаемой макромодели лежит модель эффективной толщины барьера плоской ограниченной радиационной защиты [3]. Алгоритм расчета аналогичен расчету ЛДН для сплошной защиты в форме прямоугольного параллелепипеда [4]. Расчет ЛДН в расчетной точке (точка О на рис. 1) проводится по формуле

$$D = D_0(k_{0_{EFF}}, \delta_0, \Omega) - D_1(k_{0_{EFF}}, \delta_0, \Omega_{add}) + D_{add}(k_{add}, \delta_0 + \Delta\delta_0, \Omega_{add}), \quad (1)$$

где D – ЛДН защищённой поверхности (грани); D_0 – ЛДН незащищённой поверхности; D_1 – ЛДН, создаваемая частью защищаемой поверхности при отсутствии дополнительной защиты; D_{add} – ЛДН, создаваемая дополнительной защитой; $k_{0_{EFF}}, k_{add}$ – усредненные по площади поверхности коэффициенты эквивалентности, учитывающие угол падения ИИ на защищаемую поверхность и дополнительную защиту, соответственно; δ_0 – толщина барьера защищаемой поверхности; $\Delta\delta_0$ – толщина барьера дополнительной защиты; Ω, Ω_{add} – телесные углы защищаемой поверхности и дополнительной защиты, соответственно. Математические модели для величин, входящих в расчетную формулу приведены в [3, 4].

Численный эксперимент проводился для плоской ограниченной защиты при условии её использования на низкой околоземной орбите (400 км). Размер

защищаемой поверхности принимался равным 1 м^2 (квадрат). На рис. 2 показана зависимость абсолютного снижения ЛДН (ΔD), определяемого по формуле

$$\Delta D = D_1(k_{0_{EFF}}, \delta_0, \Omega_{add}) - D_{add}(k_{add}, \delta_0 + \Delta\delta_0, \Omega_{add}) \quad (2)$$

от половинного значения полного плоского угла α_{MAXadd} в основании телесного угла, стягивающей поверхностью которого является дополнительная защита. Массовая толщина защищаемой грани (произведение толщины барьера на плотность вещества, из которого он изготовлен) $\delta = 0,6 \text{ г/см}^2$ (толщина барьера из Al $\delta_0 = 0,214 \text{ см}$). Как видно из рисунка, эта зависимость имеет выраженный максимум в диапазоне $45^\circ \leq \alpha_{MAXadd} \leq 55^\circ$ для всех значений массовой толщины барьера дополнительной защиты в диапазоне $0,3 \text{ г/см}^2 \leq \Delta\delta \leq 2 \text{ г/см}^2$. При этом величина α_{MAXadd} , на которую приходится максимум снижения ЛДН увеличивается при уменьшении массовой толщины защищаемой грани и уменьшается при её увеличении. При $\Delta\delta \geq 1 \text{ г/см}^2$ величина ΔD практически не возрастает.

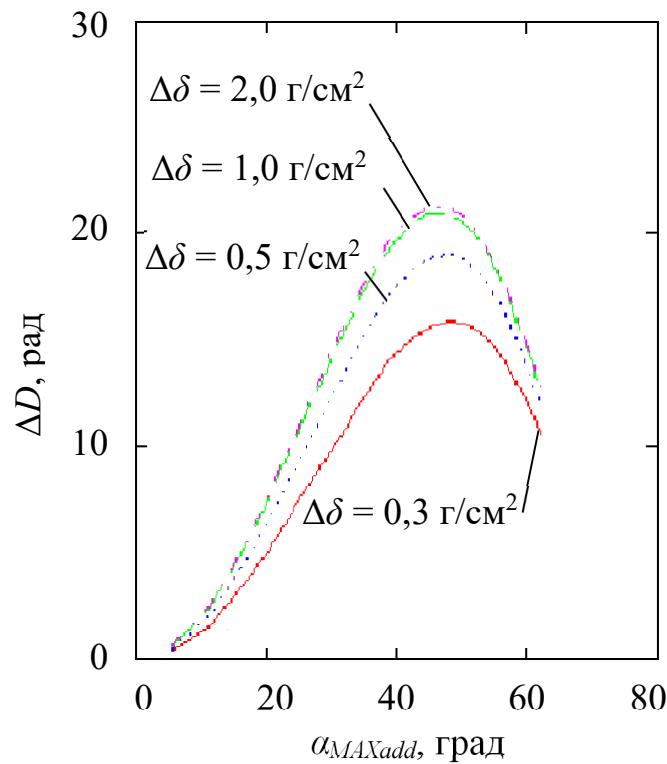


Рис. 2. Зависимость ΔD от половинного значения плоского угла дополнительной защиты. Массовая толщина барьера защищаемой грани $\delta = 0,6 \text{ г/см}^2$

Для снижения ЛДН необходимо увеличивать массовую толщину или величину плоского телесного угла дополнительной защиты. Оба решения приводят к увеличению массы защиты. Для оценки эффективности этих решений предлагается ввести понятия эффективности дополнительной защиты, определяемой как абсолютного снижения ЛДН защиты, приходящееся на единицу её массы

$$\psi = \frac{\Delta D}{\rho \cdot X_{MAXadd} \cdot Y_{MAXadd} \cdot \Delta\delta_0}.$$

Здесь ΔD – абсолютное снижение ЛДН после применения дополнительной защиты, определяется формулой (2); ρ – объёмная плотность материала дополнительной защиты (для Al $\rho = 2,7$ г/см³); X_{MAXadd} , Y_{MAXadd} – размеры дополнительной защиты по осям OX и OY соответственно (рис. 1); $\Delta\delta$ – толщина барьера дополнительной защиты (рис. 1).

На рис. 3 показана зависимость эффективности дополнительной защиты ψ от массовой толщины барьера защищаемой грани δ при нескольких значениях массовой толщины барьера дополнительной защиты $\Delta\delta$ при $\alpha_{MAXadd} = 45^\circ$. Представленные зависимости позволяют сделать вывод о том, что с увеличением как массовой толщины защищаемой поверхности, так и дополнительной защиты эффективность дополнительной защиты снижается. Наиболее эффективно можно защищать поверхности с меньшими значениями массовой толщины и меньшими значениями массовой толщины дополнительной защиты. Например, для массовой толщины защищаемой грани $\delta = 0,4$ г/см² (толщина барьера из Al $\delta_0 = 0,143$ см) эффективность $\psi = 0,03$ рад/г, а при массовой толщине дополнительной защиты $\Delta\delta = 2,0$ г/см² (толщина барьера из Al $\delta_0 = 0,714$ см) $\psi = 0,003$ рад/г, т. е. снижается на порядок.

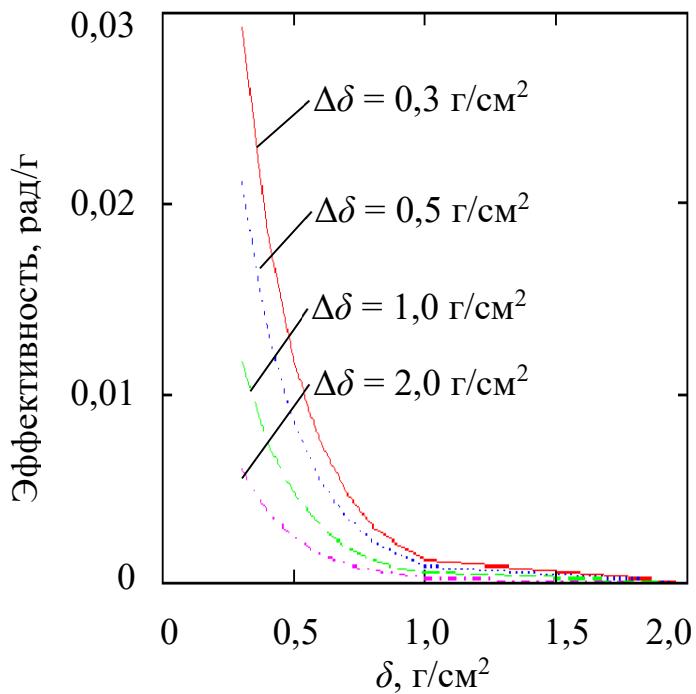


Рис. 3. Зависимость эффективности дополнительной защиты с $\alpha_{MAXadd} = 45^\circ$ от массовой толщины барьера защищаемой грани

На рис. 4 показана зависимость ЛДН (D) в защищаемой расчетной точке от половинного значения плоского угла α_{MAXadd} дополнительной защиты с массовой толщиной барьера $\Delta\delta = 1,0$ г/см² (толщина барьера из Al $\Delta\delta_0 = 0,357$ см). Видно, что при увеличении α_{MAXadd} ЛДН снижается тем больше, чем меньше массовая толщина защищаемой грани. При массовой толщине барьера защищаемой грани $\delta = 0,3$ г/см² (толщина барьера из Al $\delta_0 = 0,107$ см) и $\alpha_{MAXadd} = 45^\circ$ ЛДН снижается

примерно на порядок, а при $\delta = 1,0 \text{ г/см}^2$ (толщина барьера из Al $\delta_0 = 0,357 \text{ см}$) и $\alpha_{MAXadd} = 45^\circ$ ЛДН снижается только на единицы рад. При $\delta = 3,0 \text{ г/см}^2$ (толщина барьера из Al $\delta_0 = 1,071 \text{ см}$), применение дополнительной защиты практического не даёт снижения ЛДН.

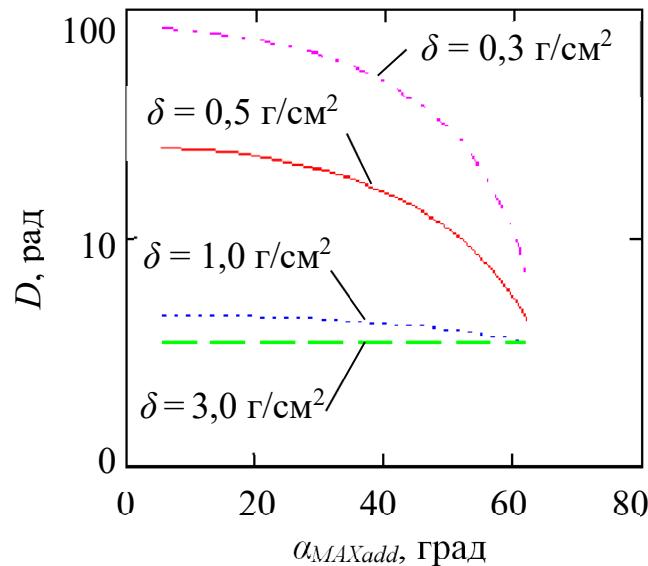


Рис. 4. Зависимость ЛДН защищённой грани от половинного значения плоского угла дополнительной защиты с массовой толщиной барьера $\Delta\delta = 1 \text{ г/см}^2$

Заключение. Разработана модель дополнительной радиационной защиты, позволяющая перейти от приближения сплошной сферы к плоской ограниченной поверхности, позволяющая использовать метод секторирования без потери точности. Проведены численные эксперименты для радиационных условий орбиты 400 км от поверхности Земли. Сформулированы конструктивно-технологические требования к дополнительной защите:

1. полный плоский угол телесного угла дополнительной защиты должен быть близким к 90° ;
2. дополнительную защиту с массовой толщиной $\Delta\delta \geq 1 \text{ г/см}^2$ можно использовать только в исключительных случаях.

Литература

1. Оптимизация массовых характеристик радиационной защиты аппаратуры космического аппарата связи, выводимого на геостационарную орбиту межорбитальным буксиrom с силовой энергетической установкой / В.В. Гончаров, А.Н. Загорков, О.В. Михеев, А.Е. Ошкин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру. 2020. Вып. 1. С. 45-48.
2. Комбаев Т.Ш. Проектирование радиационной защиты приборов космического аппарата при создании универсальных космических платформ / Т.Ш. Комбаев, М.Е. Артёмов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру. 2020. Вып. 4. С. 30-34.
3. Панюшкин А.Н. Эффективная толщина плоского экрана / А.Н. Панюшкин, Н.Н. Панюшкин, А.Г. Самойлов // Проектирование и технология электронных средств. 2019. №4. С. 38-42.

4. Панюшкин А.Н. Модель локальной дозовой нагрузки сплошной защиты с плоскими ограничивающими поверхностями / А.Н. Панюшкин, Н.Н. Панюшкин, И.П. Бирюкова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру. – 2021. – №3. – С. 11-16.

MODELING OF ADDITIONAL RADIATION PROTECTION FROM ELECTRON AND PROTON RADIATION

A.N. Panyushkin, I.P. Biryukova, N.N. Panyushkin

Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G. F. Morozov

Abstract: A model of additional radiation protection of electrical and radio components (ERC) of radioelectronic equipment (RE) operating in low Earth orbits from electron and proton radiation from the Earth's natural radiation belt (ERPБ) is considered. Numerical experiments have been carried out, and requirements for the design of effective flat additional protections have been formulated.

Keywords: additional radiation protection, local dose load, sectoring method, mathematical model, ionizing radiation of outer space, flat limited protection. Keywords string method, macromodel, ionizing radiation of outer space, local dose load, flat limited protection, continuous protection.

ПРИМЕНЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ПОЧТИ ПЕРИОДИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ИЗОБРАЖЕНИЙ ТРОПИЧЕСКИХ ЦИКЛОНОВ

А.А. Парамонов, А.В. Калач

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва
paramonov_a_a99@mail.ru, a_kalach@mail.ru

Аннотация: предложен подход к анализу данных по тропическим циклонам с применением сдвиговой функции и преобразований из декартовой плоскости в полярные координаты. Показана возможность идентификации почти периодов при заданном преобразовании исходных данных ввиду специфики структуры исследуемого объекта.

Ключевые слова: почти период, полярные координаты, анализ данных, обработка изображений, чрезвычайная ситуация, стихийные явления, тайфуны, тропические циклоны.

В настоящее время количество чрезвычайных ситуаций, вызванных природными факторами, растёт. Вызвано это, в особенности, более частным появлением масштабных природных явлений, такие как землетрясения, наводнения, ураганы и т.д. Одним из таких опасных явлений оказывается тропический циклон, представляющий собой спиралевидную, центрическую форму. Такое природное явление несёт за собой штормовые ветра и сильные осадки, которые являются ключевыми механизмами по разрушению инфраструктуры и опасностями для жизни населения. Моделирование и прогнозирование таких явлений является актуальной задачей для реализации задач принятия решений в чрезвычайных ситуациях, обеспечение раннего предупреждения и подготовки мер по противодействию.

В работе [1] представлена разработанная интегрированная математическая модель и реализующий ее программно-информационный комплекс для совместного моделирования распространения опасных факторов пожара и стихийной эвакуации людей из помещений сложной конфигурации.

В статье [2] рассматривается задача о силовом воздействии волн, имеющих конечную амплитуду, на сооружения с вертикальной гранью, в частности, на мостовые опоры. Данная задача является современной актуальной проблемой строительства на стадии проектирования с целью защиты опор мостов от возможного силового воздействия динамичной водной стихии. Наряду с проведенным теоретическим исследованием, важным прикладным аспектом, полученным авторами, является результат численного моделирования волн с возможной дальнейшей реализацией посредством современных интегрированных сред разработки программных продуктов.

Монография [3] посвящена результатам научных исследований в области совершенствования методов прогнозирования катастроф и стихийных бедствий, а именно математическим моделям прогнозирования чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера.

В рамках реализации методов почти периодического анализа был представлен доклад [4] по обработке больших данных по атмосферному давлению, где были показаны возможности почти периодического анализа для задачи прогнозирования временных рядов. Также была реализована программа, прошедшая государственную регистрацию для определения почти-периодов в эмпирических данных с упорядоченным аргументом [5].

В данной работе представлен подход к анализу спутниковых данных тропических циклонов на основе преобразования центрических структур в полярные координаты и выявления в структуре почти периодических компонент. Ввиду особенностей формы анализируемого объекта для удобного анализа и корректности получаемых результатов анализа, изображение переводилось из декартовой системы координат в полярные на основе преобразования

$$\begin{aligned}\rho(x, y) &= \sqrt{(x_c - x)^2 + (y_c - y)^2}, \\ \theta(x, y) &= \arctan \frac{y_c - y}{x_c - x},\end{aligned}\quad (1)$$

где x_c, y_c – декартовы координаты центра тайфуна; x, y – преобразуемые декартовы координаты изображения; ρ, θ – полярные координаты (длина радиус-вектора и угол).

Полученная сетка значений позволит для каждого угла анализировать значения радиус-векторов на предмет наличия почти периодических характеристик, которые определяются при помощи построения обобщённой сдвиговой функции. Для дискретного ряда значений обобщённая сдвиговая функция определяется как

$$a(\tau, \Delta t) = \frac{1}{n - \tau - 2\Delta t} \cdot \sum_{t=1}^{n-\tau-2\Delta t} \left| \ln \left(\frac{y_{t-\Delta t+\tau} \cdot y_{t+\Delta t+\tau}}{y_{t+\tau}^2} \right) - \ln \left(\frac{y_{t-\Delta t} \cdot y_{t+\Delta t}}{y_t^2} \right) \right|, \quad (2)$$

где n – общее число отсчётов функции $y(t)$; t – целые положительные и отрицательные числа, включая ноль; Δt – целое положительное число, сдвиг по аргументу; τ – целое положительное число, значения почти периодов.

Анализ срезов сдвиговых функций при различных полярных углах на предмет ярко выраженных минимумов позволит определить набор ключевых почти периодов, которые будут являться характерными для исследуемой системы.

В качестве примера работы представленного метода рассмотрим данные тропического циклона «Нанмандол». На рис. 1 представлен фрагмент динамики изменения тайфуна в чёрно-белом формате.

Отталкиваясь от помеченного центра тайфуна, выполняем идентификацию координат изображения в полярных координатах в виде пары радиус-вектор и полярный угол согласно (1). В результате отображения координатной полярной сетки получаем изображение тайфуна с рис. 1 в виде, представленном на рис. 2.

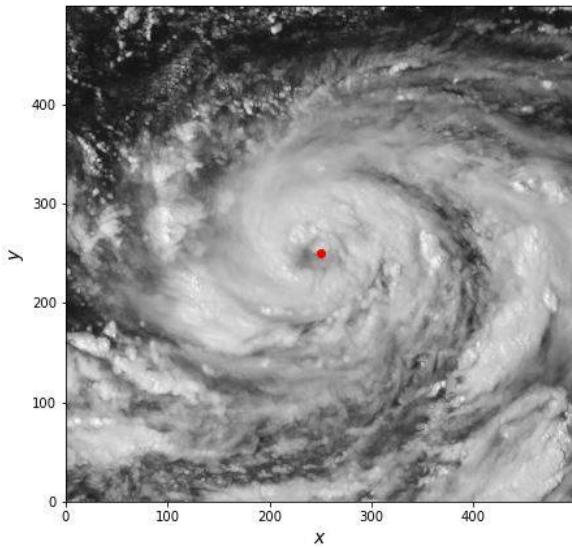


Рис. 1. Фрагмент динамики тайфуна «Нанмандол» в чёрно-белом формате

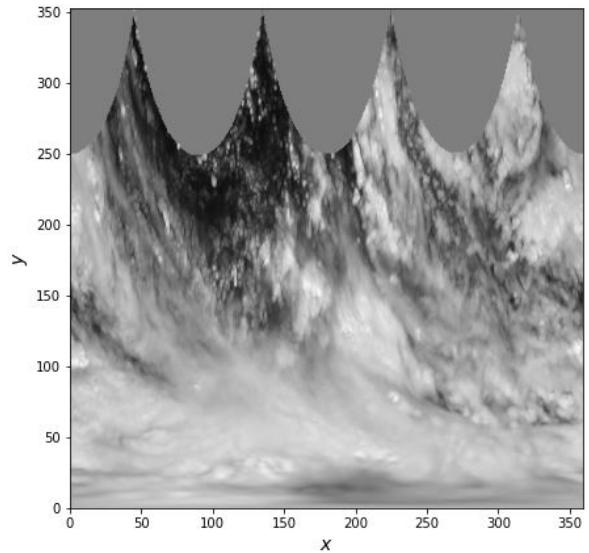


Рис. 2. Данные рис. 1 в полярных координатах

По горизонтальной оси отложены значения углов, а по вертикальной – значения радиус-векторов. Для применения аппарата обобщённой сдвиговой функции (2), делаем вертикальный срез значений, подавая в анализ набор значений радиус-векторов при фиксированном угле. Результат среза обобщённой сдвиговой функции представлен на рис. 3.

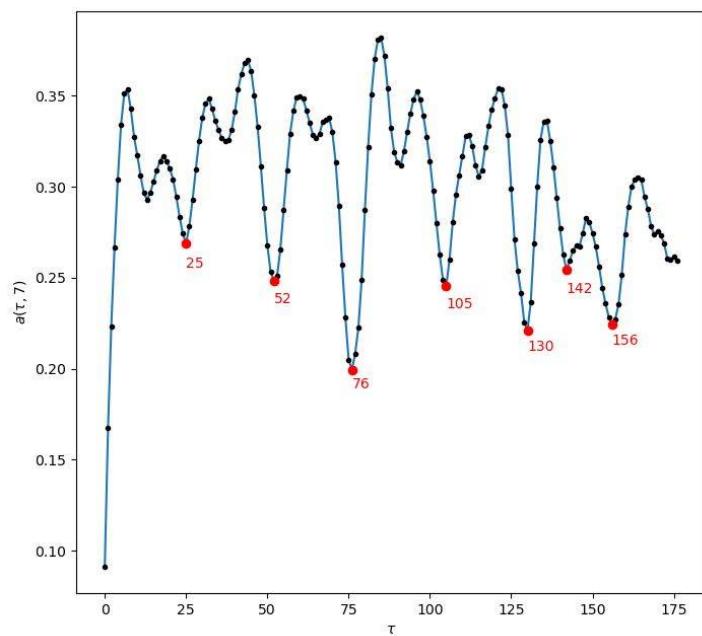


Рис. 3. Срез обобщённой сдвиговой функции для данных угла 45°

Анализируя набор результатов обобщённых сдвиговых функций для представленных значений радиус-векторов при каждом угле, получаем возможность оценки значений почти периодов на основе выявленных характерных минимумов.

Таким образом, подводя итоги работы, можно сделать вывод о возможности применения почти периодического анализа на основе обобщённой сдвиговой функции для центрических структур с использованием аппарата преобразования структуры объекта из декартовой системы координат в полярную систему. Данный подход позволяет анализировать данные центрической структуры для выявления в таких системах почти периодических зависимостей.

Литература

1. Цвиркун А.Д. Система интегрированного моделирования распространения опасных факторов пожара и эвакуации людей из помещений / А.Д. Цвиркун, А.Ф. Резчиков, А.А. Са-марцев [и др.] // Автоматика и телемеханика. – 2022. – № 5. – С. 26-42. – DOI 10.31857/S0005231022050038.
2. Волков Ю.А. О численном моделировании в задачах волновой динамики / Ю.А. Волков, С.И. Перегудин, Н.Л. Щербакова // Специальная техника и технологии транспорта. – 2022. – № 15. – С. 308-317.
3. Акимов В.А. Моделирование чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера / В.А. Акимов, М.В. Бедило, Ю.А. Шишков [и др.]. – Москва: Всероссийский научно-исследовательский институт по проблемам гражданской обороны и чрезвычайных ситуаций МЧС России, 2023. – 144 с. – ISBN 978-5-93970-306-2.
4. Парамонов А.А. Современные аспекты анализа больших данных с упорядоченным аргументом / А.А. Парамонов, Т.Е. Смоленцева, А.В. Калач // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: сборник трудов Международной научной конференции, Воронеж, 04-06 декабря 2023 года. – Воронеж: Общество с ограниченной ответственностью "Вэлборн", Издательство «Научно-исследовательские публикации», 2024. – С. 609-613.
5. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024663550 Российской Федерации. «Программа для определения почти-периодов в эмпирических данных с упорядоченным аргументом на основе сдвиговой функции»: № 2024661738: заявл. 21.05.2024 : опубл. 07.06.2024 / Б.А. Крынецкий, В.А. Данилова, А.А. Парамонов [и др.]; заявитель Федеральное казенное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский институт Федеральной службы исполнения наказаний».

APPLICATION OF SPATIAL TRANSFORMATIONS TO SOLVING THE PROBLEM OF NEAR-PERIODIC ANALYSIS OF IMAGES OF TROPICAL CYCLONES

A.A. Paramonov, A.V. Kalach

MIREA - Russian Technological University, Moscow

Abstract: an approach to the analysis of tropical cyclone data using a shift function and transformations from the Cartesian plane to polar coordinates is proposed. The possibility of identifying near-periods with a given transformation of the initial data shown due to the specific structure of the object under study.

Keywords: near period, polar coordinates, data analysis, image processing, emergency, natural phenomena, typhoons, tropical cyclones.

МОДЕЛЬ ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА РАСПОЗНАВАНИЯ ДЕФЕКТОВ В СИСТЕМАХ НЕРАЗРУШАЮЩЕЙ ДИАГНОСТИКИ

А.В. Седов, О.О. Пушкарева

Южно-Российский государственный политехнический университет
имени М.И. Платова, Новочеркасск
kulikova058@mail.ru

Аннотация: рассматриваются принцип реализации цифрового двойника распознавания скрытых дефектов в механических системах при неразрушающей диагностики. Представлены реализуемые особенности обработки данных и машинного обучения, используемые для анализа диагностических сигналов. Приводятся результаты физических и вычислительных экспериментов с использованием цифрового двойника механической конструкции, обеспечивающие эффективное обнаружение скрытых дефектов. Выделяются преимущества и перспективы внедрения цифрового двойника в области диагностики и дефектоскопии.

Ключевые слова: цифровой двойник, неразрушающая диагностика, распознавание дефектов, машинное обучение, обработка данных.

Неразрушающая диагностика является важным инструментом для контроля состояния промышленных объектов, позволяя выявлять дефекты на ранних стадиях развития, уменьшая затраты на ремонт и предотвращая аварии. В последнее время ключевую роль в развитии этих технологий играет концепция цифрового двойника. Цифровой двойник представляет собой виртуальную модель физического объекта, которая обновляется в реальном времени на основе данных, поступающих с датчиков и систем мониторинга.

Основные составляющие виртуальной модели реализуют моделирование скрытых дефектов на основе реализации слабого неразрушающего воздействия на объект в системах неразрушающей диагностики, используя математические модели обработки диагностических сигналов, виртуальную модель, а также алгоритмы идентификации и машинного обучения. Эта общая виртуальная модель позволяет создать обучаемую систему, способную адаптироваться к новым типам дефектов и обеспечивать высокую точность диагностики.

Цифровой двойник позволяет реализовать обучение системы на конкретные типы конструкций и дефектов без проведения физических натурных экспериментов с использованием точных конечно-элементных математических моделей объектов, реализуемых в пакетах моделирования типа ANSYS.

Использование цифрового двойника в подобных системах позволяет проводить прогнозирование повреждений, оценивать состояние объектов в реальном времени и выявлять аномалии, указывающие на возможные дефекты. Важным аспектом является интеграция методов машинного обучения и проведения вычислительных экспериментов для автоматизации процесса анализа данных, что значительно увеличивает скорость и точность диагностики [1-3].

Основой для распознавания дефектов является подсистема первичной обработки данных, поступающих с сенсоров. Эти данные могут представлять собой

диагностические сигналы с объекта, представленные в форме временных рядов, спектральных, компонентных и иных характеристик сигналов.

Один из ключевых методов анализа сигналов – это спектральный анализ, позволяющий выявить скрытые компоненты в частотной области, идентифицирующие дефект. Так, для сигнала $x(t)$, полученного от датчика, реализуется преобразование Фурье, определяемое выражением:

$$X(f) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-2\pi i f t} dt,$$

где $X(f)$ — это спектр сигнала с частотными оставляющими, соответствующими дефектам, ударным воздействиям или иным аномалиям в работе объекта.

Для уточненного анализа и распознавания диагностический сигнал разлагается также на собственные ортогональные компоненты с помощью метода компонентных разложений и декомпозиционного подхода моделирования, что позволяет оценить временные изменения частотных характеристик, что особенно полезно для анализа функций отклика при кратковременных ударных воздействиях [2].

Применяемые в цифровом двойнике подходы обеспечивают требуемую точность распознавания дефектов на основе анализа и обработки механических колебаний измеряемого отклика-реакции объекта на слабое неразрушающее воздействие. Для этого используется оптимальное ортогональное разложение сигналов в базисе, настраиваемом по обучающей выборке. Главным преимуществом такого подхода является адаптивное обучение ортогонального базиса в соответствии с критериями наилучшего распознавания дефектов.

Для проведения физических и вычислительных экспериментов по распознаванию дефектов с использованием цифрового двойника рассматривалась балочная конструкция с дефектами типа «полость», расположенными в разных местах конструкции. Математическая модель исследуемой конструкции реализовывалась в пакете моделирования ANSYS. С помощью данной модели формировалась обучающая выборка диагностических сигналов – функций откликов для системы распознавания дефекта, работа этой части цифрового двойника корректировалась по данным физического эксперимента.

Возникшие колебания $f(t)$, $t \in [0, T_p]$, фиксировались тензометрическим датчиком S в течение временного интервала T_p , достаточного для прихода отраженных волн от противоположного конца конструкции. На рисунке приводятся графики функций откликов для различной величины дефекта типа «полость» конструкции при фиксированном ее расположении.

Результаты эксперимента показывают, что на начальном интервале графики функций откликов для всех типов дефектов совпадают. Различие появляется в момент времени, когда поверхностная волна, отраженная от дефекта, начинает регистрироваться датчиком. В результате эксперимента мы видим, что чем меньше дефект, тем меньше и высота колебаний. Эксперимент показал, что размер и наличие дефекта идентифицируется изменением функции отклика.

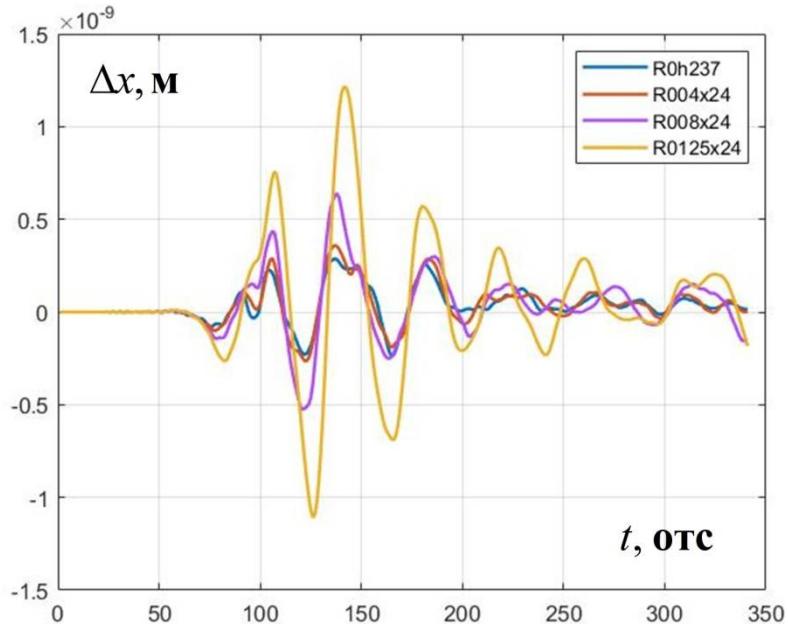


Рисунок. График функции откликов для различных радиусов дефектов

Дефект радиусом 12,5 мм имел самый большой радиус из экспериментальных образцов (R0125x24), поэтому ответный сигнал в этом случае самый сильный и несет наибольшую информацию о дефекте. По мере уменьшения радиуса дефекта (8 мм, 4 мм) ответный сигнал ослабевал с менее выраженными характеристиками дефекта. Однако даже в этих случаях информационного содержания сигнала достаточно для распознавания наличия дефекта.

Проведенные эксперименты показали, что использование предлагаемого настраиваемого ортонормированного базиса для пространственной реализации функции распознавания дефектов дает достаточную возможность идентифицировать тип дефекта, его размер, глубину залегания и расположение в конструкции.

Использование описанного подхода позволяет создавать адаптивные комплексы низкочастотного обнаружения дефектов в вытянутых прямоугольных механических конструкциях с дефектами различного типа.

Для автоматизации обучения модуля распознавания дефектов использовалась точная конечно-элементная модель объекта диагностики, реализованная в пакете ANSYS и позволяющая формировать обучающие выборки функций откликов для различных размеров и размещений дефектов без проведения физических экспериментов на основе математического исследования цифрового двойника. Использование этого принципа «цифрового двойника» позволило эффективно настраивать (обучать) систему неразрушающей диагностики на различные типы конструкций и особенности определяемых дефектов.

Литература

- Седов А.В. Цифровой двойник для настройки алгоритма тестирования и обучения интеллектуальной системы неразрушающей дефектоскопии несущей конструкции / А.В. Седов, О.О. Пушкарева // Научные известия. – 2022. – № 27. – С. 291-293.

2. Седов А.В. Моделирование объектов с дискретно-распределенными параметрами: декомпозиционный подход. – М.: Наука, 2010. – 438 с.
3. Кокорев Д.С. Цифровые двойники: понятие, типы и преимущества / Д.С. Кокорев, А.А. Юрин // Colloquium-journal. – 2019. – №10 (34).

DIGITAL TWIN MODEL FOR DEFECT RECOGNITION IN NON-DESTRUCTIVE DIAGNOSTICS SYSTEMS

A.V. Sedov, O.O. Pushkareva

South Russian State Polytechnic University (NPI) named after M.I. Platov, Novocherkassk

Abstract: the principle of implementing a digital twin for recognizing hidden defects in mechanical systems during non-destructive diagnostics is considered. The implemented features of data processing and machine learning used to analyze diagnostic signals are presented. The results of physical and computational experiments using a digital twin of a mechanical structure are presented, ensuring effective detection of hidden defects. The advantages and prospects for implementing a digital twin in the field of diagnostics and flaw detection are highlighted.

Keywords: digital twin, non-destructive diagnostics, defect recognition, machine learning, data processing.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЦЕННОСТИ НЕФТЕГАЗОВЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ НА ОСНОВЕ ПРИРОДНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ

Т.Р. Рязанцев

Российский экономический университет имени Г.В. Плеханова, Москва
timofeyruaz@gmail.com

Аннотация: Работа посвящена разработке прогнозной модели, способной оценивать объемы добычи углеводородов на основе комплекса исходных показателей месторождений. Главной целью работы является проверка осуществимости подобного прогноза при использовании имеющейся информационной базы.

Ключевые слова: прогнозирование запасов, машинное обучение, нефтегазовые месторождения, веб-приложение, экономическая оценка.

Прогнозирование ценности месторождений газа/нефти на основе природных показателей остается одной из ключевых задач в геологии и ресурсном менеджменте. Точная оценка потенциала залежей углеводородов позволяет не только оптимизировать процесс разведки и добычи, но и минимизировать финансовые риски, связанные с освоением новых участков. В условиях растущей конкуренции и ужесточения экологических норм особую значимость приобретают методы, способные достоверно определить экономическую целесообразность разработки месторождения на ранних этапах.

Современные подходы к прогнозированию объединяют достижения в области геологии, геофизики и анализа данных. Однако даже при наличии высокоточной аппаратуры и вычислительных алгоритмов интерпретация природных параметров зачастую требует комплексного подхода. Такие факторы, как неоднородность пород, изменчивость пластовых условий и погрешности измерений, могут существенно искажать итоговые результаты. Это подчеркивает необходимость не только совершенствования технических средств, но и разработки адаптивных методик оценки.

В докладе рассматриваются ключевые факторы, определяющие продуктивность месторождений, и существующие подходы к их анализу, а также применение вычислительных методов для обработки геолого-геофизических данных и построения прогнозных моделей.

Целью данной работы является анализ природных показателей, влияющих на ценность месторождений углеводородов, и разработка практических инструментов для их прогнозирования. В ходе исследования были рассмотрены как традиционные геологические методы, так и современные технологии обработки данных, включая элементы машинного обучения. Полученные результаты позволяют сформировать рекомендации по повышению точности оценок и оптимизации процессов принятия решений в нефтегазовой отрасли. Основной целью работы выступала проверка осуществимости подобного прогноза при использовании имеющейся информационной базы.

Формирование датасета и предварительная обработка данных

На первом этапе исследования был собран первичный датасет, включающий 100 нефтяных месторождений. В процессе предварительного анализа данных выяснилось, что 30 месторождений содержат значительное количество пропущенных значений по ключевым параметрам, что делает их непригодными для последующего анализа. В связи с этим было принято решение исключить эти месторождения из выборки. Окончательный датасет включает 70 месторождений с полными или практически полными наборами данных.

По данным, найденным в открытых источниках, было создано две таблицы, первая для прогнозирования объемов нефти по геолого-физическими характеристикам месторождений, вторая для прогнозирования прибыли по физико-экономическим показателям [1].

№	Название месторождения	Страна расположения	Пористость коллектора (%)	Проницаемость пласта (мД, миллидарси)	Мощность нефтеносного пласта (метры)	Тип коллектора	Температура пласта (°C)	Площадь пласта (км ²)	Объем нефти (млрд барр)
1	Гавар	Саудовская Аравия	35%	1150	100	Карбонатный	78	8400	72,86
2	Большой Бурган	Кувейт	27,5%	4000	110	Терригенный	200	920	75,29
3	Сафания-Хафдки	Саудовская Аравия	26%	600		Карбонатный	125		41,75
4	Румайла	Ирак	22%	500	96,5	Терригенный	86	1600	40,99
5	Ахваз	Иран	15%	125	1215	Карбонатный	180	251	18,22
6	Кантарел	Мексика	10%	55	300	Карбонатный	100	181	43,26
7	Самотлор	Россия	24%	25	27,5	Терригенный	89	3000	20,49
8	Тенгиз	Казахстан	10,5%	2	1600	Карбонатный	105	2500	23,53
9	Кашаган	Казахстан	7,2%	2	900	Карбонатный	100	820	45,54

Рис. 1. Часть данных по геолого-физическими характеристикам

Для прогнозирования объема нефти были выбраны такие показатели, как страна расположения, пористость коллектора (%), проницаемость пласта (миллидарси), мощность нефтеносного пласта (м), тип коллектора, температура пласта (°C), площадь пласта (км²).

Для прогнозирования прибыли были выбраны следующие физико-экономические показатели месторождений: страна расположения, плотность нефти (API, г/см³), давление в пласте (МПа), глубина залегания.

№	Название месторождения	Страна расположения	Плотность нефти (г/см ³)	Давление в пласте (МПа)	Глубина залегания макс (м)	Ожидаемый доход (млрд. дол.)
1	Гавар	Саудовская Аравия	0,85	22,5	3000	1825,97
2	Большой Бурган	Кувейт	0,87	22,5	2600	1886,84
3	Сафания-Хафджи	Саудовская Аравия	0,89	18,5	3400	1046,13
4	Румайла	Ирак	0,86	36,3	3800	1027,11
5	Ахваз	Иран	0,865	33,1	3100	456,49
6	Кантарелл	Мексика	0,9		4300	1084,17
7	Самотлор	Россия	0,85	19,7	2600	513,55
8	Тенгиз	Казахстан	0,79	84,24	5400	589,64
9	Кашаган	Казахстан	0,785	80	4200	1141,23
10	Агаджари	Иран	0,85	28,2	1550	361,39
11	Марун	Иран	0,86	34,5	3300	570,62
12	Гачсаран	Иран	0,87	31,2	2550	989,07

Рис. 2. Часть данных по физико-экономическим показателям

Все данные были найдены в открытых источниках, кроме ожидаемого дохода, общих расходов и КИН, так как они не публикуется из-за коммерческой/государственной тайны. Поэтому было решено ожидаемый доход считать по формуле:

$$Y_{\text{общ}} = V \cdot p \cdot k_{\text{ин}},$$

где V – объем нефти в месторождении, p – цена 1 барреля в долларах, $k_{\text{ин}}$ – коэффициент извлечения нефти. Цена рассчитывалась как среднее ежегодных значений за последние 20 лет. Получившееся значение равно 71,6 долл. за баррель. Коэффициент извлечения нефти было решено взять средним по миру – 35%.

Так как данные по расходам нам неизвестны, то для вычисления общей прибыли месторождения за все время было решено из дохода вычитать предположительные затраты по каждому показателю [1].

Плотность нефти: чем больше плотность нефти, тем тяжелее ее добывать. Также менее плотная нефть дороже и ее легче продать, так как она дает больше топлива при том же объеме. Будем учитывать все это в k_p – коэффициенте увеличения расходов за счет плотности нефти (ρ – плотность нефти в г/см³):

$\rho \leq 0,85$ – легкая нефть, дополнительные технологии не требуются, продать нефть очень легко, $k_p = 1$;

$0,85 < \rho \leq 0,91$ – средняя плотность, могут потребоваться дополнительные технологии, спрос чуть ниже, $k_p = 1,5$;

$\rho > 0,91$ – тяжелая нефть, требуются дополнительные технологии, хуже качество, свой рынок сбыта, $k_p = 2,5$.

Давление в пласте: чем выше давление в пласте, тем легче добывать нефть и тем больше коэффициент извлечения нефти. Будем учитывать это в s_P – коэффициенте увеличения расходов за счет давления в пласте (P – давление в МПа):

$P \geq 50$ – высокое давление, легкая добыча, высокий $k_{\text{ин}}$, $s_P = 1$;

$20 \leq P < 50$ – среднее давление, более тяжелая добыча, средний $k_{\text{ин}}$, $s_P = 2$;

$P < 20$ – низкое давление, необходимо оборудование для нагнетания давления, низкий $k_{\text{ин}}$, $s_P = 4$.

Глубина залегания: чем глубже находится месторождение, тем тяжелее его добывать, расходы повышаются. Введем глубину залегания месторождения h , где каждый метр приравнивается к 500 долларам (среднее по миру), и за каждые 1000 метров будем добавлять коэффициент усложнения $m_h = 1,2$, так как для большей глубины требуется более дорогое оборудование и возникает больше расходов. Тогда затраты на добычу в зависимости от глубины примут вид:

$$C_{\text{добыча}} = C_{\text{баз}} + (h \cdot 500) \cdot 1,2^{\left[\frac{h}{1000}\right]},$$

где $C_{\text{баз}}$ – базовые затраты на добычу.

Получим формулу для расчета общих расходов:

$$C_{\text{общ}} = k_p \cdot s_P \cdot (C_{\text{баз}} + (h \cdot 500) \cdot 1,2^{\left[\frac{h}{1000}\right]}).$$

Тогда формула для расчета прибыли:

$$P = Y_{\text{общ}} - C_{\text{общ}} = V \cdot p \cdot k_{\text{ин}} - k_p \cdot s_P \cdot (C_{\text{баз}} + (h \cdot 500) \cdot 1,2^{\left[\frac{h}{1000}\right]}).$$

Так как пропусков в первой таблице не так много, то было решено заполнить их с помощью медианного значения.

Название месторождения	Страна расположения	Пористость коллектора (%)	Проницаемость пласта (мД)	Мощность нефтеносного пласта (м)	Тип коллектора	Температура пласта (°C)	Площадь пласта (км2)	Объем нефти (млрд барр)
Гавар	Саудовская Аравия	0,35	1150	100	Карбонатный	78	8400	72,864
Большой Бурган	Кувейт	0,275	4000	110	Терригенный	200	920	75,2928
Сафания-Хафджи	Саудовская Аравия	0,26	600	98,5	Карбонатный	125	675	41,745
Румайла	Ирак	0,22	500	96,5	Терригенный	86	1600	40,986
Ахваз	Иран	0,15	125	1215	Карбонатный	180	251	18,216
Кантарел	Мексика	0,1	55	300	Карбонатный	100	181	43,263
Самотлор	Россия	0,24	25	27,5	Терригенный	89	3000	20,493
Тенгиз	Казахстан	0,105	2	1600	Карбонатный	105	2500	23,529
Кашаган	Казахстан	0,072	2	900	Карбонатный	100	820	45,54
Агаджари	Иран	0,14	1000	98,5	Карбонатный	77	388,5	14,421
Марун	Иран	0,125	400	350	Карбонатный	105	350	22,77
Гачсаран	Иран	0,129	55	480	Карбонатный	105	200	39,468
Боливар-Костал	Венесуэла	0,15	800	960	Терригенный	110	3500	62,997

Рис. 3. Часть полученного датасета с заполненными пропусками

Для корреляционного анализа тип коллектора нужно перевести в числовой вид, тогда «Карбонатный» возьмём за 1, а «Терригенный» за 0.

На рис. 4 представлены результаты анализа корреляций между ключевыми параметрами, такими как пористость коллектора, проницаемость пласта, мощность нефтеносного пласта, тип коллектора, температура пласта, площадь пласта и объем нефти.



Рис. 4. Матрица корреляций между параметрами

На основе матрицы корреляций были выявлены следующие значимые взаимосвязи.

Пористость коллектора: наибольшая положительная корреляция наблюдается с проницаемостью пласта (0.31), что указывает на взаимосвязь между способностью коллектора содержать флюиды и его способностью пропускать их. Слабая отрицательная корреляция с мощностью пласта (-0.17) и типом коллектора (-0.23) может свидетельствовать о влиянии геологических условий на пористость [2, 3].

Проницаемость пласта: помимо связи с пористостью, проницаемость положительно коррелирует с температурой пласта (0.28) и объемом нефти (0.25), что подчеркивает роль этих параметров в фильтрационных свойствах пласта.

Мощность нефтеносного пласта: наибольшая корреляция наблюдается с площадью пласта (0.54), что логично, так как увеличение мощности часто сопровождается расширением площади. Отрицательная корреляция с объемом нефти (-0.013) требует дополнительного изучения, так как значение близко к нулю.

Тип коллектора: слабая положительная корреляция с мощностью пласта (0.17) и температурой (0.21) может указывать на зависимость типа коллектора от этих факторов.

Температура пласта: сильная положительная корреляция с объемом нефти (0.55) свидетельствует о том, что повышенная температура может способствовать увеличению запасов нефти.

Площадь пласта: корреляция с мощностью пласта (0.54) подтверждает взаимосвязь между размерами пласта и его толщиной. Слабая положительная корреляция с объемом нефти (0.21) указывает на влияние площади на запасы.

Объем нефти (млрд барр): наибольшая корреляция с температурой пласта (0.55) и проницаемостью (0.25) подчеркивает важность этих параметров для оценки запасов.

Выберем основные предикторы для последующей модели:

- температура пласта;
- проницаемость пласта;
- площадь пласта.

Для дополнительного поиска факторов, влияющих на объем нефти, проверим факторы из таблицы с физико-экономическими показателями (рис. 5).

Наибольшая корреляция наблюдается с плотностью нефти (0.30) – умеренная положительная связь. Это означает, что более плотная нефть (тяжелая) может ассоциироваться с большими запасами.

Слабая связь с давлением в пласте (0.10) и глубиной залегания (0.07) – эти параметры практически не влияют на объем нефти в данной выборке [2].

Получаем окончательный список предикторов:

- плотность нефти;
- температура пласта;
- проницаемость пласта;
- площадь пласта.

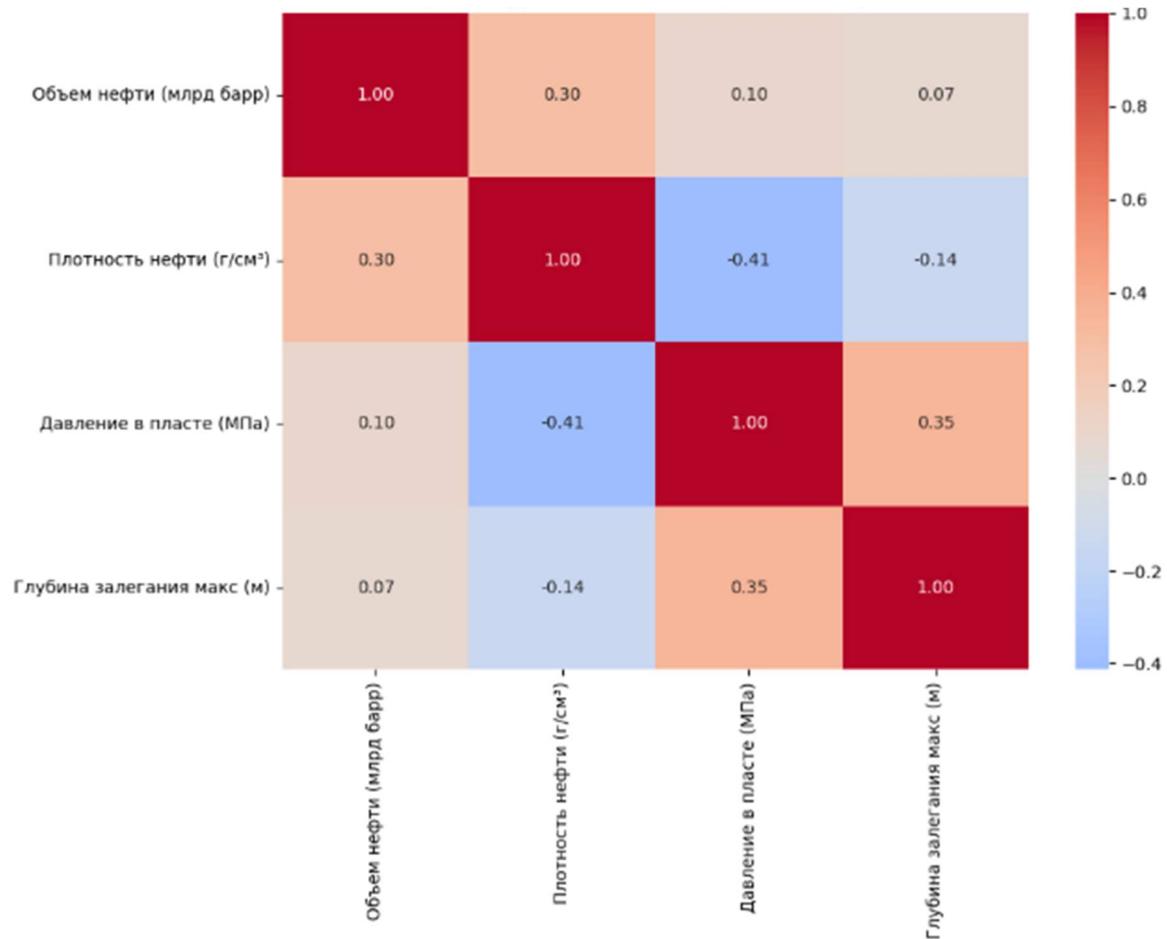


Рис. 5. Матрица корреляций с показателями из второй таблицы

Составим новую таблицу только со статистически важными факторами:

Название месторождения	Плотность нефти (г/см³)	Проницаемость пласта (мД)	Температура пласта (°C)	Площадь пласта (км²)	Объем нефти (млрд барр)
Гавар	0,85	1150	78	8400	72,864
Большой Бурган	0,87	4000	200	920	75,2928
Сафания-Хафджи	0,89	600	125	675	41,745
Румайла	0,86	500	86	1600	40,986
Ахваз	0,865	125	180	251	18,216
Кантарел	0,9	55	100	181	43,263
Самотлор	0,85	25	89	3000	20,493
Тенгиз	0,79	2	105	2500	23,529
Кашаган	0,785	2	100	820	45,54
Агаджари	0,85	1000	77	388,5	14,421
Марун	0,86	400	105	350	22,77
Гачсаран	0,87	55	105	200	39,468
Боливар-Костал	0,93	800	110	3500	62,997

Рис. 6. Часть таблицы с ключевыми показателями

Полученные данные уже можно использовать для построения модели предсказания объемов нефти.

Построение и валидация моделей прогнозирования объема нефти

Для построения ML-моделей использовался язык программирования Python и основные библиотеки для работы с данными:

- NumPy – для эффективных вычислений с многомерными массивами;
- Pandas – обработка и анализ табличных данных (DataFrame);
- Matplotlib & Seaborn – визуализация данных;
- SciPy – научные вычисления и статистика [3].

Модель, полученная путем линейной регрессии (рис. 7):

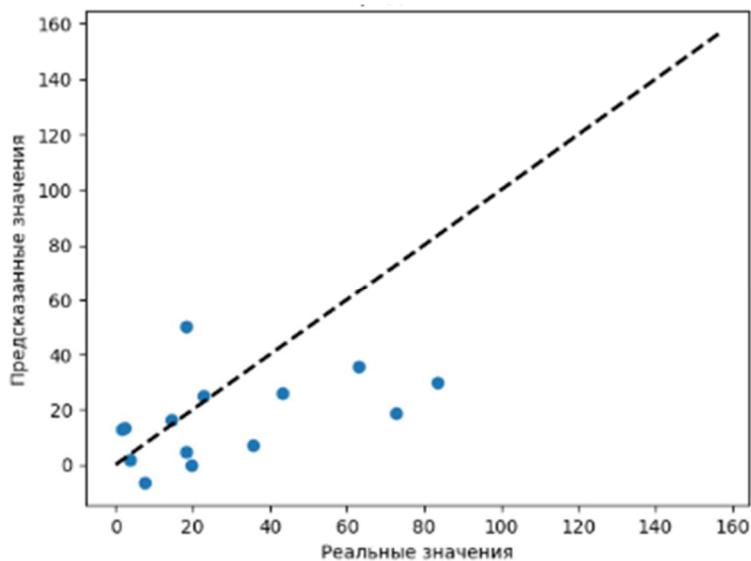


Рис. 7. Предсказанные и реальные значения

Видим, что данные плохо соответствуют линейной зависимости. Рассмотрим более сложные модели для прогнозирования объема нефти.

Метод опорных векторов (рис. 8):

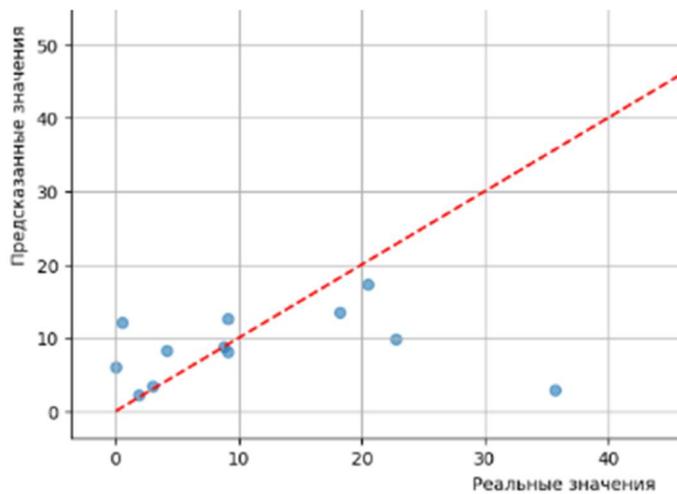


Рис. 8. Визуализация результатов работы модели

Из-за большой вариативности данных, точность модели очень низкая, рассмотрим другие методы построения моделей.

Деревья решений и Random Forest (рис. 9-10).

Полученные результаты:

Decision Tree: $R^2 = 0,2742$.

Random Forest: $R^2 = 0,1496$.

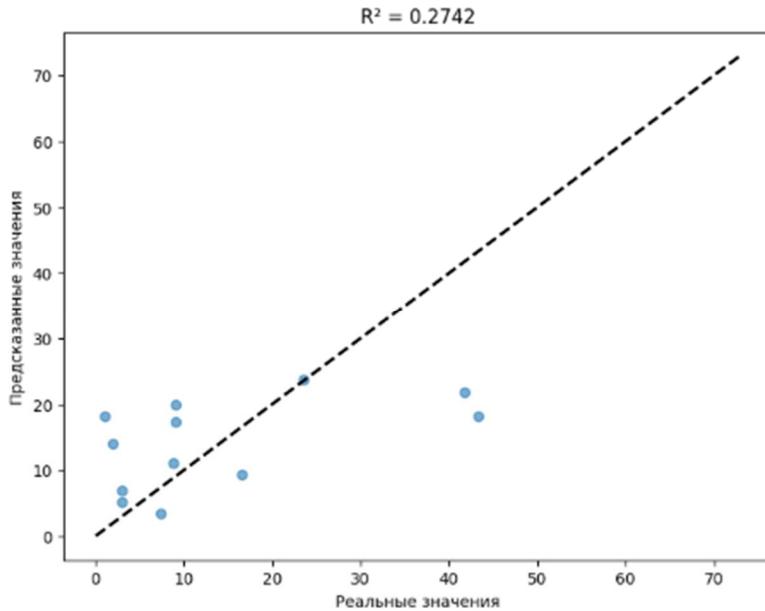


Рис. 9. Сравнение значений модели дерева решений

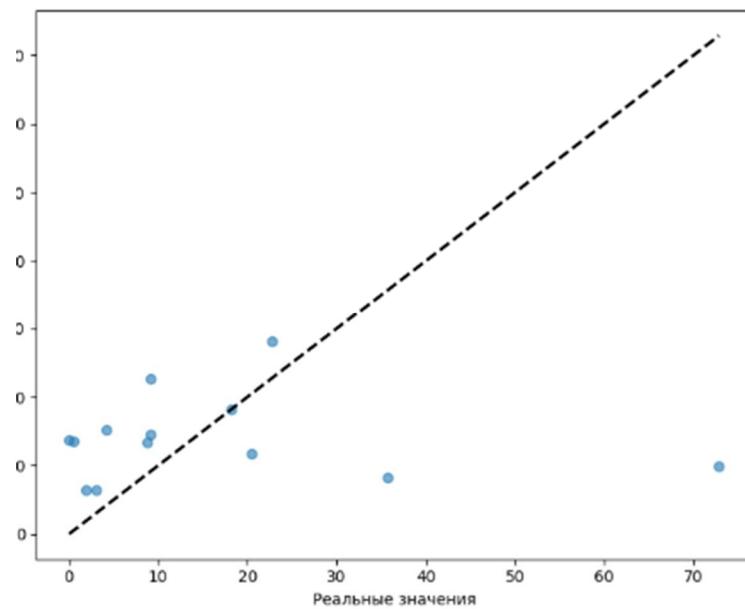


Рис. 10. Сравнение значений модели Random Forest

Коэффициент детерминации R^2 получился небольшим из-за того, что целевая переменная имеет сложное распределение. Объём нефти имеет крайне неравномерное распределение (например, несколько гигантских месторождений и много мелких), модели могут давать плохие прогнозы. Поэтому придется логарифмировать целевую переменную и использовать градиентный бустинг.

XGBRegressor с применением логарифмирования (рис. 11) [3].

Коэффициент детерминации R^2 составил 0.61, что свидетельствует о том, что модель объясняет 61% вариативности запасов нефти.

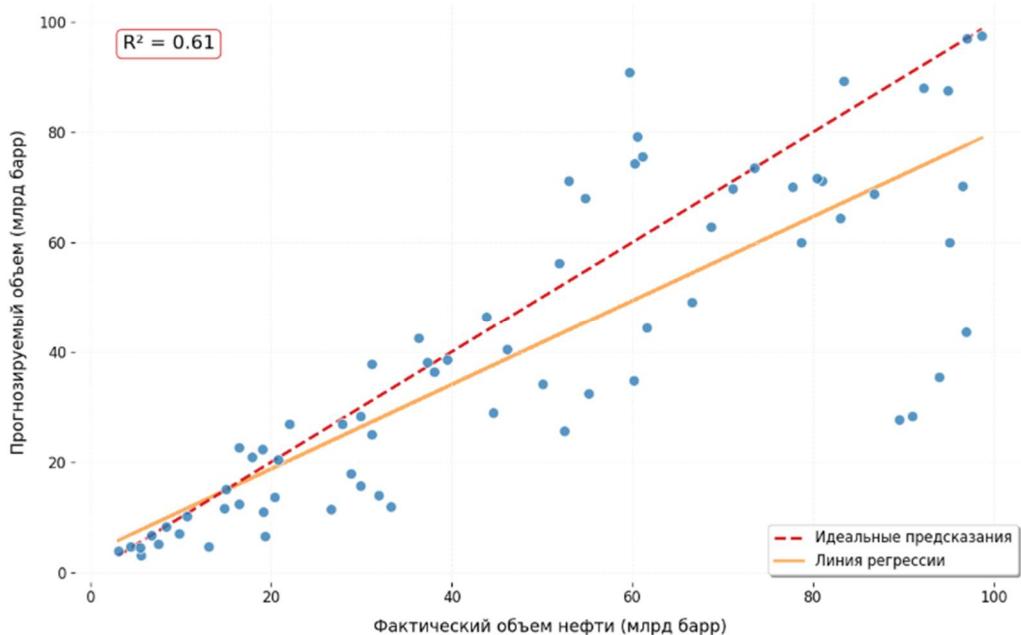


Рис. 11. Сравнение реальных и прогнозируемых значений

Точки на графике демонстрируют умеренную близость к линии идеальных предсказаний, что соответствует ожиданиям для данной сложности задачи.

Наибольшая точность наблюдается для месторождений маленького и среднего размеров (< 70 млрд барр), где большинство точек расположено близко к линии идеальных значений.

Небольшой разброс точек в области высоких (> 80 млрд барр) значений отражает естественные ограничения модели для экстремальных случаев.

Линия регрессии имеет наклон близкий к идеальному, что подтверждает отсутствие систематической ошибки в прогнозах.

Для ввода параметров и расчета дохода, расхода и прибыли был создан веб-интерфейс (рис. 12).

Расчет экономических показателей нефтяного месторождения

Плотность нефти (г/см³) *

Проницаемость пласта (мД) *

Температура пласта (°C) *

Площадь пласта (км²) *

Глубина залегания (м) *

Давление в пласте (МПа) *

Плотность нефти (г/см³) *

Базовые затраты (млн. дол.)

[Рассчитать прибыль, доход и расход](#)

Рис. 12. Интерфейс веб-страницы

При вводе базовых затрат на сооружение техники вокруг месторождения ($C_{баз}$) дадим возможность пользователю выбрать – вводить значение вручную или оставить приближенное – 2 млн. долл.

Запускаем скрипт и смотрим на результат (рис. 13):

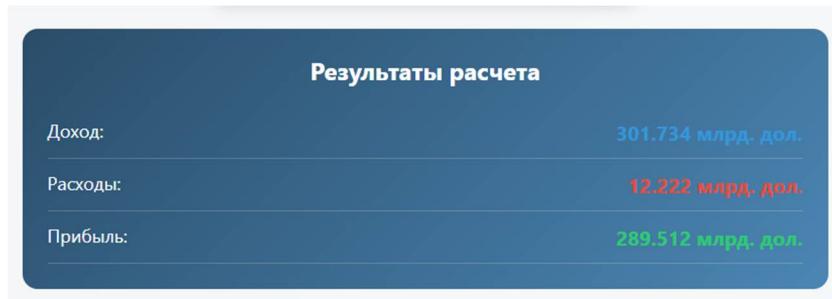


Рис. 13. Полученные результаты

Заключение

Работа посвящена разработке прогнозной модели, способной оценивать объемы добычи нефти на основе комплекса исходных показателей. Результаты практических расчетов, однако, свидетельствуют о том, что добиться требуемой точности предсказаний в рамках текущих условий не представилось возможным. Данный вывод подтверждается слабыми взаимосвязями, выявленными между прогнозируемым объемом нефти и предложенными факторами-предикторами, а также значительными погрешностями итоговых оценок модели. Анализ указывает на недостаточную предсказательную силу отобранных входных переменных в существующем формате и количестве.

Несмотря на скромные итоговые метрики, выполненное исследование обладает несомненной практической значимостью. Был успешно апробирован полный цикл создания прогнозного инструмента, включая этапы подготовки данных, обучения алгоритма и последующей верификации результатов. Практика четко обозначила основные барьеры: низкую информативность текущих параметров и дефицит исходных сведений. Полученная модель, даже при ее ограниченной точности, формирует важный базис для дальнейших усовершенствований и сравнений.

Для кардинального улучшения качества прогнозов и повышения прикладной ценности модели предлагается реализовать ряд мер. Первостепенное значение имеет включение в анализ новых факторов, демонстрирующих более тесную взаимосвязь с целевым показателем – объемом добычи. В качестве перспективных могут рассматриваться детализированные результаты геофизических исследований пластов, операционные параметры разработки, характеристики геологического строения, технические показатели эксплуатации скважин, а также исторические данные о добыче.

Не менее важным направлением является расширение и повышение качества исходного массива информации. Необходима планомерная работа по накоп-

лению данных за более продолжительный ретроспективный период. Особое внимание следует уделить совершенствованию методик сбора и контроля достоверности измерений, прежде всего, ключевого прогнозируемого параметра. Также целесообразно изучить возможности привлечения данных из сопутствующих информационных систем и источников.

Существенный прирост практической полезности может дать расширение спектра решаемых задач. Наряду с прогнозированием объемов добычи (определенная доходную часть), критически важно развивать модели для оценки ключевых статей затрат. Прогнозирование расходов на электроэнергию, проведение ремонтных работ, закупку реагентов или организацию логистики позволит строить комплексные экономические сценарии и объективнее оценивать рентабельность операций.

Дополнительный потенциал улучшений связан с апробацией альтернативных алгоритмов машинного обучения, способных эффективнее выявлять сложные зависимости в обогащенных данных, и с углубленной проработкой признакомого пространства для выявления скрытых закономерностей.

Литература

1. Баранников А.Г. Прогнозирование и поиски месторождений полезных ископаемых: учебное пособие. – Екатеринбург: УГГА, 1999. – 141 с.
2. Кононов Ю.С. Соотношение основных принципов прогнозирования нефтегазоносности и геологоразведочного процесса / Ю.С. Кононов // Геология нефти и газа. 1990. – № 1.
3. Обзор популярных алгоритмов машинного обучения. – Текст: электронный // Обучаем аналитике и Data Science на практике. – URL: <https://simulative.ru/> (дата обращения: 05.10.2024).

FORECASTING THE VALUE OF OIL AND GAS FIELDS BASED ON NATURAL INDICATORS

T.R. Ryazantsev

Plekhanov Russian University of Economics, Moscow

Abstract: The paper is devoted to the development of a forecast model capable of estimating hydrocarbon production volumes based on a set of initial field indicators. The main purpose of the work is to verify the feasibility of such a forecast using the available information base.

Keywords: reserve forecasting, machine learning, oil and gas fields, web application, economic evaluation.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЛИПТИЧНОСТИ ФОРМЫ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО РЕЗОНАТОРА ВОЛНОВОГО ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ГИРОСКОПА НА СПЕКТР СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ

И.Л. Батаронов, Г.Е. Шунин, С.А. Кострюков, В.В. Пешков, В.А. Шунина

Воронежский государственный технический университет
vmfmm@mail.ru

Аннотация: методом конечных элементов рассчитана зависимость спектра собственных частот цилиндрического резонатора волнового твердотельного гироскопа от степени эллиптичности его формы. Установлено увеличение расщепления собственных частот с увеличением степени эллиптичности и привязка «тяжёлой оси» резонатора к большей оси эллипса.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, метод конечных элементов, волновой твердотельный гироскоп, цилиндрический резонатор, собственные частоты.

Введение

Физико-математические модели, описывающие колебания резонаторов волновых твердотельных гироскопов (ВТГ) на основе теории упругости тонких осесимметричных оболочек, для случая полусферического резонатора позволяют приближёнными аналитическими методами рассчитать влияние дефектов массы и формы на его параметры и характеристики, а также разработать алгоритмы его балансировки [1]. В случае цилиндрических резонаторов с пьезоэлементами для раскачки и съёма сигнала [2], аналитические методы не применимы. Необходимо использовать численные методы решения краевых задач уравнений электроупругости, описывающих колебания таких резонаторов [3, 4].

В данной работе методом конечных элементов рассчитана зависимость первых десяти собственных частот цилиндрического резонатора от степени эллиптичности его формы. Установлено увеличение расщепления рабочих собственных частот резонатора с увеличением степени эллиптичности его формы и привязка «тяжёлой» оси резонатора к большей оси эллипса.

Постановка задачи на собственные частоты

Для нахождения собственные частоты и форм колебаний цилиндрического резонатора ВТГ решалась краевая задача для уравнения

$$-\rho\omega^2\mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$$

с граничным условием $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$ на всей поверхности резонатора, за исключением закреплённого основания ножки резонатора, на котором задавалось граничное условие $\mathbf{u} = 0$.

Здесь $\omega = 2\pi f$, f – собственная частота, \mathbf{n} – единичный вектор нормали к границе области решения задачи, \mathbf{u} – вектор смещений, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений, ρ – плотность материала.

В вычислительных экспериментах использовалась геометрическая модель резонатора ВТГ и параметры конструктивных материалов из статьи [4]. Конечно-элементный анализ проводился с помощью системы компьютерного моделирования физико-механических процессов в волновом твердотельном гироскопе [5].

Результаты вычислительных экспериментов и их обсуждение

В идеальном осесимметричном резонаторе ориентация главных осей («тяжёлой» и «лёгкой») может быть произвольной, но при этом сохраняется угол между ними, равный 45° . При нарушении симметрии (массовый, геометрический, жёсткостный дебаланс) происходит привязка главных осей к выделенным направлениям.

В таблице представлены собственные частоты резонатора с разной степенью деформации по оси Oy . Расчет проводился с призматической конечно-элементной сеткой (408960 ст. св.).

На рис. 1 представлен график зависимости рабочих частот резонатора от степени радиальной деформации резонатора.

Мода \ Коэффиц. де-форм.	1 (не деф)	0,9999	0,9995	0,999	0,97	0,94	0,9
1	1720.2376	1720.3242	1720.671	1721.105	1747.06684	1775.4410	1815.9449
2	1720.2376	1720.3373	1720.7366	1721.2361	1750.84091	1782.0333	1824.6158
3	3896.0854	3896.4013	3897.666	3899.2489	3994.60291	4098.4127	4245.9755
4	4326.1878	4326.3615	4327.0569	4327.9269	4376.46504	4421.2164	4471.1451
5	4326.3874	4326.5611	4327.2558	4328.1237	4378.79838	4431.6961	4502.59
6	7486.2901	7486.4297	7486.9882	7487.6867	7529.00182	7573.5448	7635.9492
7	11350.6857	11351.1809	11353.1618	11355.638	11496.4522	11633.561	11799.6435
8	11350.6857	11351.181	11353.1622	11355.6387	11496.5787	11634.680	11805.2825
9	17951.6769	17951.7895	17952.2397	17952.8016	17983.1904	18009.763	18035.6466
10	17951.6769	17952.6583	17956.5846	17961.4934	18246.987	18544.367	18943.2827

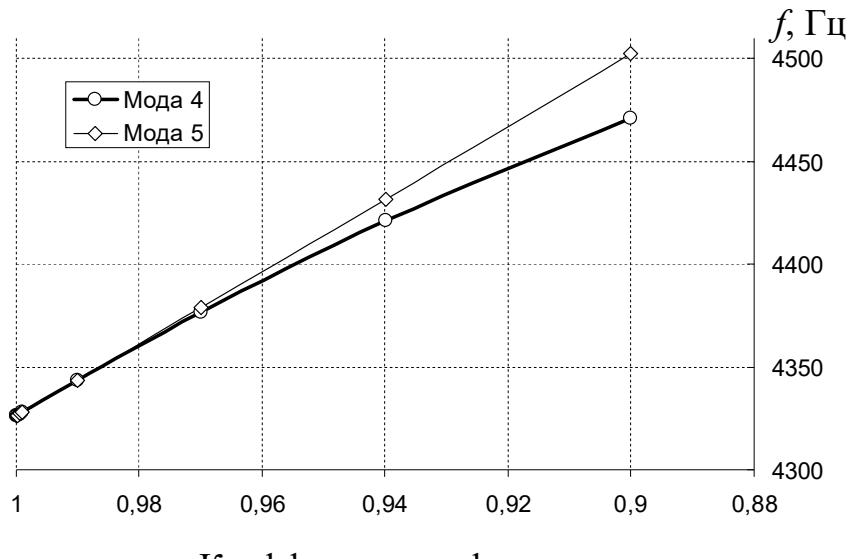


Рис. 1. Зависимости рабочих частот резонатора от степени радиальной деформации резонатора

Ориентацию главных осей можно определить из вида проекций форм колебаний резонатора на рабочих частотах (моды 4, 5) на координатную плоскость xOy . Оси привязываются к случайным неоднородностям плотности разбиения геометрической модели резонатора на конечные элементы. Это является погрешностью вычислительного эксперимента.

Из рис. 2 видно, что лёгкая ось привязывается к направлению оси деформации резонатора.

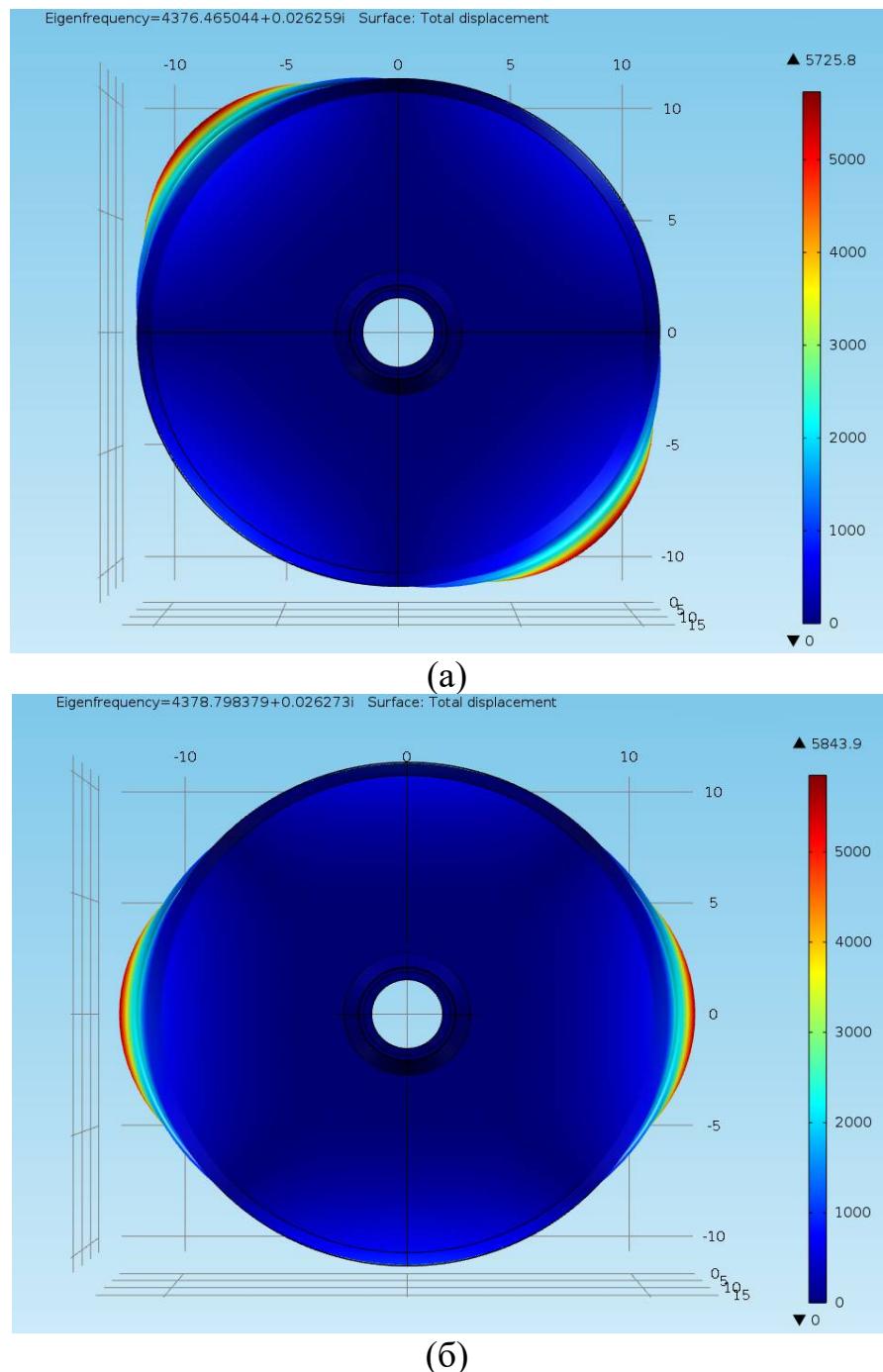


Рис. 2. Ориентация тяжелой (а) и легкой (б) осей при коэффициенте деформации резонатора 0.97

На рис. 3 приведен график зависимости модуля вектора смещения точек, лежащих на линии торца резонатора, от полярного угла. С помощью такого графика можно достаточно точно определять ориентацию главных осей резонатора и угол между ними.

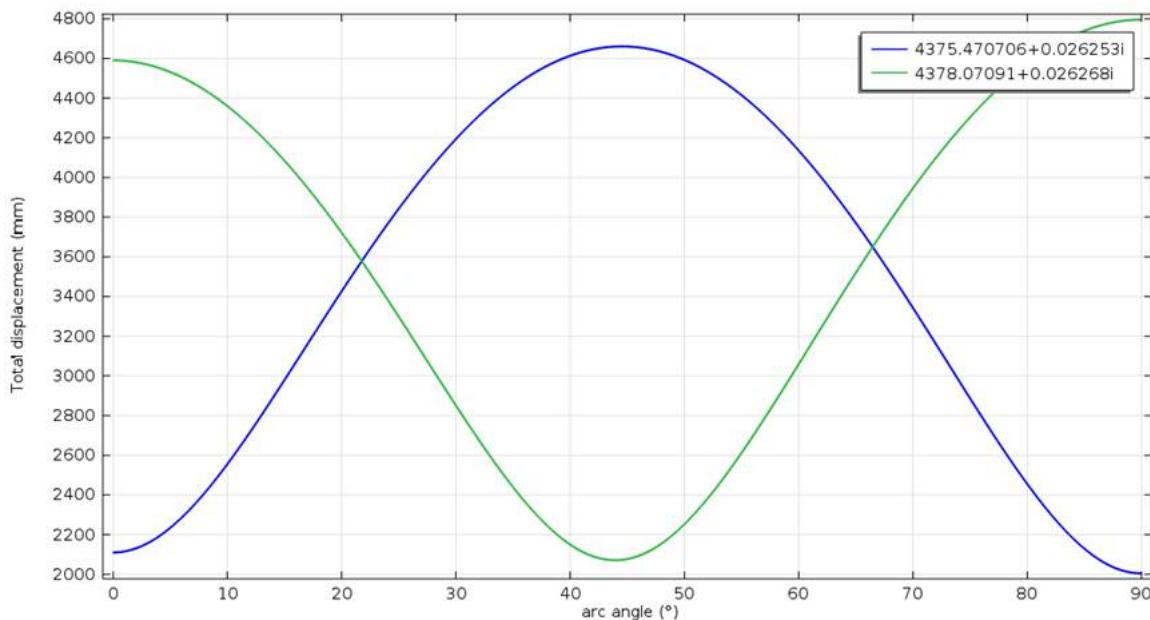


Рис. 3. Зависимости модуля вектора смещения точек, лежащих на линии торца резонатора, от полярного угла

Полученные результаты могут быть полезными при выработке требований к точности изготовления цилиндрических резонаторов волновых твердотельных гироскопов.

Литература

1. Лунин Б.С. Волновой твердотельный гироскоп. Теория и технология. / Б.С. Лунин, В.А. Матвеев, М.А. Басараб. – М.: Радиотехника, 2014. 176 с.
2. Волновой твердотельный гироскоп с металлическим резонатором / В.Я. Распопов, И.А. Волчихин, А.И. Волчихин и др.; под ред. В. Я. Распопова. Тула: Издательство ТулГУ. 2018. 189 с.
3. Наседкин, А. В. Конечно-элементное моделирование связанных задач / А. В. Наседкин, А. А. Наседкина. – Ростов-на-Дону: ЮФУ. 2015. 178 с.
4. Влияние пьезоэлектрических преобразователей на собственные частоты резонатора волнового твердотельного гироскопа / И.Л. Батаронов, Г.Е. Шунин, С.А. Кострюков, В.В. Пешков // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2019. Т. 83. № 9. С. 1217-1219.
5. Система компьютерного моделирования физико-механических процессов в волновом твердотельном гироскопе / И.Л. Батаронов, Г.Е. Шунин, С.А. Кострюков и др. // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIX междунар. семинара. Воронеж: ВГТУ. 2018. С. 162-166.

MODELING OF THE EFFECT OF THE ELLIPTICITY OF THE SHAPE OF A CYLINDRICAL RESONATOR OF A WAVE SOLID-STATE GYROSCOPE ON THE NATURAL FREQUENCY SPECTRUM

I.L. Bataronov, G.E. Shunin, S.A. Kostryukov, V.V. Peshkov, V.A. Shunina

Voronezh State Technical University

Abstract: the dependence of the natural frequency spectrum of a cylindrical resonator of a wave solid-state gyroscope on the degree of ellipticity of its shape is calculated by the finite element method. An increase in the splitting of natural frequencies with an increase in the degree of ellipticity and the binding of the "heavy axis" of the resonator to the larger axis of the ellipse is established.

Keywords: computer simulation, finite element method, wave solid-state gyroscope, cylindrical resonator, natural frequencies.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ТЕПЛООБМЕНА
ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО МОДУЛЯ С ТУРБУЛЕНТНЫМ ПОТОКОМ
НА ОСНОВЕ АСИМПТОТИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ**

О.А. Дорохова, И.Л. Батаронов

Воронежский государственный технический университет
dezhinaksu@mail.ru, vfmfmm@mail.ru

Аннотация: была рассмотрена задача теплообмена между охлаждающей средой и термоэлементом. С помощью метода асимптотического разложения определены стационарное число Нуссельта (Nuz), параметр, описывающий влияние начального участка на стационарное распределение (Nz) и коэффициент показателя степени экспоненты (a_2) выхода на стационарное решение. Начальный участок распределения описывался двумя экспоненциальными слагаемыми, для определения которых начальный участок разделялся на две части во избежание неустойчивости расчета. С помощью регрессионного анализа по рассчитанным в рамках $k-\omega$ модели турбулентности профилям на каждом участке определялись параметры одного экспоненциального слагаемого. Затем проведена аппроксимация найденных коэффициентов зависимостью от чисел Рейнольдса и Прандтля. Получена формула для температурного профиля по термоэлементу в турбулентном потоке, согласующаяся с асимптотическим решением и известными экспериментальными зависимостями.

Ключевые слова: турбулентный тепломассоперенос, термоэлектрический модуль, $k-\omega$ модель, начальный участок теплообмена

Задача расчета параметров теплообмена термоэлектрических устройств с охлаждающей средой является актуальной [1-4]. Имеющиеся технические методики расчета [5-7] не полностью учитывают влияние температурных зависимостей свойств термоэлектрика. В предыдущих работах были рассмотрены распределения температур с учетом температурной зависимости конвективного потока тепла термоэлектрика в ламинарном [8-9] и турбулентном [10-13] режимах. Турбулентный режим рассматривался в $k-\varepsilon$ и $k-\omega$ моделях. В этих исследованиях не учитывалась привязка к асимптотическому распределению температуры, которая была найдена в [9].

В настоящей работе осуществляется исследование распределения температуры на термоэлектрическом модуле на основе асимптотического решения. Ламинарный режим теплообмена в такой постановке исследовался в [14]. В настоящей работе исследуется турбулентный режим.

Постановка задачи

В качестве модели исследования используется теплообмен между термоэлементом и охлаждающей средой. В качестве базовой задачи рассматривается граничное условие второго рода на холодной стороне термоэлемента (однородный поток тепла с плотностью q_0). Сопряженный термоэлектроперенос этого потока в термоэлементе приводит к третьей краевой задаче в теплоносителе с

граничным потоком тепла с плотностью q_1 . Этот поток переносится со скоростью V в турбулентном режиме течения теплоносителя.

Линейные кинетические соотношения для сопряженного теплоэлектропереноса имеют вид:

$$q_0 = sjT_0 - \frac{1}{2\sigma} j^2 h - \kappa \frac{T_1 - T_0}{h}, \quad (1)$$

$$q_1 = sjT_1 + \frac{1}{2\sigma} j^2 h - \kappa \frac{T_1 - T_0}{h}. \quad (2)$$

Здесь s , σ , κ , j , h – кинетические и геометрические параметры сопряженного переноса (термоЭДС, электропроводность и теплопроводность, плотность электротока, длина переноса). Уравнения (1), (2) записаны в рамках модели эффективных параметров.

Задача теплопереноса в турбулентном режиме задается уравнением:

$$\rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \operatorname{div}(\lambda \nabla T) + Q, \quad (3)$$

где ρ – плотность теплоносителя, C_p – удельная теплоемкость, \mathbf{u} – усредненное по Рейнольдсу поле скоростей теплоносителя, λ – турбулентный коэффициент теплопроводности, принимаемый на основе турбулентного числа Прандтля в рамках модели Кейса-Кроуфорда, Q – скорость диссипации турбулентной энергии.

Преобразование уравнений (1), (2) с использованием приведенных к безразмерным переменным граничного условия между термоэлементом и охлаждающей средой и краевых условий [8] приводит к граничному условию в стандартном виде граничного условия третьего рода:

$$-\frac{\partial \theta}{\partial \eta}(\xi, 0) = Q + \Upsilon \theta(\xi, 0), \quad 0 < \xi < \xi_0. \quad (4)$$

Здесь $\xi_0 = L / H$ – расчетная длина теплообмена с термоэлементом,

$$Q = \frac{\tilde{q}_0}{1 + \zeta} + \Upsilon \left(1 + \frac{2 + \zeta}{2z} \right), \quad \Upsilon = \frac{\zeta^2}{\chi(1 + \zeta)} \quad (5)$$

– критериальные отношения сопряженного переноса, z – коэффициент эффективности термоэлемента, $\chi = (Kh) / (\kappa H)$ – отношение тепловых сопротивлений термоэлемента и теплоносителя.

Из теории подобия следует, что задача (3) с граничным условием третьего рода (4) имеет решение, которое зависит только от параметров Re , Pr , Υ в турбулентном режиме:

$$T = T_{\text{bx}} + T_{\text{bx}} Q \Phi \left(\frac{x}{H}, \frac{y}{H}; Re, Pr, \Upsilon \right), \quad (6)$$

с некоторой универсальной функцией Φ .

Функция Φ удовлетворяет стандартизированному граничному условию:

$$-\frac{\partial \Phi}{\partial \eta}(\xi, 0) = 1 + Z\Phi(\xi, 0), \quad 0 < \xi < \xi_0, \quad (7)$$

зависящему только от одного параметра $Z = Y$.

Интегрированием уравнений (1), (2) по сечению потока с использованием условия (7) получено одномерное уравнение теплопереноса

$$Pe \frac{d\Phi_m(\xi)}{d\xi} = 1 + Z\Phi_0(\xi), \quad (8)$$

где Φ_m – среднемассовая температура потока теплоносителя, $\Phi_0(\xi) = \Phi(\xi, 0)$ – температура границы между теплоносителем и термоэлементом. Связь между Φ_m и Φ_0 устанавливается критериальным уравнением с числом Нуссельта.

Из уравнения (8) при заданном $\Phi_0(\xi)$ находится распределение среднемассовой температуры потока:

$$\Phi_m(\xi) = \frac{\xi}{Pe} + \frac{Z}{Pe} \int_0^\xi \Phi_0(\xi') d\xi', \quad (9)$$

по которой рассчитывается локальное число Нуссельта:

$$Nu_\xi = \frac{1 + Z\Phi_0}{\Phi_0 - \Phi_m}. \quad (10)$$

Для определения распределения $\Phi_0(\xi)$ был проведён вычислительный эксперимент.

Вычислительный эксперимент

Геометрические параметры модельной системы: толщина охлаждающего потока $H = 5$ мм, охлаждаемая длина ТЭ $L = 150\text{--}450$ мм. Вид расчетной сетки представлен на рис. 1.

Число узлов сетки составило около 618 тыс., число степеней свободы – 1815 тыс., время решения задачи на 6-ядерном процессоре – 13÷30 мин. Численный расчет производился в конечно-элементном комплексе программ Comsol [15].

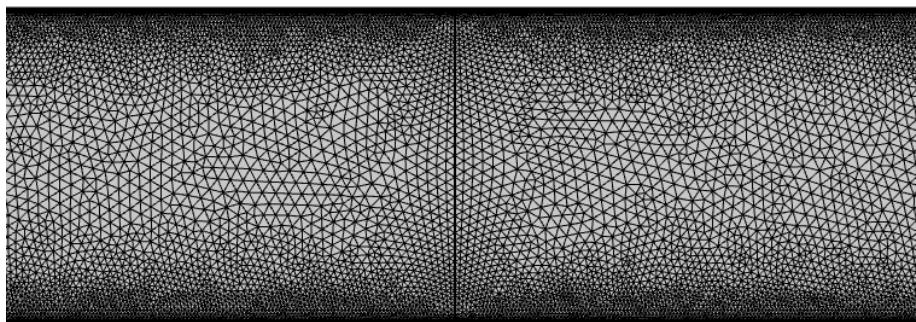


Рис. 1. Вид сетки расчетной области

Для установления вида асимптотического решения проводился эксперимент на длине $90h$, на котором обнаружились характерные формы поведения решения.

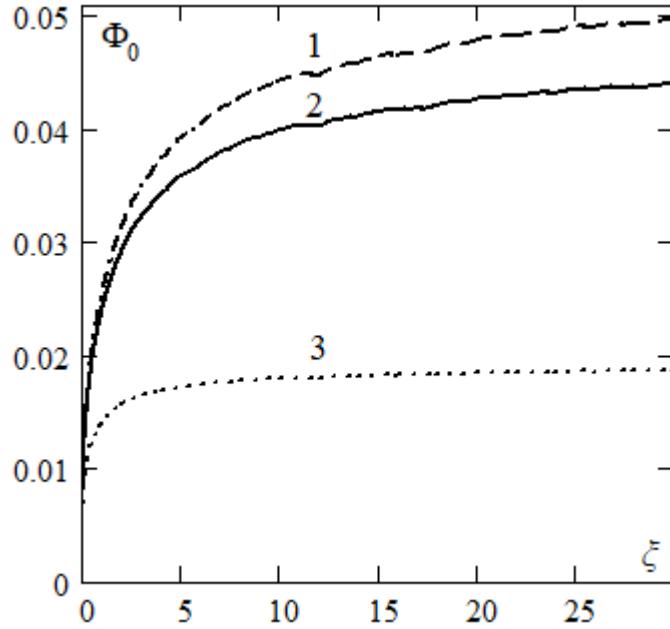


Рис. 2. Распределение температуры с параметрами $Re = 2475$, $Pr = 7,07$:
1 – при $Z = 2,5473$; 2 – при $Z = 0$; 3 – при $Z = -30,98$

Полученные результаты согласуются с найденными в ламинарном режиме [9], но участки асимптотического роста в турбулентном режиме практически не достигаются в физически разумных пределах расчетной длины. Поэтому из асимптотического распределения [14] можно взять только начальный участок, который описывается формулой:

$$\Phi = \frac{1}{N_Z - Z} + \frac{N_Z \text{Nu}_Z}{(N_Z - Z)(\text{Nu}_Z - Z)} \frac{\xi}{\text{Pe}}. \quad (11)$$

По аналогии с полученным в ламинарном режиме [9] зависимость Nu_Z будем искать в виде:

$$(\text{Nu}_Z^n - \text{Nu}_{-\infty}^n)(\text{Nu}_Z^n - Z^n) = \text{Nu}_0^n (\text{Nu}_0^n - \text{Nu}_{-\infty}^n). \quad (12)$$

Аналогично зависимость N_Z будем описывать формулой

$$(N_Z^n - N_{-\infty}^n)(N_Z^n - (kZ)^n) = \text{Nu}_0^n (\text{Nu}_0^n - N_{-\infty}^n). \quad (13)$$

Поделим (12) на Nu_0^n и заменим $\nu = \text{Nu}_{-\infty} / \text{Nu}_0$. Тогда (12) примет нормированный вид:

$$\left(\left(\frac{\text{Nu}_Z}{\text{Nu}_0} \right)^n - \nu^n \right) \cdot \left(\left(\frac{\text{Nu}_Z}{\text{Nu}_0} \right)^n - \left(\frac{Z}{\text{Nu}_0} \right)^n \right) = 1 - \nu^n. \quad (14)$$

Здесь Nu_0 – число Нуссельта при постоянном тепловом потоке через границу, $\text{Nu}_{-\infty}$ – при постоянной температуре границы.

На начальном участке формула (11) модифицируется в виде [14]:

$$\Phi = \frac{1}{(N_Z - Z) + a_1 \frac{e^{-a_2 \xi / \text{Pe}}}{\sqrt[3]{\xi}}} + \frac{N_Z \text{Nu}_Z}{(N_Z - Z)(\text{Nu}_Z - Z) \text{Pe}} \frac{\xi}{\text{Pe}}. \quad (15)$$

В ламинарном режиме течения зависимость (15) выполняется на всем начальном участке [9]. В турбулентном режиме, вследствие многослойности потока, зависимость (15) выполняется на второй части начального участка вплоть до стационарного участка. В первой же части этого участка в знаменатель формулы (15) добавляется дополнительный член, описывающий данный участок [14]. Совместное определение всех параметров такой зависимости оказывается в вычислительном плане плохо обусловленной задачей, что приводит к неустойчивости определения параметров. В особенности это касается параметров Nu_Z , N_Z и a_2 . Поэтому для их определения использовался метод асимптотического разложения. Для надежного применения этого метода в широком интервале изменения чисел Рейнольдса и Прандтля недостаточно расчета на длине 150 мм ($=30h$), поэтому была проведена серия расчетов на длине 450 мм ($=90h$).

Для применения метода асимптотического разложения перепишем формулу (15) в виде:

$$\psi \equiv \left[\left(\Phi - \frac{N_Z \text{Nu}_Z}{(N_Z - Z)(\text{Nu}_Z - Z) \text{Pe}} \frac{\xi}{\text{Pe}} \right)^{-1} - (N_Z - Z) \right] \cdot \sqrt[3]{\xi} = a_1 e^{-a_2 \xi / \text{Pe}}. \quad (16)$$

Тогда при выполнении предполагаемой зависимости (15) «хвост» профиля $\psi(\xi)$ должен «спрямляться» в логарифмических координатах $\ln \psi \div \xi$.

Вычислительный эксперимент показал, что эта зависимость на длине 90h подтверждается для всех использованных в расчете комбинаций чисел Re и Pr. Тогда для определения параметров Nu_Z , N_Z и a_2 по методу асимптотического разложения использовался следующий алгоритм:

1. Для определения Nu_Z рассчитывались зависимости (9), (10), значение Nu_Z выбиралось из условия спрямления «хвоста» зависимости в логарифмических координатах $\ln(\text{Nu}_\xi - \text{Nu}_Z) \div \xi$.

2. Методом подбора параметра N_Z добивались спрямления «хвоста» зависимости $\ln \psi \div \xi$.

3. При найденном значении Nu_Z и N_Z по наклону линейного участка зависимости $\ln \psi \div \xi$ рассчитывалось значение параметра a_2 методом линейного МНК.

Результаты расчета по данному алгоритму для различных значений параметров Re и Pr показали, что коэффициент a_2 не зависит от Z (в ламинарном режиме выявлялась слабая зависимость, заметная только при $Z \gg \text{Nu}_0$), а зависимость параметра a_2 от Re и Pr приведена в табл. 1.

Значения коэффициента a_2

Таблица 1

Re	Pr	Pe	a_2	Re	Pr	Pe	a_2
5357	0,98	5250	164	6250	11,2	70000	2700
2250	2,8	6300	202	19802	7,07	140000	5430
7500	2,8	21000	730	39604	7,07	280000	11700
4950	7,07	34996,5	1300	39604	40	1584160	88613

Полученные значения коэффициента a_2 спрямляются в двойных логарифмических координатах (рис. 3), что дает зависимость $a_2 = 0,013Pe^{1,1}$.

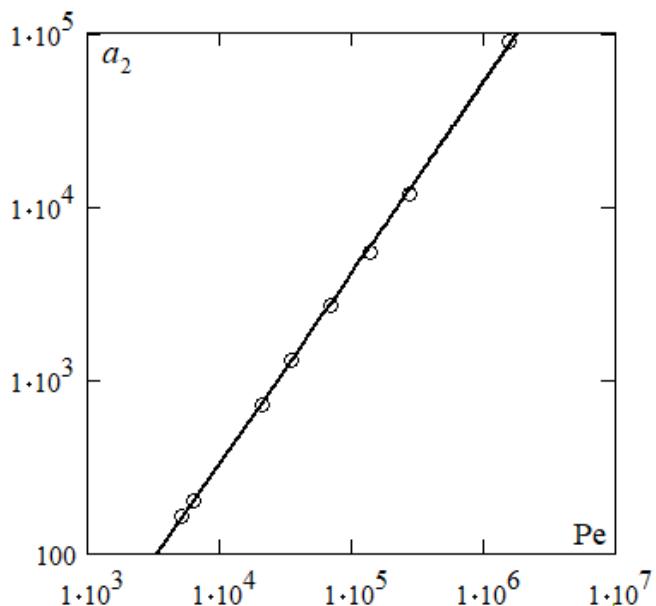


Рис. 3. Зависимость коэффициента a_2 от числа Пекле

Результаты расчета числа Nu_Z , проведенные при комбинациях факторов, при которых зависимость от Z проявляется ($Z > Nu_0$), приведены в табл. 2.

Значения параметра Nu_Z

Таблица 2

Re	Pr	Z	Nu_Z	Re	Pr	Z	Nu_Z
8928,6	0,98	0	25,2	2475	7,07	0	22,51
8928,6	0,98	5,7436	25,2	2475	7,07	30,981	31,323
8928,6	0,98	15,484	26,3	2475	7,07	34,909	35,144
8928,6	0,98	30,98	32,4	3125	11,2	0	32,92
6250	2,8	0	31,99343	3125	11,2	40,165	40,59
6250	2,8	40,165	41,06	3125	11,2	48,075	48,276
6250	2,8	48,075	48,49				

Анализ результатов табл. 2 по формуле (14) показал, что они хорошо согласуются с этой формулой при значениях параметров $n = 0,75$ и $v = 0,99$ (рис. 4).

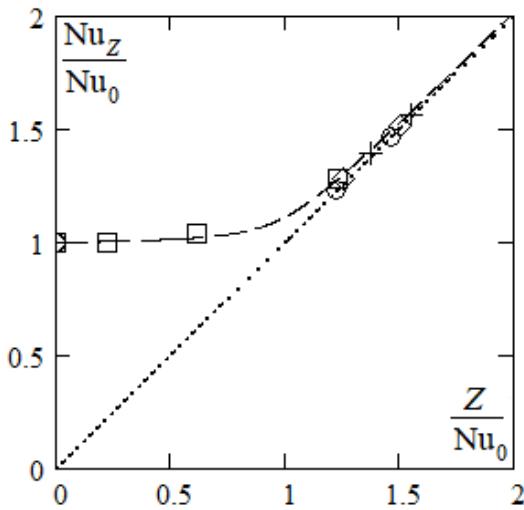


Рис. 4. Зависимость Nu_Z от числа Z , где \square – значения при $\text{Pr} = 0,98$;
 \diamond – при $\text{Pr} = 2,8$; $+$ – при $\text{Pr} = 7,07$; \circ – при $\text{Pr} = 11,2$

Аналогичные результаты получены для параметра N_Z при значениях параметров $n = 1$, $k = 1,2$ и $\nu = 0,99$. Отметим, что значения параметра n совпадают с полученными в ламинарном режиме.

Полученные результаты показывают, что в широком интервале изменения Z ($Z < \text{Nu}_0$) можно считать $N_Z = \text{Nu}_Z$. В частности, в численном расчете их различие оказывается статистически незначимым. Кроме того, имеет место соотношение $\text{Nu}_{\infty} \approx \text{Nu}_0$. Тогда асимптотическая формула (11) принимает вид

$$\Phi = \frac{1}{\text{Nu}_Z - Z} + \left(\frac{\text{Nu}_Z}{\text{Nu}_Z - Z} \right)^2 \frac{\xi}{\text{Pe}}, \quad (17)$$

а формула (15) тогда перепишется в виде:

$$\Phi = \frac{1}{\text{Nu}_Z - Z + a_1 \frac{e^{-0,013\text{Pe}^{0,1}\xi}}{\sqrt[3]{\xi}}} + \left(\frac{\text{Nu}_Z}{\text{Nu}_Z - Z} \right)^2 \frac{\xi}{\text{Pe}}. \quad (18)$$

Для удобства и корректной работе алгоритма обработки здесь оставлена зависимость числа Нуссельта от параметра Z .

Обработка результатов эксперимента

Введем обозначение $a_0 = \text{Nu}_Z - Z$. Тогда формула (18) перепишется в виде:

$$\Phi = \frac{\sqrt[3]{\xi}}{a_0 \sqrt[3]{\xi} + a_1 e^{-0,013\text{Pe}^{0,1}\xi}} + \left(\frac{a_0 + Z}{a_0} \right)^2 \frac{\xi}{\text{Pe}}. \quad (19)$$

Для учета первой части начального участка добавим в знаменатель формулы (19) экспоненциальный член, локализованный на этой части:

$$\Phi = \frac{\sqrt[3]{\xi}}{a_0 \sqrt[3]{\xi} + a_1 e^{-0,013\text{Pe}^{0,1}\xi} + b_0 e^{-b_1 \xi}} + \left(\frac{a_0 + Z}{a_0} \right)^2 \frac{\xi}{\text{Pe}}. \quad (20)$$

Совместное определение обоих экспоненциальных слагаемых в формуле (20) оказывается плохо обусловленной задачей, так как эти слагаемые определяются разными участками профиля. Поэтому был разработан алгоритм раздельного расчета данных слагаемых, состоящий в следующем:

1. Как показывает анализ рассчитанных профилей, первая часть локализована на длине $\xi < \xi_1$, где $\xi_1 \approx 10$ (конкретное значение подбирается при расчете). Тогда на длине $\xi_1 < \xi < \xi_0$ производится аппроксимация профиля по формуле (19) с определением коэффициентов по нелинейному МНК (рис. 5).

2. Для расчета первой части начального участка на длине $0 < \xi < \xi_1$ перепишем формулу (20) в виде:

$$\psi \equiv \left[\left(\Phi - \left(\frac{a_0 + Z}{a_0} \right)^2 \frac{\xi}{Pe} \right)^{-1} - a_0 \right] \cdot \sqrt[3]{\xi} - a_1 e^{-0.013Pe^{0.1}\xi} = b_0 e^{-b_1 \xi}. \quad (21)$$

Отсюда коэффициенты b_0 и b_1 находятся из наклона и отрезка линейного участка зависимости $\ln \psi \div \xi$ (рис. 6).

Для реализации данного алгоритма были использованы расчеты на длине $30h$ для чисел Прандтля $0,7 \div 40$, Рейнольдса $1563 \div 142900$ и параметра Υ $0 \div 14,4$. Всего проведено 210 расчетов. Как показали результаты всех расчетов, число $Nu_Z = a_0 - Z$ статистически не зависит от параметра Z , как и ожидалось из предыдущего анализа. Кроме того, Зависимость рассчитанного стационарного числа Нуссельта хорошо коррелирует с известными зависимостями для этого числа (М.А. Михеева, Е.А. Краснощекова).

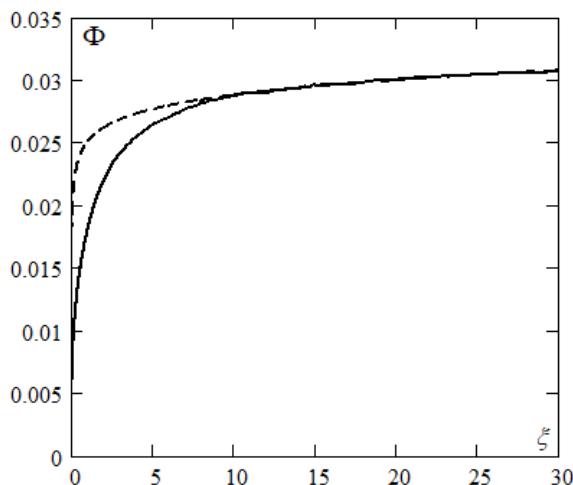


Рис. 5. Аппроксимация профиля на второй части начального участка

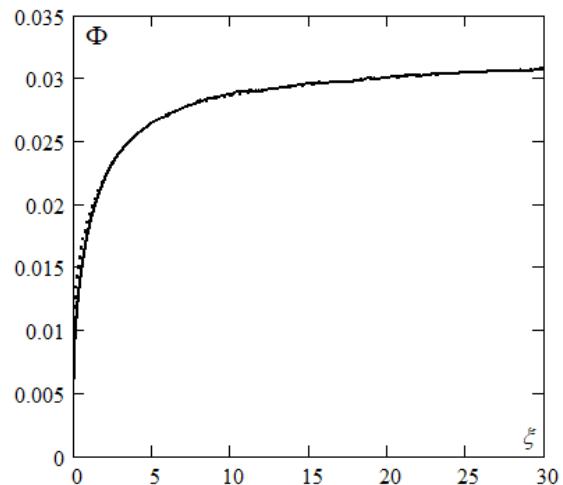


Рис. 6. Аппроксимация профиля на первой части начального участка

Для исследования зависимости коэффициентов a_1 , b_0 , b_1 от чисел Re и Pr полученные результаты были сгруппированы по блокам с одинаковыми значениями параметров.

1. Анализ коэффициента a_1 .

Из полученных значений коэффициента a_1 для всех рассчитанных профилей температуры видно, что он не зависит от параметра Z . В двойных логарифмических координатах зависимость величины $(a_1 - C)$ от числа Re спрямляется (рис. 7), причем значение $C = 5,5$ одинаково для всех линий.

Следовательно, для коэффициента a_1 имеет место формула:

$$a_1 = 5,5 + \varphi(\text{Pr}) \cdot \left(\frac{\text{Re}}{1000} \right)^{\psi(\text{Pr})}. \quad (22)$$

Зависимость коэффициентов ψ и φ , найденных из линий на рис. 7, от числа Прандтля показана на рис. 8 в преобразованных координатах, в которых происходит спрямление зависимости.

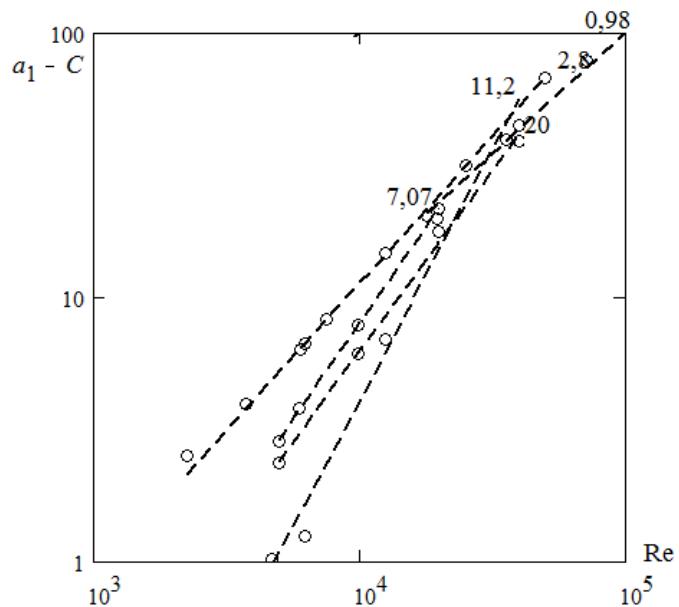


Рис. 7. Зависимость величины $(a_1 - C)$ от числа Re при фиксированном значении Pr (числа у концов линий)

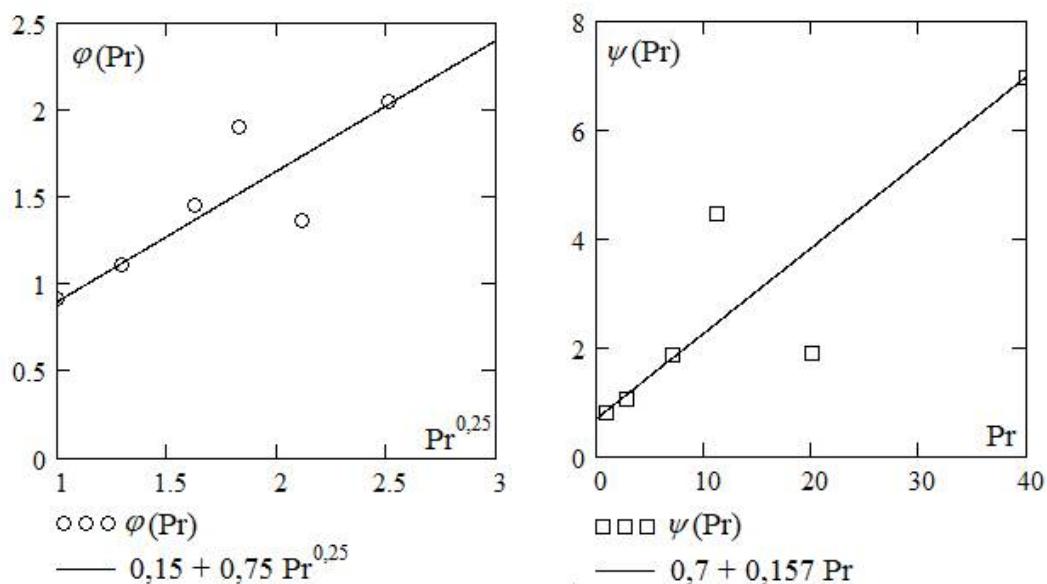


Рис. 8. Зависимость коэффициентов ψ и φ от числа Прандтля

Имеющийся на рис. 8 разброс значений обусловлен сильной коррелированностью этих коэффициентов и в пределах допустимой погрешности не влияет на результат аппроксимации.

В результате полученных формул для ψ и φ зависимость (22) окончательно принимает вид:

$$a_1 = 5,5 + \frac{(0,001 \text{Re})^{0,15+0,75 \text{Pr}^{0,25}}}{(0,7 + 0,157 \text{Pr})^2}. \quad (23)$$

2. Анализ коэффициентов b_0 и b_1 .

Результаты расчетов коэффициентов b_0 , b_1 показывают, что они не зависят от параметра Z и числа Рейнольдса, что согласуется с фактом формирования описываемого ими профиля в ламинарном подслое. Зависимость же от числа Прандтля хорошо описывается степенной зависимостью с дробными показателями (рис. 9).

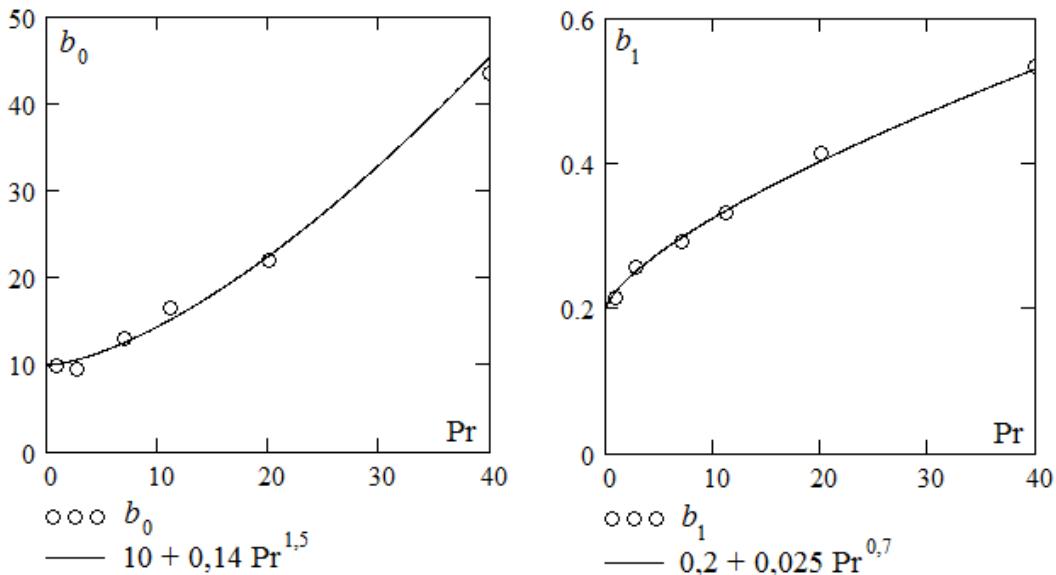


Рис. 9. Зависимость коэффициентов b_0 и b_1 от числа Прандтля

Таким образом, окончательная формула для температурного профиля по термоэлементу в турбулентном потоке, согласующаяся с асимптотическим решением, имеет вид:

$$\Phi = \frac{\sqrt[3]{\xi}}{(\text{Nu}_Z - Z)\sqrt[3]{\xi} + a_1 e^{-0,013 \text{Pe}^{0,1} \xi} + b_0 e^{-b_1 \xi}} + \left(\frac{\text{Nu}_Z}{\text{Nu}_Z - Z} \right)^2 \frac{\xi}{\text{Pe}},$$

$$a_1 = 5,5 + \frac{(0,001 \text{Re})^{0,15+0,75 \text{Pr}^{0,25}}}{(0,7 + 0,157 \text{Pr})^2}, \quad (24)$$

$$b_0 = 10 + 0,14 \text{Pr}^{1,5},$$

$$b_1 = 0,2 + 0,025 \text{Pr}^{0,7}.$$

Полученная формула (24) хорошо согласуется с рассчитанными профилями температуры. В качестве примера на рис. 10 показаны профили, полученные при численном эксперименте (сплошная линия) и в результате подстановки в формулу (24) (пунктирная линия) для $Pr = 0,7$ ($Re = 40000$), $Pr = 0,98$ ($Re = 17857$), $Pr = 2,8$ ($Re = 7500$), $Pr = 7,07$ ($Re = 4950,5$), $Pr = 11,2$ ($Re = 3125$), $Pr = 20$ ($Re = 9901$), $Pr = 40$ ($Re = 37500$).

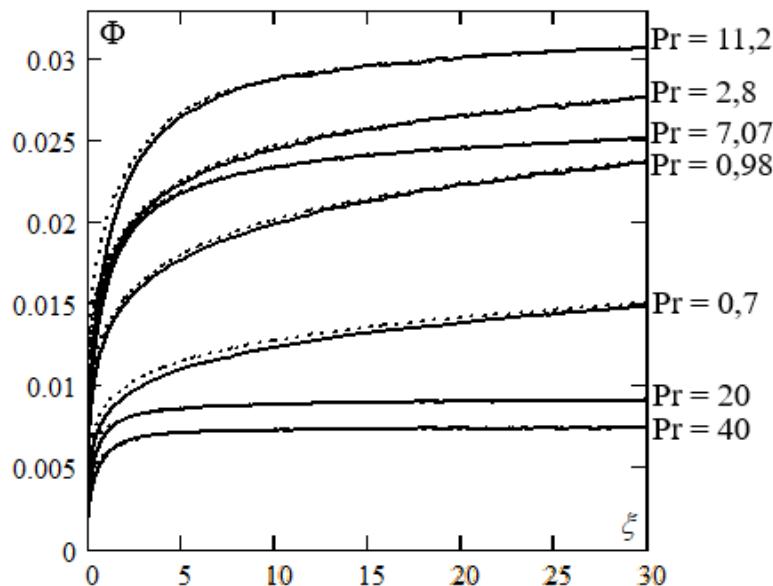


Рис. 10. Профили температур, полученные в результате численного расчета и расчета по формуле (24)

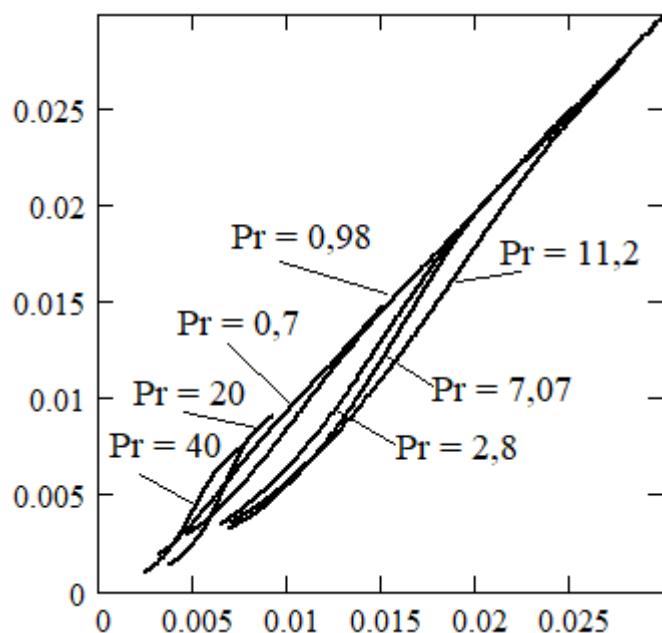


Рис. 11. Сравнение значений температур, полученные в результате численного расчета и расчета по формуле (24), в одинаковых точках

Рис. 11 показывает сравнение температур экспериментального и аппроксимированного профилей в одной точке. Имеющееся расхождение на рис. 11

связано с тем, что при переходе к температурной шкале имеет место деформация размеров участков профиля. В частности, первый участок, имеющий длину порядка $3h$ (рис. 10), на температурной шкале занимает основную часть длины (рис. 11). Отметим, что согласно рис. 11 все профили асимптотически сходятся.

Для расчета числа Нуссельта по найденной аппроксимации профиля следует использовать формулу (10). Однако интегральные члены, входящие в эту формулу из (9), должны быть малы в силу большого числа Пекле. Для проверки этого утверждения был проведен расчет по формуле (9), (10) с использованием распределения (24) и по формуле, полученной из (10) в пренебрежении интегральными членами:

$$\begin{aligned} \text{Nu}_\xi &= \text{Nu}_Z + \frac{a_1 e^{-0,013 \text{Pe}^{0,1} \xi} + b_0 e^{-b_1 \xi}}{\sqrt[3]{\xi}}, \\ a_1 &= 5,5 + \frac{(0,001 \text{Re})^{0,15+0,75 \text{Pr}^{0,25}}}{(0,7 + 0,157 \text{Pr})^2}, \\ b_0 &= 10 + 0,14 \text{Pr}^{1,5}, \quad b_1 = 0,2 + 0,025 \text{Pr}^{0,7}. \end{aligned} \quad (25)$$

График относительной ошибки $\delta = \Delta \text{Nu}_\xi / \text{Nu}_\xi$ формулы (25) для нескольких профилей и значений Z приведен на рис. 12.

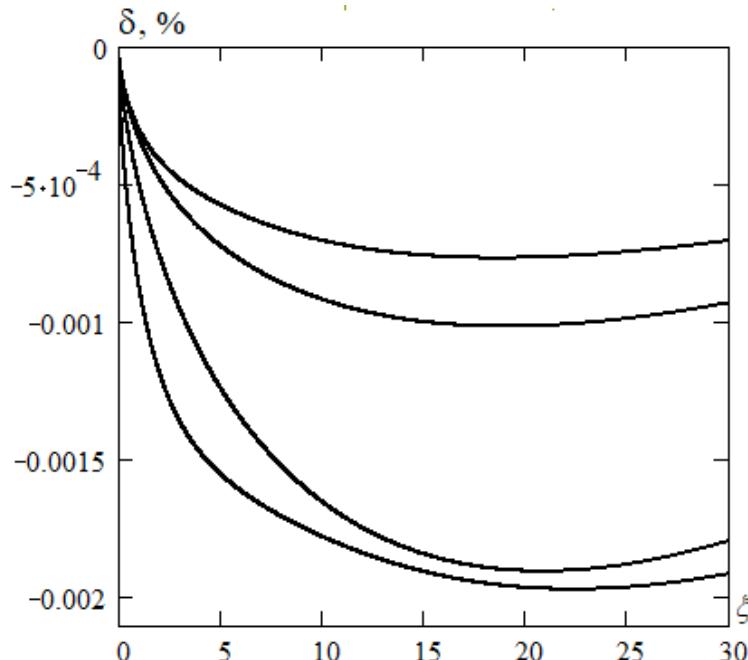


Рис. 12. Относительная ошибка формулы (25)

Как следует из рис. 12, формула (25) обладает очень маленькой погрешностью (на уровне тысячных долей процента), что позволяет использовать ее для начального участка теплообмена. Отметим, что в турбулентном режиме параметр Z влияет только на стационарную часть числа Нуссельта (25), причем для больших значений этого числа данное влияние несущественно.

Заключение

Полученная формула (24) для температурного профиля по термоэлементу в турбулентном потоке хорошо описывает температурные профили при различных значениях Рейнольдса и Прандтля. Найдено выражение для локального числа Нуссельта (25) в турбулентном режиме течения при теплообмене с термоэлектрическим модулем.

Литература

1. Аналитическая оценка влияния термоэлектрических эффектов на интенсификацию теплоотдачи от охлаждаемой оребренной поверхности / И.М. Илюхин, А.В. Кретинин, М.И. Кирпичев, В.Г. Стогней // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2014. Т. 10. № 1. С. 44-46.
2. Thermoelectric cooling technology applied in the field of electronic devices: Updated review on the parametric investigations and model developments / Yang Caia, Yu Wang, Di Liu, Fu-Yun Zhao // Applied Thermal Engineering. 2019. P. 238-255.
3. A Review on Thermoelectric Cooler / Balkrishan, Satish Chand, Arpit Gupta, Neeraj Kumar Patel, Archana Soni // IJIRST – International Journal for Innovative Research in Science & Technology. 2016. V. 2, No 11. P. 674-679.
4. Кутателадзе С.С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. М.: Энергатомиздат, 1990. 367 с.
5. Математическое моделирование теплового режима гипертермопроводного радиатора мощного радиоэлемента / Е.Н. Васильев, Е.С. Никифорова // Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета имени академика М.Ф. Решетнева. 2005. № 3. С. 23-26.
6. Моделирование теплопередачи в устройстве подвода теплоты термоэлектрического блока охлаждения / Е.Н. Васильев // Журн. Сиб. федер. ун-та. Техника и технологии. 2023. Т.16, №1. С. 82-91.
7. Оптимизация режимов термоэлектрического охлаждения теплонагруженных элементов с учетом термического сопротивления теплоотводящей системы / Е.Н. Васильев // Журнал технической физики. 2017. Т.87, № 9. С. 1290-1296.
8. Дорохова О.А. Моделирование распределения температуры на термоэлементе при охлаждении ламинарным потоком / О.А. Дорохова, И.Л. Батаронов, Т.А. Надеина, Н.А. Ююкин // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2023. Т. 19. № 6.
9. Моделирование стабилизированного теплообмена в потоке при граничном условии третьего рода / О.А. Дорохова, И.Л. Батаронов, Т.В. Пашнева, И.М. Семилетов, С.А. Антипов // Вестник Воронежского государственного университета. 2025. Т.21. № 2. – С. 100-104.
10. k-ε модельный расчет температурного профиля вдоль термоэлектрического модуля охлаждении турбулентным потоком / О.А. Дорохова // Физико-математическое моделирование систем: Материалы XXIV Международного семинара. Воронеж, 2023. – С. 31-42.
11. Моделирование теплообмена термоэлектрического модуля с турбулентным потоком в рамках k-ω модели турбулентности / О.А. Дорохова, И.Л. Батаронов, Т.А. Надеина, Н.А. Ююкин // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2024. Т. 20. № 4. С. 49-59.
12. Об автомодельном распределении температуры на термоэлектрическом модуле при охлаждении турбулентным потоком / О.А. Дорохова // Физико-математическое моделирование систем: Материалы XXV Международного семинара. Воронеж, 2024. – С. 36-49.
13. Расчет управляемого термоэлектрического модуля для термостабилизации тепло-напряженных элементов / О.А. Дорохова, И.Л. Батаронов // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика: Издательство: «Научтехлитиздат». Москва, 2025. № 3. – С. 61-66.

14. Особенности теплообмена потока теплоносителя с термоэлектрическим модулем / И.Л. Батаронов, О.А. Дорохова // Состояние и перспективы развития электро- и теплотехнологии (XXIII Бенардосовские чтения): Материалы Международной научно-технической конференции. Иваново, 2025. – С. 320-323.

15. Потапов Л.А. Comsol Multiphysics: моделирование электромеханических устройств. Брянск: Брянский государственный технический университет, 2011. – 111 с.

MODELING OF HEAT TRANSFER PARAMETERS OF A THERMOELECTRIC MODULE WITH TURBULENT FLOW BASED ON ASYMPTOTIC DISTRIBUTION

O.A. Dorohova, I.L. Bataronov

Voronezh State Technical University

Abstract: the problem of heat exchange between the cooling medium and the thermoelement was considered. Using the asymptotic expansion method, the stationary Nusselt number (Nu_z), the parameter describing the influence of the initial section on the stationary distribution (N_z) and the coefficient of the exponent (a_2) for reaching a stationary solution were determined. The initial section of the distribution was described by two exponential terms, for the determination of which the initial section was divided into two parts to avoid instability of the calculation. Using regression analysis of the profiles calculated within the $k-\omega$ turbulence model, the parameters of one exponential term were determined for each section. Then, the obtained coefficients were approximated by dependence on the Reynolds and Prandtl numbers. A formula for the temperature profile of a thermoelement in a turbulent flow is obtained, which is consistent with the asymptotic solution and known experimental dependencies.

Keywords: turbulent heat and mass transfer, thermoelectric cell, $k-\omega$ model, initial section of heat exchange.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В ЗАСТОПОРЕННОМ ДИСЛОКАЦИОННОМ СКОПЛЕНИИ

И.Л. Батаронов, Т.А. Надеина, Р.О. Надеин

Воронежский государственный технический университет
vmfmm@mail.ru

Аннотация: исследование влияния импульсного воздействия на деформацию и структурное состояние нанокристаллических металлических сплавов является актуальной задачей в свете повышенных требований к эксплуатационным характеристикам конструкционных материалов. При прохождении электрических импульсов через кристаллическое тело возникает электропластический эффект (ЭПЭ), проявляющийся в резкой деформации образцов. Однако, несмотря на успехи в экспериментальных исследованиях ЭПЭ, построение количественной теории его описания встречает определенные трудности, связанные с учетом коллективных эффектов взаимодействия дислокаций - носителей деформации. В данной работе было получено выражение для силы отрыва дислокации в застопоренном скоплении при воздействии электрического тока.

Ключевые слова: дислокационное скопление, динамика дислокаций, электропластический эффект, функция Грина, диссипативный кристалл, сила Пича-Келера.

Введение

Использование Лагранжева подхода позволяет описать динамику дислокаций и моделировать различные коллективные эффекты, возникающие при пластической деформации [1, 2]. Этот подход позволяет проанализировать реакцию скопления дислокаций на различные воздействия, включая импульсное электрическое воздействие.

Постановка задачи

Для изучения динамической реакции застопоренного дислокационного скопления мы вводим силу внешнего воздействия – импульс тока – в правую часть уравнения кристалла с дислокацией. При этом предполагается, что расстояние между дислокациями больше длины свободного пробега квазичастиц. Таким образом, система уравнений диссипативного кристалла принимает следующий вид:

$$\left(K_{0\alpha} - \sum_{\beta \neq \alpha} G_{\alpha\beta}^0 \right) \xi_{\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} \tilde{G}_{\alpha\beta} \xi_{\beta} = f_{\alpha}. \quad (1)$$

В уравнении кристалла с дислокацией (1) в правой части добавляется сила внешнего воздействия – импульс тока. Матрица жесткости описывает статические поля упругой дисторсии, а матрица жесткости описывает динамические эффекты. Кроме того, в уравнении присутствует Фурье образ тензорной функции Грина, который описывает динамическое уравнение теории упругости. Та-

ким образом, уравнение становится более полным и точным, учитывая как статические, так и динамические аспекты кристаллической структуры.

В уравнении для кристалла с дислокацией (1) добавляется обобщенная координата дислокации ξ_α , которая отражает ее положение вдоль нормали к линии. Это позволяет более точно анализировать динамические процессы в скоплении дислокаций.

Таким образом, система уравнений для диссипативного кристалла (1) становится более полной и точной, учитывая как статические, так и динамические аспекты кристаллической структуры. Это особенно важно при изучении отклика скопления дислокаций на различные воздействия, например, импульсный ток.

Реакция системы застопоренных дислокаций

Предполагаем стопор линейным. Это означает, что прогиб дислокации пренебрежимо мал по сравнению с расстоянием между дислокациями. Тогда, мы можем положить в (1) $q \rightarrow 0$. Квадратичное разложение по ω позволяет получить более точную оценку $\tilde{G}_{\alpha\beta}(0, \omega)$ функции, используемой в уравнении для кристалла с дислокацией. Это важно для анализа динамических процессов в скоплении дислокаций и получения достоверных результатов:

$$\left(K_{0\alpha} - \sum_{\beta \neq \alpha} G_{\alpha\beta}^0 \right) \xi_\alpha - i\omega B_\alpha \xi_\alpha + \omega^2 \sum_\beta M_{\alpha\beta} \xi_\beta = f_\alpha. \quad (2)$$

где $M_{\alpha\beta}$ – матрица эффективной массы.

Для решения системы (2) относительно смещений необходимо предварительно привести матрицы $\left(K_{0\alpha} - \sum_{\beta \neq \alpha} G_{\alpha\beta}^0 \right)$, B_α и $M_{\alpha\beta}$ к диагональному виду, что в общем случае невозможно. Поэтому мы будем применять макроскопические коэффициенты эффективной массы M_* , жесткости G_0 и динамического торможения B_* . Тогда для макроскопической моды движения ансамбля как целого $\bar{\xi}$, уравнение (2) представим в форме выражения

$$\omega^2 M_* \bar{\xi} - i\omega B_* \bar{\xi} + G_0 \bar{\xi} = \tilde{f}. \quad (3)$$

Полученное уравнение макроскопического движения является Фурье-образом дифференциального уравнения вида

$$\ddot{\xi} + \gamma \dot{\xi} + h_0 \xi = f,$$

где коэффициент затухания γ определен как $\gamma = B_*$. Проведем оценку коэффициента затухания и эффективной массы. Получим $M_* \sim 10^{-5}$ г/см, $B_* \sim 10^2$ г/(см·с), откуда $\gamma \sim 10^{-7}$ с⁻¹. Сравнивая γ с экспериментальными частотами $\omega \sim 10^4 \div 10^6$ Гц, получаем $\gamma > \omega$,

Упростим анализ, пренебрегая первым слагаемым уравнения (3) и динамическими слагаемыми $\sim \omega^2$.

Таким образом, систему (1) можно преобразовать в более удобную форму:

$$\left(K_{0\alpha} - \sum_{\beta \neq \alpha} G_{\alpha\beta}^0 \right) \xi_{\alpha} - i\omega B_{\alpha} \xi_{\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} \tilde{G}_{\alpha\beta} \xi_{\beta} = f_{\alpha}. \quad (4)$$

Рассмотрим, как система дислокаций ведет себя при наличии стопора с определенной жесткостью, используя полученные уравнения. Предположим, что одна дислокация $\alpha = 0$ зафиксирована на стопоре с определенной жесткостью K_0 , а остальные дислокации находятся в равновесии вокруг нее под постоянным воздействием внешнего напряжения. Важно отметить, что дислокации могут располагаться в разных плоскостях и не иметь общего вектора Бюргерса, как в случае плоского скопления.

Перепишем уравнения (4) и введем силу связи застопоренных дислокаций со стопором $F_0 = K_0 \xi_0$, получим соотношение путем сложения всех уравнений системы (4):

$$F_0 = \sum_{\alpha} f_{\alpha} + i\omega \sum_{\alpha} B_{\alpha} \xi_{\alpha}.$$

В уравнениях, описывающих силу связи застопоренных дислокаций со стопором в статическом пределе $\omega \rightarrow 0$, присутствует сумма всех уравнений системы. Это приводит к соотношению, которое показывает, что сила F_0 , действующая на застопоренную дислокацию, увеличивается в несколько раз, независимо от состава скопления. Таким образом, если на все дислокации застопоренного скопления действует одинаковая сила, то сила на каждую застопоренную дислокацию увеличивается в N раз.

Следует отметить, что существует значительное различие между воздействием импульса на скопление дислокаций, вызванным внешними упругими напряжениями σ , и импульсом электрического тока f_j . Сила Пича-Келера, зависящая от напряжения, пропорциональна вектору Бюргерса b_{α} . Это означает, что в первом случае $F_0 \sim \sigma \sum b_{\alpha}$ происходит усиление действия импульса напряжений на застопоренную дислокацию только в скоплении дислокаций одного знака.

Сила электронного увлечения пропорциональна квадрату вектора Бюргерса. Следствием этого является то, что N -кратное увеличение импульса на застопоренной дислокации происходит в любом благоприятно ориентированном к направлению тока дислокационном скоплении.

Под воздействием импульса электрического тока происходит эффективное стимулирующее разрядку воздействие на знакоскомпенсированные скопления, накапливающиеся в процессе пластической деформации и неэффективно отделяющиеся под действием упругих напряжений.

Сила отрыва дислокации в диссипативном кристалле

Для эффективного решения уравнений (2) предположим, что коэффициенты динамического торможения B одинаковы для всех дислокаций. Для достижения этого мы вводим матрицу жесткости $H_{\alpha\beta}$, которая должна быть эрмитовой и положительно определенной, что обеспечивает стабильность равновесия дислокационного скопления.

$$H_{\alpha\beta} = G_{\alpha\beta}^0 \quad (\alpha \neq \beta), \quad H_{\alpha\alpha} = -\sum_{\beta \neq \alpha} G_{\alpha\beta}^0 \quad (\alpha \neq 0), \quad H_{00} = K_0 - \sum_{\beta \neq 0} G_{\alpha\beta}^0.$$

Следовательно, система уравнений (2) может быть переформулирована в следующем виде:

$$\sum_{\beta} H_{\alpha\beta} \xi_{\beta} H_{\alpha\beta} \xi_{\beta} - i\omega B \xi_{\alpha} = f_{\alpha}. \quad (4)$$

Пусть h_{α} – собственные значения матрицы жесткости, введем соответствующие им ортонормированные собственные векторы $\vec{\eta}^{(\alpha)}$. Тогда спектральное разложение матрицы $H_{\alpha\beta}$ примет вид:

$$H_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma} h_{\gamma} \eta_{\alpha}^{(\gamma)} \eta_{\beta}^{(\gamma)}.$$

Заменим $H_{\alpha\beta}$ в (4) и выполним скалярное умножение обеих частей на $\eta_{\alpha}^{(\gamma)}$, получаем выражение в виде:

$$h_{\gamma} \left(\vec{\eta}^{(\gamma)} \vec{\xi} \right) - i\omega B \left(\vec{\eta}^{(\gamma)} \vec{\xi} \right) = \left(\vec{\eta}^{(\gamma)} \vec{f} \right).$$

Здесь $(\vec{a}, \vec{b}) = \sum_{\alpha} a_{\alpha} b_{\alpha}$. Откуда смещение α -дислокации:

$$\xi_{\alpha} = \sum_{\beta, \gamma} \frac{\eta_{\alpha}^{(\beta)} \eta_{\gamma}^{(\beta)}}{h_{\beta} - i\omega B} f_{\gamma}.$$

Переобозначим время релаксации $\tau_{\beta} = B/h_{\beta}$ и получим выражение для силы F_0 :

$$F_0 = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \frac{\eta_{\alpha}^{(\beta)} \eta_{\gamma}^{(\beta)} f_{\gamma}}{1 - i\omega \tau_{\beta}}. \quad (5)$$

Здесь $f^{(\beta)} = \eta_{\gamma}^{(\beta)} f_{\gamma}$ – проекция вектора силы f_{γ} на собственный вектор $\eta_{\gamma}^{(\beta)}$, тогда:

$$F_0 = \sum_{\alpha, \beta} \frac{\eta_{\alpha}^{(\beta)} f^{(\beta)}}{1 - i\omega \tau_{\beta}}.$$

Различные векторы $\vec{\eta}^{(\gamma)}$ определяют различные независимые моды колебательного движения дислокационного скопления. Согласно общим представлениям, одна из этих мод соответствует макроскопическому движению дисло-

кационного скопления в целом (с учетом движения дислокаций относительно друг друга), а другая – относительному «встречному» движению дислокаций без макроскопического смещения скопления. Обозначим вектор $\vec{\eta}^{(0)}$, соответствующий макроскопической моде. При условии, что сила $f_\alpha \equiv f_j$ одинакова для всех дислокаций, компоненты малы за исключением макроскопической моды, которую будем обозначать индексом $\beta=1$, мы можем приближенно положить $F_0 = \frac{f_j}{1-i\omega\tau_1} \sum_\alpha \left(\eta_\alpha^{(1)}\right)^2$.

С учетом нормировки получим равенство $\sum_\alpha \left(\eta_\alpha^{(1)}\right)^2 = N$. Окончательно для силы F_0 :

$$F_0 = \frac{Nf_j(\omega)}{1-i\omega\tau_1}. \quad (6)$$

Определение стационарного значения силы F_0 происходит с запаздыванием, которое можно описать с помощью интегрального оператора, содержащего ядро, представленное в виде суммы ядер Лапласа с усредненным временем релаксации τ :

$$F_0(t) = N \int_{-\infty}^t f_j(t') e^{-(t-t')/\tau} dt' / \tau. \quad (7)$$

Для приближенной оценки времени τ можно предположить $h_\alpha \approx H_{\alpha\alpha}$, что наименьший диагональный элемент $H_{\alpha\alpha}$ матрицы будет определять наибольшее значение τ_β . Очевидно, что таким элементом будет сумма G для крайних дислокаций скопления, так как они находятся на большем расстоянии от других дислокаций и имеют меньше соседей. Однако, эти крайние дислокации подвержены воздействию статического поля напряжений σ_0 , действующего в противоположном направлении от соседних дислокаций. Таким образом, при рассмотрении соотношения и оценки жесткости мы получаем значение времени релаксации:

$$\tau = B\mu/\sigma_0^2 \sim \gamma/\omega_0^2 \sim (\gamma/\omega_D^2)(\mu/\sigma_0)^2,$$

где $\omega_0^2 \sim \sigma_0^2/(\mu\rho b^2) \sim \omega_D^2 (\sigma_0/\mu)^2$, а ω_D – дебаевская частота.

Формула (6) описывает важный эффект, который проявляется при применении ЭПЭ – пороговый эффект [3]. Он заключается в том, что существует минимальная длительность тока t_u , начиная с которой происходит электростимулирование пластической деформации. Чтобы лучше понять этот эффект, рассмотрим импульс тока синусоидальной формы $f_j = f_0 \sin \pi t/t_u$ и произведем его интегрирование:

$$F_0(t) = \frac{Nf_0}{1+\zeta^2} \left[\sin \pi t/t_u - \zeta \left(\cos \pi t/t_u - e^{-t/\tau} \right) \right], \quad (8)$$

где $\zeta = \pi \tau / t_e$.

Из полученной формулы следует, что на интервале времени $t < \tau$ функция $F_0(t)$ практически не возрастает, то есть действие импульса несущественно в течение этого промежутка времени τ . В результате безынерционном случае (7) максимальное значение функции достигается в максимуме импульса, откуда выражение для наибольшего значения силы отрыва дислокации принимает вид:

$$F_{0\max} = \frac{Nf_0}{1+\zeta^2} \left[1 + e^{-\pi/2\zeta} \right].$$

Данная закономерность обладает явно выраженным пороговым характером по ζ в зависимости от времени и быстро уменьшается пропорционально ζ^{-3} при достижении больших значений. Это соответствует результатам, полученным в ходе эксперимента. Кроме того, эффект запаздывания, рассмотренный в динамике, может проявляться в форме дезактивации электронно-пластического воздействия при воздействии обратного импульса тока, если интервал между импульсами меньше определенного значения τ .

Заключение

В результате проведенного моделирования было установлено, что сила открепления скопления от препятствия зависит от длительности воздействия импульса и имеет пороговый характер. Это означает, что дислокационное скопление может оставаться застопоренным при определенных условиях, несмотря на воздействие внешних сил. Полученные результаты по исследованию отклика скопления на импульсное воздействие электрического тока раскрывают физическую природу порогового эффекта электропластической деформации и используются для интерпретации экспериментальных данных по электропластичности.

Литература

1. Батаронов И.Л. О линейном отклике дислокационного ансамбля на импульсное воздействие / И.Л. Батаронов, Т.А. Бабенко, А.М. Рошупкин // Изв. АН. Сер. Физ. – 1997. – Т. 61. – № 5. – С. 877-885.
2. Рошупкин А.М. Обобщенная восприимчивость дислокаций в диссипативном кристалле / А.М. Рошупкин, И.Л. Батаронов, В.В. Дежин // Изв. АН. Сер. Физ. – 1995. – Т. 59. – № 10. – С. 12-17.
3. Семиноженко В.П. О воздействии внешнего электромагнитного поля на электронное торможение дислокаций / В.П. Семиноженко, С.Е. Шафранюк // Физика низких температур. – 1987. – Т. 13. – № 7. – С. 752-754.

ELECTRON PLASTIC EFFECT SIMULATION IN A LOCKED DISLOCATION CLUSTER

I.L. Bataronov, T.A. Nadeina, R.O. Nadein

Voronezh State Technical University

Abstract: the study of the impact of impulse action on the deformation and structural state of nanocrystalline metal alloys is an urgent task in light of the increased requirements for the operational characteristics of structural materials. When electric pulses pass through the crystalline body, an electroplastic effect (EPE) occurs, which manifests itself in a sharp deformation of the samples. However, despite the successes in experimental studies of EPE, the construction of a quantitative theory of its description meets certain difficulties associated with taking into account the collective effects of the interaction of dislocations - carriers of deformation. In this work, an expression was obtained for the detachment force of dislocation in a locked cluster under the influence of electric current.

Keywords: dislocation cluster, dislocation dynamics, electroplastic effect, Green's function, dissipative crystal, Peach-Koehler force.

ОЦЕНКА РИСКА ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ СЛОЖНЫХ ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

И.Н. Пантелейев, К.С. Поляков

Воронежский государственный технический университет
panteleevignk@yandex.ru

Аннотация: представлена комплексная методика оценки и управления информационными рисками, основанная на вероятностных моделях и биномиальном распределении ущерба. В работе изучена чувствительность модели к изменению параметров, проанализировано критическое число атак и максимально допустимый ущерб. Применяя формулу Бернулли, выделены наиболее вероятные сценарии атак и их последствия. Представлен графический анализ поведения функции риска и предложена математическая модель для оценки эффективности систем защиты.

Ключевые слова: оценка риска, управление рисками, оптимизация решений, математическая модель, ущерб, риск.

Разработана методика оценки и управления информационными рисками, основанная на модели биноминального распределения ущерба. Область применения [1-3] охватывает различные классы автоматизированных систем и позволяет выявить ключевые закономерности возникновения ущерба.

Для анализа данной задачи введём ряд фундаментальных компонентов системы. Пусть S – совокупность всех возможных конфигураций внешних условий, включая как контролируемые, так и неконтролируемые параметры, D – множество допустимых решений (набор альтернативных стратегий или действий, доступных лицу, принимающему решение), R – допустимые исходы (все потенциальные результаты, которые могут быть получены в результате принятых решений). Исход события измеряется по формуле $r = G(s, d)$, где $s \in S$ (сочетание состояния среды) и $d \in D$ (выбранное решение). Для абсолютно разной пары вероятных исходов $r_1, r_2 \in R$ можно определить наиболее предпочтительный, так как на множестве R чаще всего определено стандартное отношение упорядочивания или система предпочтений. Однако наличие неопределенного состояния среды S намного усложняет процесс принятия решений. Для формального описания неопределенности окружающей среды вводится вероятностное пространство (S, A, P_s) , включающее в себя параметры: S, A – σ -алгебра событий измерений и P_s – вероятностная мера, описывающая распределение состояний среды. Пусть R также оснащается σ -алгеброй B , что превращает пару (R, B) в измеримое пространство. Данное решение дает возможность строго определить класс измеримых подмножеств вероятных исходов, необходимый для вероятностного анализа. Будем считать, что для каждого решения $d \in D$ соответствующее отображение $G_d: S \rightarrow R$, определяемое по правилу $G_d(s) = G(s, d)$ для всех $s \in S$, является измеримым относительно пары σ -алгебр A, B . При этом G_d задает на (S, A, P_s) случайный элемент, который порождает на (R, B) вероятностное распределение P_d :

$$P_d(B) = P_s(G_d^{-1}(B)), \quad B \in \mathcal{B}.$$

Пусть задано семейство распределений $P_D = \{P_d, d \in D\}$, и далее не будем рассматривать S в явном виде. Обозначим P как совокупность всех наиболее возможных вероятностных распределений на (R, \mathcal{B}) . В таком случае риском будем называть любое распределение $P \in R$. Допуская возможность того, что множество вероятных исходов лежит во множестве вещественных чисел: $R \in \mathbb{R}$, рисками являются распределения случайных величин, равнозначных с функциями распределения на вещественной прямой.

Рассмотрим математическую модель анализа рисков на множестве вещественных чисел. Пусть в течение некоторого периода времени на автоматизированную систему было совершено n атак. В виду защищённости системы успешна будет лишь часть атак. Пусть для случайно выбранного внешнего воздействия на систему будет введена вероятность p успешной атаки. Чтобы определить уровень риска и степень защищённости системы, требуется рассчитать вероятность того, что из n атак ровно k окажутся успешными. Пусть k – количество появления события $A = \{\text{успешной атаки}\}$ в n повторяющихся однотипных испытаниях – атаках на АС, называется частотой.

Для расчёта вероятности любой частоты при заданных числах p и n воспользуемся формулой Бернулли k ($0 \leq k \leq n$). Тогда возникает вопрос: какой частоте будет соответствовать наибольшая вероятность? Попытаемся определить частоту, которой будет соответствовать наибольшая вероятность, из условия, что вероятность этой частоты не меньше вероятности «предыдущей» и «последующей» частот:

$$P_n(k) \geq P_n(k-1); \quad P_n(k) \geq P_n(k+1). \quad (1)$$

Найдем частоту, имеющую наибольшую вероятность, определяемую из двойного неравенства $np - q \leq k \leq np + p$, с помощью формулы Бернулли. Если $np + p$ – целое число (тогда и $(np - p)$ – целое число), то две частоты $x = np - q$ и $x = np + q$ имеют наибольшую вероятность. Например, при общем количестве атак $n = 7$, и вероятности успешной атаки $p = 0.5$, наиболее вероятные частоты $k = 3, k = 4$, т.е. успешными будут 3 или 4 атаки.

Основываясь на сделанных допущениях, мы получим формулу риска и дадим оценку эффективности защитных механизмов системы. Пусть $P_u(x)$ – вероятность нанесения ущерба от успешной атаки, соответственно x – ущерб. Определим риск как произведение

$$Risk = P_u(x) \cdot x,$$

где $\sum_{k=0,1,2,\dots,n} P_u(x) = C_n^k \cdot p^k \cdot q^{n-k}$ – вероятность реализации угрозы, а x – ущерб, нанесенный в результате ее реализации.

На рис. 1 представлено поведение функции риска в зависимости от величины ущерба. Можно отметить, что функция риска, зависящая от вероятности

нанесения ущерба, достигает максимума при значении k/n . При этом с ростом k значение функции риска возрастает, приближаясь к единице. На рис. 2 представлено поведение функции риска в зависимости от числа успешных атак. Из графика следует, что максимальный ущерб попадает на математическое ожидание ($n \cdot p$) числа успешных атак.

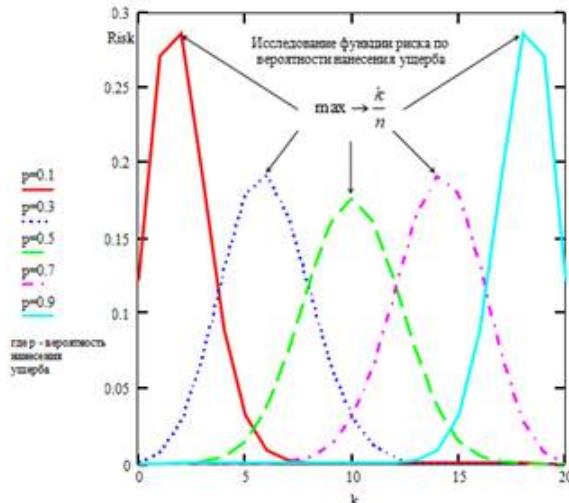


Рис. 1. Поведение функции риска в зависимости от величины ущерба

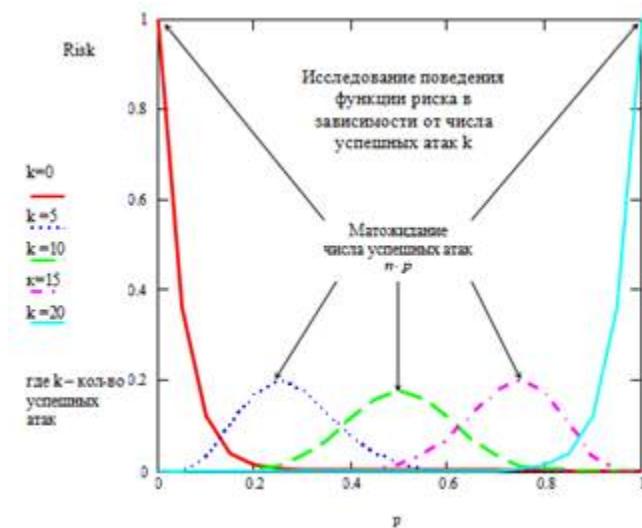


Рис. 2. Поведение функции риска в зависимости от числа успешных атак

Используя формулу математического ожидания ущерба дискретного типа, запишем следующие выражения для расчёта интегрального риска [4-7]:

$$\begin{cases} Risk(x \leq u_1) = M(x \leq u_1) \cdot P(x \leq u_1), \\ Risk(x \geq u_2) = M(x \geq u_2) \cdot P(x \geq u_2), \\ Risk(u_1 \leq x \leq u_2) = M(u_1 \leq x \leq u_2) \cdot P(u_1 \leq x \leq u_2). \end{cases} \quad (2)$$

Абсолютная защищённость, означающая, что риск не превышает заданный:

$$E_{a6c} = 1 - Risk(x \leq u_1) = 1 - \sum_{\forall x \leq u_1} C_n^k \cdot p^k \cdot q^{n-k} \cdot x = 1 - \sum_{\forall x \leq u_1} \frac{n!}{k!(n-k)!} \cdot p^k \cdot (1-p)^{n-k} \cdot x.$$

Рассмотрим функцию риска с точки зрения определения чувствительности её параметров:

$$Risk = \frac{n!}{k!(n-k)!} \cdot p^k \cdot (1-p)^{n-k} \cdot x.$$

Проанализируем чувствительность по вероятности:

$$\frac{\partial Risk}{\partial p} = \frac{n!}{k!(n-k)!} \cdot x \cdot p^k \cdot (1-p)^{n-k} \cdot \left(\frac{k}{p} - \frac{n-k}{1-p} \right).$$

Окончательно получим:

$$S_m^{Risk} = \left(\frac{k}{p} - \frac{n-k}{1-p} \right) \cdot p. \quad (3)$$

Обозначим U_{kp} – максимально возможный ущерб, который допустим для данной АС. Введём величину относительного ущерба по формулам (1-3):

$$\mu = \frac{U_{kp}}{X} = P_n(k_{kp}) = \sum_{m=0}^{k_{kp}} C_n^m \cdot p^m \cdot q^{n-m}. \quad (4)$$

Он имеет смысл отношения реального ущерба, причинённого системе при числе успешных атак k_{kp} , к полному ущербу X , который в свою очередь имеет смысл величины ущерба (4), если бы все n атак были успешными.

Ставится задача определить критическое число атак k_{kp} как функцию от критического ущерба U_{kp} при разных вероятностях успешной атаки p . Данную величину k_{kp} можно получить из условия:

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^{k_{kp}} C_n^m \cdot p^m \cdot q^{n-m} \rightarrow \max, \\ & \begin{cases} \sum_{m=0}^{k_{kp}} C_n^m \cdot p^m \cdot q^{n-m} \leq \mu, \\ 0 \leq k_{kp} \leq n. \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

Полученное условие представляет собой задачу целочисленного математического программирования. Эта задача (4-5) решена численно для количества атак $n < 20$. Данная модель позволяет решать и обратную задачу: зная число максимально допустимых успешных атак можно определить относительную величину ущерба μ .

Литература

1. Сидельников А.П. Модель оценки уязвимости элементов структуры управления информационными ресурсами технических систем / А.П. Сидельников, А.В. Калач, П.А. Сидельников // Технологии техносферной безопасности. – 2023. – № 4 (102). – С. 157-168.
2. Калашников А.О. Модель управления информационными рисками сложных систем // А.О. Калашников, Е.В. Аникина // Информация и безопасность. – 2020. – Т. 23. – № 2. – С. 191-202.
3. Иваненко В.Г. Оценка рисков информационной безопасности автоматизированных систем управления технологическим процессом / В.Г. Иваненко, Н.Д. Иванова, // Вопросы кибербезопасности. 2024. – № 1 (59). – С. 116-123.
4. Пантелеев И.Н. Стохастический анализ риска в условиях неопределенности / И.Н. Пантелеев, А.И. Перова // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий (ПМТУКТ-2018). – Воронеж: ООО "Издательство "Научная книга", 2018. – С. 182-185.
5. Пантелеев И.Н. Анализ модели безопасного продления остаточного ресурса технических систем / И.Н. Пантелеев, А.И. Пантелеев // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий. – Иваново: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановская пожарно-спасательная академия Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий», 2018. – С. 365-369.
6. Пантелеев И.Н. Анализ безопасности технических объектов при возникновении рисковых ситуаций / И.Н. Пантелеев // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий (ПМТУКТ-2017). – Воронеж: ООО "Издательство "Научная книга", 2017. – С. 279-282.
7. Пантелеев И.Н. Особенности принятия решений в условиях неопределенности и риска / И.Н. Пантелеев // Комплексные проблемы техносферной безопасности. – Воронеж: Воронежский государственный технический университет, 2016. – С. 31-37.

RISK ASSESSMENT IN THE ANALYSIS OF COMPLEX TECHNICAL SYSTEMS

I.N. Panteleev, K.S. Polyakov

Voronezh State Technical University

Abstract: this study presents an integrated methodology for information risk assessment and management, utilizing probabilistic models and binomial damage distribution. The research investigates the model's parameter sensitivity, analyzes critical attack thresholds and maximum tolerable damage levels. Through application of Bernoulli's formula, the most probable attack scenarios and their potential impacts are identified. The work includes graphical analysis of risk function behavior and proposes a mathematical framework for evaluating protection system efficacy.

Keywords: risk assessment, risk management, decision optimization, mathematical model, damage, risk.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛАКА В МОЛЕКУЛЕ ВОДОРОДА С УЧЁТОМ КОЛЕБАНИЙ

И.М. Семилетов

Воронежский государственный технический университет
semiletov@cchgeu.ru

Аннотация: ковалентная связь часто изображается в виде перекрывающихся шаров или кругов, соответствующих *s*-орбиталам атомов. В этой работе получены более точные изображения электронного облака для основного состояния молекулы водорода с учётом колебаний.

Ключевые слова: электронное облако, молекулярная орбиталь, молекула водорода, основное состояние, молекулярные колебания.

Когда речь идёт о том, что атомы образуют ковалентную связь в молекуле, говорят о перекрывании электронных облаков этих атомов, что сопровождается изображением двух перекрывающихся шаров или кругов (в случае связи двух *s*-орбиталей; см., например, [1, с. 38] или [2, с. 52], где упомянуто, что это только схема). Более точная диаграмма приведена в [2, с. 60]. Цель настоящей работы заключается в том, чтобы получить ещё более точное изображение электронного облака молекулы водорода, близкое к действительности. Для этого применялись квантовомеханические расчёты, учитывалось также колебание ядер.

В качестве основного источника информации послужила статья [3]. В ней авторы отмечают, что уже существует очень точное решение уравнения Шрёдингера для молекулы водорода [4], где не используется приближение Борна – Оппенгеймера, т. е. движение ядер учитывается сразу же, вместе с движением электронов. Таким образом, и движение электронов, и колебание ядер, и вращение ядер, – всё учтено при решении одного уравнения. И всё же, есть два источника небольших ошибок: (1) при разложении волновой функции в ряд он не продолжается до бесконечности, а обрывается на 106 764 слагаемых (огромное число!), а дальше последовательность значений энергии экстраполируется до бесконечности и (2) не учтены эффекты квантовой электродинамики (поправка к энергии порядка $\alpha^4 Ry$, где α – постоянная тонкой структуры и Ry – ридберг (единица энергии)). Авторы работы [4] пишут, что работают и над учётом эффектов квантовой электродинамики.

В настоящей работе подобная точность невозможна. Тем не менее, следуя примеру авторов статьи [3], была использована программа ORCA [5] и выполнены расчёты full configuration interaction (full CI) – полного конфигурационного взаимодействия, что даёт наибольшую достижимую в программе ORCA точность. При расчётах использовалась атомная система единиц, в которой полагается $e = m_e = \hbar = 1$ (т. е. заряд электрона, его масса и приведённая постоянная Планка равны единице). Во входном файле для программы ORCA были следующие команды:

а) для квантовомеханических расчётов: def2-QZVPP (выбор базиса для разложения волновой функции), ExtremeSCF (наиболее точное вычисление самосогласованного поля), AngularGrid 7 и затем HGridReduced false (тогда точки, в которых производятся вычисления, идут с наименьшим шагом), DoFCI true (для полного конфигурационного взаимодействия), Bohrs (чтобы задавать координаты атомов в боровских радиусах, т. е. в ат. ед.);

б) для вывода электронной плотности: dim1 301 потом dim2 301 и затем dim3 601 (разрешение по оси x было 301 точка, а промежутков между ними ровно 300, такое же разрешение по оси y , а по оси z – 601 точка), min1 -3.0 и затем max1 3.0 (заданы наименьшее и наибольшее значения по оси x в атомных единицах), min2 -3.0 и затем max2 3.0 (такие же значения по оси y), min3 -6.0 и затем max3 6.0 (по оси z в два раза больше), Format Gaussian_Cube (чтобы формат файла электронной плотности был Gaussian-cube), ElDens("Hydrogen.cub"); (в файл Hydrogen.cub в домашней папке пользователя записывалась электронная плотность).

В программе ORCA возможен расчёт колебаний, но только для более простых методов, не для полного конфигурационного взаимодействия. Поэтому расчёт колебаний был сделан следующим образом. Сначала была посчитана энергия при межъядерном расстоянии от 0.5 до 2.6 ат. ед. с шагом 0.01 ат. ед., а между 1.39 и 1.41 ат. ед. (вблизи равновесия) – с шагом 0.001 ат. ед. Также вблизи равновесия значение энергии имели несколько дополнительных значащих цифр. Затем результат интерполировался сплайном в программе SageMath [6] (естественно, можно было использовать любой другой математический пакет). Далее изменялся уровень отсчёта энергии – в программе ORCA он при бесконечном удалении атомов друг от друга равен сумме энергий атомов, но при расчёте колебаний при бесконечном удалении он полагается равным нулю. Для этого к энергии из ORCA необходимо прибавить энергию двух атомов водорода, что в атомных единицах приближенно равно 1, а точнее – приведённой массе электрона, т. е. $\Delta U = m_p / (m_p + 1)$, где $m_p = 1836.15267343$ (масса протона в атомных единицах равна отношению масс протона и электрона, значение этого отношения взято из работы [7, с. 137]).

Затем в программе SageMath численно находился минимум полученной потенциальной энергии, и он оказался таким: $U_e = -0.174413965869025$ ат. ед. при $r_e = 1.4017185714597533$ ат. ед. (индекс e – equilibrium – точка равновесия ядер). Затем в этой точке, снова численно, вычислялась вторая производная от потенциальной энергии, т. е. коэффициент жёсткости колебательной системы при малых колебаниях. Он получился равным $k = 0.369347903493413$ ат. ед. Этих данных достаточно для задания потенциальной энергии Морзе (Morse) [8], которая использовалась в первой области (при r от 0 до 0.5 ат. ед.) и в третьей области (при $r > 2.5$ ат. ед.), где не было данных программы ORCA. В этих областях можно было использовать любую подобную потенциальную энергию, поскольку вероятность нахождения ядер в первой и третьей областях гораздо меньше 1 % (что подтверждается при вычислении квантилей, см. ниже). Коэф-

фициент в показателе экспоненты для потенциальной энергии Морзе получился равным

$$\beta = \sqrt{\frac{k}{2|U_e|}} = 1.02899246038833 \text{ ат. ед.},$$

а величины D_e , определяющие глубину «потенциальной ямы», выбирались отдельно для первой и третьей области так, чтобы «сшить» (приравнять) потенциальную энергию Морзе с энергией, рассчитанной программой ORCA. Они получились равными $D_{e1} = 0.354694828343323$ ат. ед. и $D_{e2} = 0.173284215055238$ ат. ед. Далее в первой и второй области численно решалось одномерное уравнение Шрёдингера для колебания ядер с вышеописанной потенциальной энергией. Также в этом уравнении есть удвоенная приведённая масса колеблющейся системы. В случае равенства масс атомов приведённая масса равна половине массы атома, а удвоенная приведённая масса – массе атома. Было принято предположение, что из-за искажения электронных оболочек атомов при образовании молекулы в среднем удвоенная приведённая масса колеблющейся системы равна массе протона плюс половина массы электрона, т.е. $m_p + 0.5$ в атомных единицах (дейтерий не рассматривался). Если это предположение неверно, относительная ошибка составляет от 0.5 до 1 массы электрона, делённой на массу протона, т. е. около 0.05 %. В третьей области использовалось теоретическое решение, указанное в работе [8]. Затем численное решение и его производная «сшивались» с теоретическим решением и его производной. «Сшивка» обеспечивалась подбором энергии колебаний. Она оказалась равной $E = -0.16448573$ ат. ед., или от дна «потенциальной ямы» 2179.0 см^{-1} , что согласуется со значением 2179.3 см^{-1} , приведённым в таблице II в работе [9] (коэффициент для перевода энергии из атомных единиц в см^{-1} взят оттуда же из таблицы I). Ход потенциальной энергии, рассчитанной программой ORCA, тоже близок к приведённому в работе [9] в таблице III. Некоторые значения для примера показаны в таблице.

Сравнение рассчитанных потенциальных энергий

r , ат. ед.	0.5	1.4	2.5
U , ат. ед. (ORCA)	-0.524827130	-1.173869098792	-1.093317171
U , ат. ед. (работа [9])	-0.5266270	-1.1744744	-1.0939273

Полученная таким образом волновая функция нормировалась на единицу (интеграл от $|\psi|^2$ по r от нуля до бесконечности должен быть равен единице). И нормированная волновая функция использовалась для вычисления вероятности нахождения ядер на разных расстояниях друг от друга ($|\psi|^2$ – это плотность вероятности). Были вычислены квантили – расстояния между ядрами, при которых достигаются 0.5, 1.5, 2.5, ... 99.5 % вероятности, и считалось, что каждая такая квантиль представляет от 0 до 1 %, от 1 до 2 %, от 2 до 3 %, ..., от 99 до 100 % вероятности. Далее в программе ORCA записывались в файлы электронные плотности при межъядерных расстояниях, равных этим квантилям. Затем

все электронные плотности складывались между собой с помощью написанной для этого программы. (Поскольку формат файла электронной плотности Gaussian-cube (текстовый ASCII-файл), числа оттуда без проблем читаются. Необходимо только пропустить первые строки, содержащие служебную информацию (восемь строк для двухатомной молекулы и семь для атома).) Поскольку сложение было без умножения каждого слагаемого на 0.01 (1 % вероятности), электронная плотность стала в 100 раз больше реальной. Далее остаётся это учесть.

Электронное облако обычно изображается с помощью граничной поверхности, такой, что вероятность нахождения электрона в пространстве внутри этой поверхности составляет 90 % [2, с. 19], или 95 % [1, с. 21], или другому подобному числу. В настоящей работе было выбрано значение 90 %, чтобы все изображения поместились в объёме $6 \times 6 \times 12$ ат. ед. Для нахождения вероятности ($90\% = 0.9$) вместо интегрирования приближённо применялось суммирование с последующим умножением на объём ячейки, в котором находится каждое число. Используя данные во входном файле для программы ORCA (см. выше), находим, что этот объём равен $(0.02)^3 = 8 \cdot 10^{-6}$ ат. ед. Таким образом, с учётом того, что атомов два, получилось

$$\text{Sum} = \frac{0.9 \cdot 2}{8 \cdot 10^{-6}} = 225000.$$

Аналогично рассчитываются суммы для 80 %, 70 % и т. д., а также учитывается повышение электронной плотности в 100 раз (см. выше).

Суммирование осуществлялось с помощью ещё одной написанной для этого программы. По предоставленному значению суммы она определяла числовое значение электронной плотности, до которого необходимо суммировать, чтобы набрать заданную сумму.

Наконец, электронное облако изображалось в программе ChimeraX [10], версии 1.10.1. Она открывала файл, созданный ORCA. Далее в поле «Level» справа вставлялось числовое значение электронной плотности, рассчитанное предыдущей программой. Затем в меню Volume → Map Coordinates выставлялись значения Rotation axis 0 1 0 angle 90. Далее Map → Outline box, Graphics → Flat (освещение) и тут же White (фон; для вероятности 90 % обратно Simple). Затем в правом нижнем углу значок, расширяющий изображение, далее Graphics → Orient и Home → Snapshot. Затем слои накладывались друг на друга в программе Krita. Получились изображения, показанные на рис. 1-4.

Следует отметить, что, в отличие от работы [4], в настоящей статье не учитывалось вращение молекулы – оно бы сильно «смазало» изображения на рис. 1-4. Между тем, вращение появляется при комнатной температуре от столкновения молекул в газе при тепловом движении. Это противоречие можно объяснить так: будем считать, что получены «фотоснимки» электронного облака молекулы. Характерное время «выдержки», вследствие принципа неопределённости Гейзенберга, составляет примерно $\hbar/(2kT) \approx 1,28 \cdot 10^{-14}$ с (k – постоянная Больцмана, $T = 298.15$ К – стандартная температура [2, с. 178]).

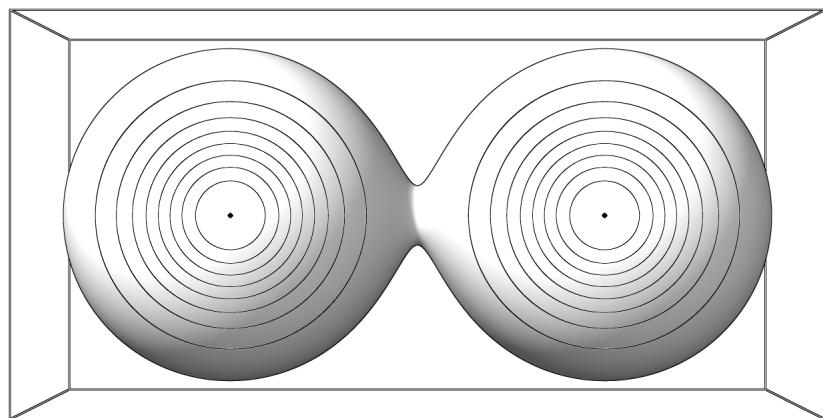


Рис. 1. Электронное облако молекулы водорода при её образовании (рассчитано программой ORCA), атомы на расстоянии 6 ат. ед., линии отделяют области по 10 % вероятности, прямоугольный параллелепипед имеет размеры $6 \times 6 \times 12$ ат. ед., точки обозначают ядра (не в масштабе)

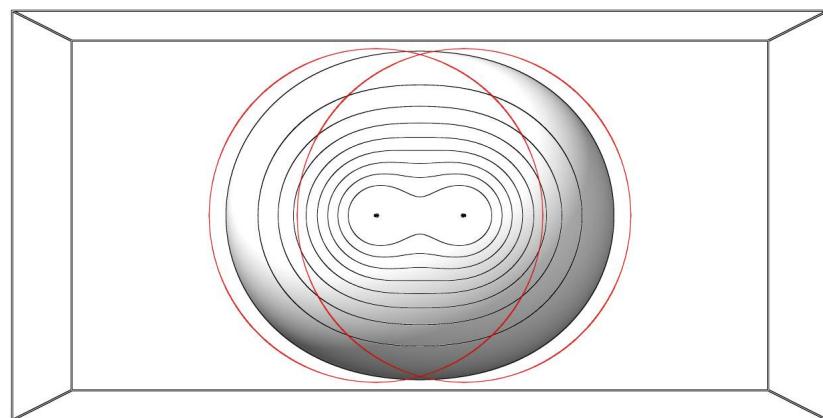


Рис. 2. Электронное облако молекулы водорода, в предположении, что перекрываются электронные облака атомов (показаны красным); атомы на равновесном расстоянии r_e (см. выше), остальное то же, что на рис. 1

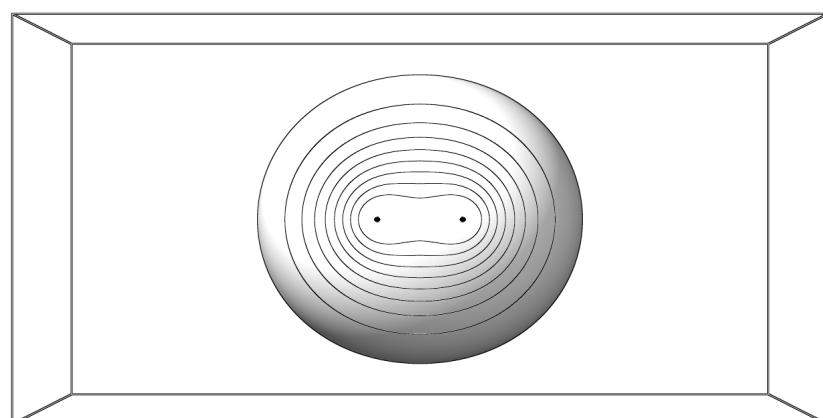


Рис. 3. Электронное облако молекулы водорода (рассчитано программой ORCA), атомы на равновесном расстоянии r_e (см. выше), остальное то же, что на рис. 1

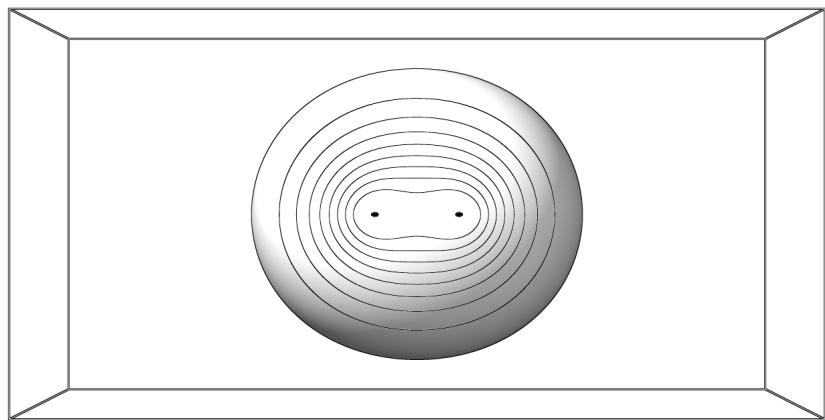


Рис. 4. Электронное облако молекулы водорода (то же, что на рис. 3), но с учётом колебаний около положения равновесия

Литература

1. Общая химия: Учеб. для технических направ. и спец. вузов / Н.В. Коровин. – 3-е изд., испр. – М.: Высш. шк., 2002. – 558 с.
2. Общая и неорганическая химия. Учеб. для вузов / Н.С. Ахметов. – 4-е изд., испр. – М.: Высш. шк., Изд. центр «Академия», 2001. – 743 с.
3. Li J. Hydrogen-molecule spectrum by the many-body GW approximation and the Bethe-Salpeter equation / J. Li and V. Olevano // Phys. Rev. A. – 2021. – Vol. 103. – P. 012809 (6 pp.).
4. Pachucki K. Schrödinger equation solved for the hydrogen molecule with unprecedented accuracy / K. Pachucki and J. Komasa // J. Chem. Phys. – 2016. – Vol. 144. – P. 164306 (4 pp.).
5. Neese F. Software Update: The ORCA Program System–Version 6.0 / F. Neese // WIRES Comput. Molec. Sci. – 2025. – Vol. 15. – Iss. 2. – P. e70019 (10 pp.).
6. SageMath, the Sage Mathematics Software System, version 10.7. – 2025. – URL: <https://www.sagemath.org/> (дата обращения: 30.10.2025).
7. Navas S. Review of particle physics / S. Navas et al. (Particle Data Group) // Phys. Rev. D. – 2024. – Vol. 110. – P. 030001 (2382 pp.).
8. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels / P.M. Morse // Phys. Rev. – 1929. – Vol. 34. – P. 57-64.
9. Sharp T.E. Potential-energy curves for molecular hydrogen and its ions / T.E. Sharp // At. Data. – 1971. – Vol. 2. – P. 119-169.
10. Meng E.C. UCSF ChimeraX: Tools for structure building and analysis / E.C. Meng et al. // Protein Sci. – 2023. – Vol. 32. – Iss. 11. – P. e4792 (13 pp.).

MODELING OF ELECTRON CLOUD IN HYDROGEN MOLECULE TAKING INTO ACCOUNT VIBRATIONS

I.M. Semiletov

Voronezh State Technical University

Abstract: a covalent bond is often depicted as overlapping spheres or circles, corresponding to s -orbitals of the atoms. In this work, more accurate images of the electron cloud were obtained for the ground state of the hydrogen molecule, taking into account vibrations.

Keywords: electron cloud, molecular orbital, hydrogen molecule, ground state, molecular vibrations.

**О ПРИМЕНЕНИИ НЕЙРОСЕТЕЙ
ДЛЯ ГАММА-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ПРОБ
ПРИ РАДИОЭКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ**

Ю.Г. Смирнов

Ухтинский государственный технический университет
ysmirnov@ugtu.net

Аннотация: в работе рассмотрены вопросы применения искусственных нейронных сетей для обработки результатов лабораторных исследований проб с использованием сцинтилляционного гамма-спектрометра. Представлен обзор состояния проблемы на современном этапе. Отмечены преимущества применения глубоких сверточных нейронных сетей в обработке спектрометрической информации при радиоэкологических исследованиях.

Ключевые слова: искусственные нейронные сети, гамма-спектрометрия, радиоэкология.

Качественный и количественный анализ радиоактивных изотопов требуется при описании и оценке радиационной обстановки для контроля окружающей среды в радиоэкологии, радиационной медицине и других смежных областях [1]. При радиоэкологических исследованиях местности широко используются гамма-спектрометрические методы исследований отобранных проб с использованием лабораторных спектрометров со сцинтилляционными детекторами. При этом обычно определяется содержание естественных радионуклидов U-238, Th-232 и K-40. В частности, такие исследования актуальны для Ухтинского района, где с 1929 по 1956 годы добывался практически весь советский радий из подземных вод Ухтинского нефтяного месторождения [2].

Существует множество способов и уже реализованных программных продуктов с классическими подходами для обработки спектров излучения, однако актуальным и активно развивающимся на сегодняшний день является вопрос о применении с этой целью искусственных нейронных сетей. Нейронные сети успешно зарекомендовали себя в различных сферах науки и техники, связанных с классификацией, прогнозированием и управлением [3]. Преимущества применения нейронных сетей заключаются в существенном увеличении скорости обработки информации, поскольку массовые с самые трудоемкие вычисления приходятся на момент обучения нейросети, а также в автоматизации процесса со значительным исключением человеческого фактора.

Целью данной работы является рассмотрение возможностей нейронных сетей для обработки гамма-спектрометрической информации при измерении активности естественных радиоактивных изотопов при радиоэкологическом мониторинге загрязненных территорий.

Активное изучение вопроса возможности применения нейронных сетей для обработки спектрометрической информации началось после публикации в 1995 г. американскими исследователями работы [4]. В этой статье авторы рассматривали возможность идентификации изотопов в радиоактивных отходах по

данным альфа-спектрометрии с использованием полносвязной трехслойной нейросети. Для обучения нейронной сети использовали стандартный алгоритм обратного распространения ошибки. Сеть обучали в течение трех тысяч эпох до начала постоянного увеличения ошибки валидации. Получены очень неплохие результаты.

Авторы работы [5] предлагают использовать метод идентификации радионуклидов по реконструированному физическому спектру гамма-излучения с использованием трехслойной нейронной сети прямого распространения. В терминологии нейронных сетей данная задача относится к классу классификационных, для решения которой применимы многослойные полносвязные сети прямого распространения. В результате исследования были сделаны выводы, что метод идентификации нейронными сетями радиоактивных изотопов по гамма-спектру достаточно трудоемок на предварительном этапе и чувствителен к качеству и количеству информации в обучающей выборке. При этом оказалось, что обученная нейронная сеть показала результаты близкие к 100 % для идентификации единичных нуклидов с простым линейчатым спектром, но при идентификации нуклидов, обладающих сложным линейчатым спектром, получились неоднозначные результаты. Тем не менее ввиду несомненного преимущества благодаря однопроходной процедуре идентификации, метод является перспективным и нуждающимся в дальнейшем развитии.

В работе [3] рассмотрены проблемы не только качественного определения изотопов, но и оценки их активностей в источниках естественного происхождения. Автор рекомендует использовать трехслойные модели искусственных нейронных сетей с одним скрытым слоем. В своей работе он уменьшил разрешение спектра гамма-излучения урана-238, тория-232 и калия-40 до двадцати четырех каналов и использовал эти данные для нейронов входа. Опытным путем подбиралось число нейронов в скрытом слое, а также проводился поиск оптимального количества эпох при обучении. В заключении автор отмечает, что наилучшие результаты показала нейронная сеть с архитектурой, в которой число нейронов в скрытом слое равно восьми. Оптимальное количество эпох для обучения составило двадцать тысяч, при превышении этого значения начинает расти среднеквадратическая ошибка. Построенная искусственная нейронная сеть показала хорошие результаты для определения активности естественных радиоактивных изотопов.

Хорошие результаты также были получены при решении схожей задачи, связанной с анализом рентгенограмм, с помощью глубокой свёрточной нейросети [6]. За основу для построения этой нейросети была принята конфигурация нейросети Inception ResNet. На международных соревнованиях по классификации изображений Imagenet Recognition Challange первое место последние несколько лет занимают именно глубокие нейронные свёрточные сети, построенные по данной архитектуре. Сеть была реализована в программном модуле на языке Python с использованием библиотеки машинного обучения Tensorflow от компании Google.

Аналогичный подход предлагается в работе [7]. Авторы анализируют применимость методов глубокого обучения в приложении к задачам идентификации гамма-излучающих нуклидов и обработке сложносоставных спектров. Методы глубокого обучения требуют очень большого объема данных для обучения. Однако, в области гамма-спектроскопии имеется большое количество как реально измеренных, так и синтетических данных, полученных из программ моделирования физики процесса, таких как Geant4, GADRAS-DRF и некоторых других. Немаловажно, что эти данные размечены, т.е. построено сопоставление результатов измерения – нуклид. Это позволяет успешно собрать репрезентативные данные для обучения моделей. В работе показаны текущие результаты применения глубокого обучения на сверточных архитектурах (CNN) и на архитектурах U-Net.

Заключение

Использование искусственных нейронных сетей в обработке спектрометрической информации является актуальной проблемой, решение которой позволяет повысить эффективность и точность лабораторных анализов.

Несомненным преимуществом нейронных сетей по сравнению с классическими подходами является отсутствие потребности в сложной математической модели, ускорение обработки большого количества данных, исключение человеческого фактора.

Анализ литературных данных показал, что требуется более глубокая проработка следующих вопросов: работа нейросети с полным спектром, а не с отдельными пиками излучения, использование на стадии обучения не модельных, а реальных спектров, изучение способности нейронных сетей проводить анализ образцов со слабой активностью.

Для оценки загрязнений почв радиоактивными элементами можно рассмотреть использование различных подходов, основанных на моделях машинного обучения и глубокого обучения. Выбор конкретной нейросетевой архитектуры зависит от решаемой задачи и доступных данных.

Наиболее перспективными моделями нейросетей для решения задачи обработки проб при радиоэкологических исследованиях с использованием лабораторной гамма-спектрометрии, на наш взгляд, являются глубокие предобученные нейронные сети со сверточной архитектурой.

Литература

1. Спиров Р.К., Никитин А.В. Нейронные сети в спектрометрии радиоактивных излучений: состояние проблемы // Экологический вестник, 2016, № 1 (35). С.124-128.
2. Бекман И.Н. Радий. Учебное пособие. М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. 142 с. URL: <http://profbeckman.narod.ru/Radium.files/Radium.pdf>
3. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design and application / I.A. Basheer, M. Hajmeer // Journal of microbiological methods – 2000. – №. 43. – P. 3-31.
4. Nuclear Spectral Analysis via Artificial Neural Networks for Waste Handling / P.E. Keller, L.J. Kangas, G.L. Troyer, Sh. Hashem, R.T. Kouzes // IEEE Transactions on Nuclear Science –1995. – Vol. 42, № 4. – Pp. 709–715.

5. Нейронная сеть для идентификации нуклидов по гамма-спектру / А.В. Кочергин, С.С. Пивоварцев // Искусственный интеллект – 2008. – № 4. – С. 600–604.
6. Минязев Р.Ш., Румянцев А.А., Баев А.А., Баева Т.Д. Подходы к построению нейросети для бинарной классификации рентгенограмм // Известия РАН. серия физическая, 2020, том 84, № 12, с. 1758–1762.
7. Арбузов А.В., Бредихин И.С., Муравьев Р.А. 2024. Использование методов на основе глубоких нейронных сетей для идентификации и декомпозиции гамма-излучающих нуклидов в сложносоставных спектрах. PREPRINTS.RU. <https://doi.org/10.24108/preprints-3113006>.

ON THE USE OF NEURAL NETWORKS FOR GAMMA-SPECTROMERIC ANALYSIS OF SAMPLES IN RADIOECOLOGICAL STUDIES

Yu.G. Smirnov

Ukhta State Technical University

Abstract: the paper considers the use of artificial neural networks for processing the results of laboratory studies of samples using a scintillation gamma spectrometer. An overview of the current state of the problem is presented. The advantages of using deep convolutional neural networks in the processing of spectrometric information in radioecological studies are highlighted.

Keywords: artificial neural networks, gamma-ray spectrometry, radioecology.

ЗАДАЧА ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМОЙ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ НА УПРАВЛЕНИЕ И ФАЗОВУЮ ПЕРЕМЕННУЮ И ЕЕ ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

А.Ф. Тараканов

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж
aft777@mail.ru

Аннотация: получено аналитическое и численное решение задачи оптимального управления линейной динамической системой с закрепленными концами, квадратичным функционалом, ограничением на управление и квадратичным фазовым ограничением.

Ключевые слова: оптимальное управление, ограничение на управление, фазовое ограничение, условие дополняющей нежёсткости.

В задачах оптимального управления часто присутствуют ограничения на фазовые переменные [1-19]. В работе проводится аналитическое и численное решение задачи оптимального управления линейной динамической системой с закрепленными концами, квадратичным функционалом, ограничением на управление и квадратичным фазовым ограничением. Трудности исследования и численного решения таких задач связаны, во-первых, с проблемой сопряжения участков оптимальной траектории, а во-вторых, с программной реализацией численных процедур и необходимостью учета ограничений на управление и фазовую переменную.

Рассматривается задача оптимального управления динамической системой с регулярным фазовым ограничением:

$$\dot{x}(t) = -\omega x(t) + ku(t), \quad t \in [t_0, T], \quad x(t_0) = x_0 > X_{\min}, \quad x(T) = x_T,$$

$$0 < \omega \leq 1, \quad 0 < k \leq 1, \quad 0 \leq u(t) \leq a,$$

$$g(x(t), t) = x(t) - X_{\max} + b(t - cT)^2 \geq 0,$$

$$X_{\max} > 0, \quad b > 0, \quad 0 < c \leq 1,$$

$$J(u) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^T u^2(t) dt \rightarrow \min.$$

Классом допустимых управлений считаем множество всех кусочно-непрерывных, кусочно-гладких функций $u(t)$ с разрывами первого рода и определённых на заданном отрезке времени $[t_0, T]$. Полагаем, что значения управления $u(t)$ в точке разрыва τ равно пределу справа, то есть $u(\tau) = u(\tau + 0)$.

При отсутствии управления, то есть $u(t) = 0$, из уравнения движения системы имеем экспоненциально замедленно убывающую функцию (рис. 1)

$$x(t) = x_0 e^{-\omega(t-t_0)}, \quad t_0 = 0.$$

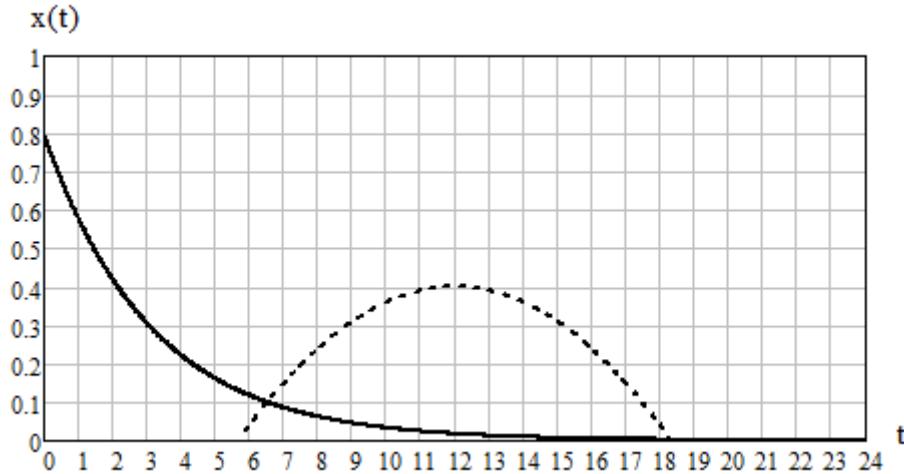


Рис. 1. Графики траектории (сплошная линия) при управлении $u(t) = 0$ и фазового ограничения (пунктирная линия)

Так как $x(t_0) = x_0 > X_{\max}$, то из рис. 1 видно, что существует такой момент времени τ_1 , что при всех $t \in [t_0, \tau_1)$ траектория $x(t)$ рассматриваемой системы не залегает на фазовом ограничении. Поэтому в соответствии с требованием $J(u) \rightarrow \min$ оптимальным управлением является $u_0^*(t) = 0$, $t \in [t_0, \tau_1)$, а первая часть оптимальной траектории имеет вид:

$$x_0^*(t) = x_0 e^{-\omega(t-t_0)}, \quad t \in [t_0, \tau_1].$$

Подставим $x_0^*(t)$ в фазовое ограничение и приравняем к нулю:

$$g(x_0^*(t), t) = x_0 e^{-\omega(t-t_0)} - X_{\max} + b(t - cT)^2 = 0.$$

Получили уравнение для нахождения момента времени τ_1 захода траектории на границу фазового ограничения:

$$x_0 e^{-\omega(\tau_1-t_0)} - X_{\max} + b(\tau_1 - cT)^2 = 0.$$

Данное уравнение решается численно.

Для дальнейшего решения задачи при $t \geq \tau_1$ составим функцию

$$H(u, x, \psi) = (-\omega x(t) + ku)\psi - \frac{1}{2}u^2$$

и лагранжиан

$$L(t, u, x, \psi) = H(u, x, \psi) + \mu(t)(x(t) - X_{\max} + b(t - cT)^2),$$

где $\psi \in E^n$ – сопряжённая переменная, $\mu(t)$ – множитель Лагранжа. Из необходимого условия экстремума с учётом ограничения $0 \leq u(t) \leq a$ находим управление, на котором функция H достигает максимума:

$$\frac{\partial H}{\partial u} = k\psi(t) - u^*(t) = 0,$$

$$u^*(t) = \begin{cases} 0, & k\psi(t) < 0, \\ k\psi(t), & 0 \leq k\psi(t) \leq a, \\ a, & k\psi(t) > a. \end{cases}$$

Для сопряженной переменной дифференциальное уравнение имеет вид

$$\dot{\psi}(t) = -\frac{\partial L}{\partial x} = \omega\psi(t) - \mu(t), \quad \psi(T) = \pi = \text{const},$$

причём выполнены условия дополняющей нежёсткости

$$\mu(t) \geq 0, \quad \mu(t)g(x(t), t) = 0.$$

Пусть $[\tau_1, \tau_2]$ – отрезок времени, в течение которого траектория $x(t)$ залегает на границе фазового ограничения, то есть $g(x(t), t) = 0$, $\mu(t) > 0$. Из равенства

$$g(x(t), t) = x(t) - X_{\max} + b(t - cT)^2 = 0$$

имеем оптимальную траекторию

$$x_g^*(t) = X_{\max} - b(t - cT)^2.$$

Тогда из уравнения

$$\dot{x}_g^*(t) = -2b(t - cT) = -\omega x_g^*(t) + k u_g^*(t)$$

получим оптимальное управление

$$u_g^*(t) = \frac{1}{k} (\omega(X_{\max} - b(t - cT)^2) - 2b(t - cT)).$$

Отсюда с учётом структуры оптимального управления $u_g^*(t) = k\psi_g(t)$ следует, что

$$\begin{aligned} \psi_g(t) &= \frac{1}{k^2} (\omega(X_{\max} - b(t - cT)^2) - 2b(t - cT)), \quad t \in [\tau_1, \tau_2], \\ \dot{\psi}_g(t) &= -\frac{2\omega b}{k^2} (t - cT) - 2b. \end{aligned}$$

В то же время, из уравнения для сопряженной системы имеем равенство

$$\dot{\psi}_g(t) = \omega\psi_g(t) - \mu(t) = \frac{\omega}{k^2} (\omega(X_{\max} - b(t - cT)^2) - 2b(t - cT)) - \mu(t).$$

Из последних двух равенств получаем выражение для множителя Лагранжа:

$$\mu(t) = \frac{\omega^2}{k^2} (X_{\max} - b(t - cT)^2) + 2b.$$

При $t > \tau_2$ имеем $\mu(t) \equiv 0$ и дифференциальное уравнение для сопряженной системы

$$\dot{\psi}(t) = \omega\psi(t), \quad t \in [T, \tau_2], \quad \psi(T) = \pi = \text{const}.$$

Его решение:

$$\psi(t) = \pi e^{\omega(t-T)}.$$

Тогда оптимальное управление на $[\tau_2, T]$ имеет вид

$$u^*(t) = \begin{cases} 0, & \pi k e^{\omega(t-T)} < 0 \\ \pi k e^{\omega(t-T)}, & 0 \leq \pi k e^{\omega(t-T)} \leq a, \\ a, & \pi k e^{\omega(t-T)} > a. \end{cases}$$

При $u^*(t) = \pi k e^{\omega(t-T)}$ для определения оптимальной траектории $x_u^*(t)$ имеем дифференциальное уравнение

$$\dot{x}(t) = -\omega x(t) + \pi k^2 e^{\omega(t-T)}.$$

Его решение следующее:

$$x_u^*(t) = \frac{\pi k^2}{2\omega} (e^{\omega(t-T)} - e^{\omega(2\tau_2 - T - t)}) + C_u e^{\omega(\tau_2 - t)}.$$

Константа C_u определяется из равенства $x_g^*(\tau_2) = x_u^*(\tau_2)$:

$$X_{\max} - b(\tau_2 - cT)^2 = \frac{\pi k^2}{2\omega} (e^{\omega(\tau_2 - T)} - e^{\omega(2\tau_2 - T - \tau_2)}) + C_u e^{\omega(\tau_2 - \tau_2)},$$

$$C_u = X_{\max} - b(\tau_2 - cT)^2.$$

Константа π определяется из равенства $\psi_g(\tau_2) = \psi(\tau_2)$:

$$\pi = \frac{1}{k^2} (\omega(X_{\max} - b(\tau_2 - cT)^2) - 2b(\tau_2 - cT)) e^{\omega(T - \tau_2)}.$$

Момент времени τ_2 находится численно из равенства $x_u^*(T) = x_T$.

При $u^*(t) \equiv a$ имеем уравнение

$$\dot{x}(t) = -\omega x(t) + a$$

и его решение

$$x_a^*(t) = \left(x_u^*(\theta) - \frac{a}{\omega} \right) e^{-\omega(t-\theta)} + \frac{a}{\omega},$$

где $\theta \geq \tau_2$ – момент времени, когда при $\pi k e^{\omega(t-T)} > a$ может произойти переключение управления на значение a , $x_u^*(\theta)$ – правый конец траектории $x_u^*(t)$ (так как $x_g^*(\tau_2) = x_u^*(\tau_2)$). Момент θ находится численно из уравнения $u_u^*(\theta) = a$.

Итак, получено решение задачи:

$$u^*(t) = \begin{cases} 0, & t \in [t_0, \tau_1], \\ u_g^*(t), & t \in [\tau_1, \tau_2], \\ u_u^*(t), & t \in [\tau_2, \theta], \\ a, & t \in [\theta, T], \end{cases} \quad x^*(t) = \begin{cases} x_0^*(t), & t \in [t_0, \tau_1], \\ x_g^*(t), & t \in [\tau_1, \tau_2], \\ x_u^*(t), & t \in [\tau_2, \theta], \\ x_a^*(t), & t \in [\theta, T]. \end{cases}$$

Положим $t_0 = 0$, $T = 24$, $x_0 = 0.8$, $x_T = 1.5$, $k = 0.9$, $\omega = 0.35$, $X_{\max} = 0.4$, $b = 0.01$, $c = 0.5$, $a = 1$. Получены значения: $\tau_1 \approx 6.391$, $\tau_2 \approx 15.067$, $\theta \approx 23.5798$, части управления и траектории (числа округлены до четырёх знаков):

$$\begin{aligned} u_0^*(t) &= 0, & t \in [t_0, \tau_1], \\ u_g^*(t) &= 0.0711t - 0.0039t^2 - 0.1378, & t \in [\tau_1, \tau_2], \\ u_u^*(t) &= 0.0003e^{0.35t}, & t \in [\tau_2, \theta], \\ x_0^*(t) &= 0.8e^{-0.35t}, & t \in [0, \tau_1], \\ x_g^*(t) &= 0.4 - 0.01(t - 12)^2, & t \in [\tau_1, \tau_2], \\ x_u^*(t) &= 46.9374e^{-0.35t} + 0.0003e^{0.35t}, & t \in [\tau_2, \theta], \\ x_a^*(t) &= 2.8571 - 5985.5577e^{-0.35t}, & t \in [\theta, T]. \end{aligned}$$

На рисунках ниже показаны графики траектории и оптимального управления:

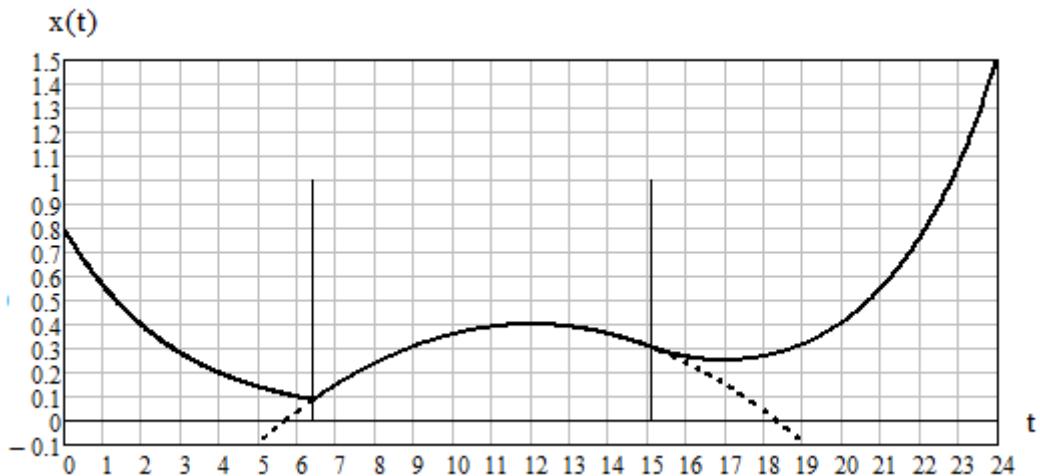


Рис. 2. Графики оптимальной траектории (сплошная линия) и фазового ограничения (пунктирная линия); вертикальные линии обозначают моменты входа траектории на фазовое ограничение и выхода с него

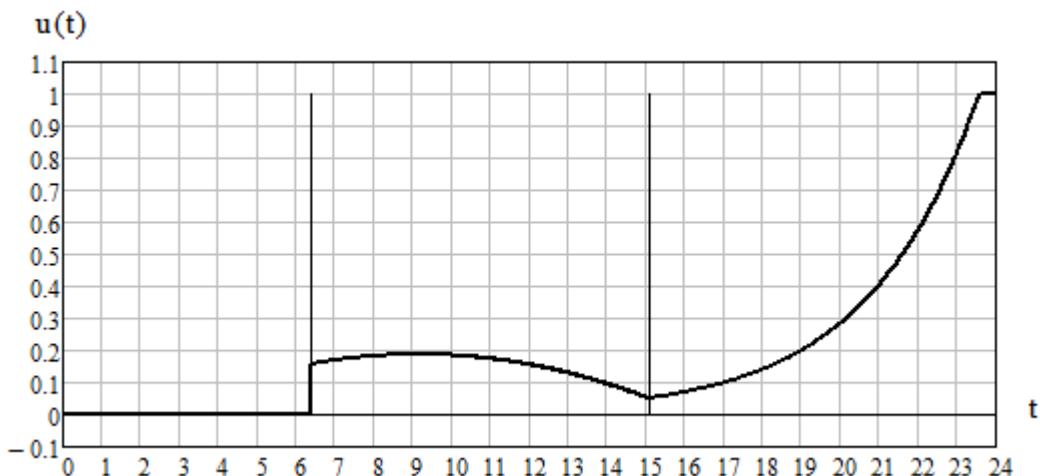


Рис. 3. График оптимального управления

Литература

1. Иоффе А.Д., Тихомиров В.М. Теория экстремальных задач. — М.: Наука, 1974. 480 с.
2. Арутюнов А.В., Асеев С.М. Принцип максимума в задачах оптимального управления с фазовыми ограничениями. Невырожденность и устойчивость // Докл. РАН, 1994. Т. 334, № 2. С. 134-137.
- 3 Арутюнов А.В., Тынянский Н.Т. О принципе максимума в задаче с фазовыми ограничениями // Изв. АН СССР. Сер. техн. Кибернетика, 1984. № 4. С. 60-68.
4. Дубовицкий А.Я., Дубовицкий В.А. Необходимые условия сильного минимума в задачах оптимального управления с вырождением концевых и фазовых ограничений // Успехи мат. наук, 1985. Т. 40, № 2. С. 175-176.
5. Федоров В.В. Принцип максимума для минимаксной задачи управления с фазовыми ограничениями // Вестник МГУ. Сер. Вычисл. матем. и киберн., 1977. № 4. С. 36-46.
6. Berkovitz L.D. On control problems with bounded state variables // J. of Math. Anal. and Appl., 1962. Vol. 5. pp. 488-498.
7. Bryson A.E. Jr., Denham W.F., Dreyfus S.E. Optimal programming problems with inequality constraints I: Necessary conditions for extremal solutions // J. AIAA, 1963. Vol. 1. No. 11. pp. 2544-2550.
8. Chang S.S.L. Optimal control in bounded phase space // Automatica, 1962. Vol. 1. pp. 55-67.
9. McIntyre J., Paiewonsky B. On optimal control with bounded state variables // Advances in Control Systems, 1967. Vol. 5. pp. 389-419.
10. Russell D.L. Penalty functions and bounded phase co-ordinates // SIAM. J. on Control and Optim., 1965. Vol. 2. pp. 409-422.
11. Jacobson D.H., Lele M.M., Speyer J.L. New necessary conditions of optimality for control problems with state-variable inequality constraints // J. of Math. Anal. and Appl., 1971. Vol. 35. pp. 255-284.
12. Makowski K., Neustadt L.W. Optimal control problems with mixed control-phase variable equality and inequality constraints // SIAM J. on Control and Optim., 1974. Vol. 12. pp. 184-228.
13. Maurer H. On optimal control problems with bounded state variables and control appearing linearly // SIAM J. on Control and Optim., 1977. Vol. 15. No. 3. pp. 555-559.
14. Richard F. Hartl, Suresh P. Sethi, Raymond G. Vickson. A Survey of the Maximum Principles for Optimal Control Problems with State Constraints // SIAM Review, 1995. Vol. 37. No. 2, pp. 181-218.

15. Pytlak R. Numerical methods for optimal control problems with state constraints. – Berlin: Springer, 1999. 218 p.
16. Loxton R.C., Teo K.L., Rehbock V., Yiu K.F.C. Optimal control problems with a continuous inequality constraint on the state and the control // Automatica, 2009. Vol. 45. pp. 2250-2257.
17. Clarke F.H., de Pinho M.R. Optimal control problems with mixed constraints // SIAM J. on Control and Optim., 2010. No. 48. pp. 4500-4524.
18. Biswas H.A., de Pinho M.R. A maximum principle for optimal control problems with state and mixed constraints // ESAIM on Control, Optim. and Calc. of Var., 2015. No. 21. pp. 939–951.
19. Boccia A., de Pinho M.R., Vinter R.B. Optimal control problems with mixed and pure state constraints // SIAM J. on Control and Optim., 2016. Vol. 54. No. 6. pp. 3061-3083.

OPTIMAL CONTROL PROBLEM OF A DYNAMIC SYSTEM WITH CONTROL AND PHASE VARIABLE CONSTRAINTS AND ITS NUMERICAL SOLUTION

A.F. Tarakanov

Russian Air Force Military Educational and Scientific Center “Air Force Academy
named after Professor N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin”, Voronezh

Abstract: an analytical and numerical solutions of the optimal controlling of a linear dynamic system with fixed endpoints, quadratic functional, control and quadratic phase constraint are obtained.

Keywords: optimal control, control constraint, phase constraint, complementary non-rigidity condition.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛН ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ШЕСТИУГОЛЬНЫХ ФРАКТАЛЬНЫХ РЕШЕТКАХ

Р.Р. Трофимов, Н.Н. Конобеева

Волгоградский государственный университет
yana_nn@volsu.ru, r.trofimov@volsu.ru

Аннотация: в этой работе мы изучаем квантовый транспорт электронов в системе нанопроволок из связанных фрагментов фрактальной структуры. Мы рассматриваем геометрию решетки в виде треугольника Серпинского, сделанного из шестиугольников. В нашем случае мы учитываем не только переходы между соседними узлами шестиугольного сегмента, но и переход через один узел.

Ключевые слова: фрактальная решетка, транспорт электронов, нанопроволоки.

В настоящее время фракталы широко используются в медицине, биологии, физике, информационных системах, в новейших поколениях спутниковой связи, в интернет вещах [1, 2] и в других проектах по приему, передаче и преобразованию радиоволн. Это связано как с использованием специальных алгоритмов конфигурирования в случае интернет-сетей [3], так и с тем, что фракталы позволяют изменять свойства материалов путем изменения их структуры [4, 5]. На данный момент мало изучено поведение электронов в квантовых электронных системах нецелых и фрактальных размерностей. Поэтому в этой работе мы уделяем пристальное внимание квантовому транспорту электронов в объектах фрактальной размерности. Но нужно отметить, что типичные случайные блуждания внутри фрактальной решетки позволяют наблюдать аномальную диффузию [6], в случае фотонами в фотонной решетке фрактальной размерности были экспериментально исследованы [7], этот случай дает нам понять, что ведутся работы по созданию и изучению свойств новых материалов фрактальной размерности, в которых возможен транспорт электронов [8, 9]. Нашу систему можно соотнести с фракталами из графена, которые имеют шестиугольную структуру [10, 11], которые сейчас являются перспективными, потому что им нашли применение в качестве основного материала в устройствах антенны [12] и фотодетектора [13], что доказывает актуальность фрактальной геометрии как с теоретической, так и с практической точки зрения. Ранее упомянутые исследования имели дело с переходами между ближайшими соседями. В нашей работе мы добавили переход через один узел, что добавляет туннельный эффект, который может значительно повлиять на изменение динамики волновой функции.

Мы рассматриваем перенос электронов во фрактальной системе, попечное сечение которой представляет собой треугольник Серпинского (рис. 1а). На рис. 1б показаны связи узлов, между которыми возможны переходы электронов. Связи между ближайшими соседями обозначены сплошными линиями, а между более удаленными соседями (через один узел) – пунктирными линиями. Далее мы предполагаем, что электроны запускаются в нашу систему с фрактальной структурой и попадают в верхний левый узел (номер 1). Узлы пронумерованы в порядке сверху вниз, слева направо.

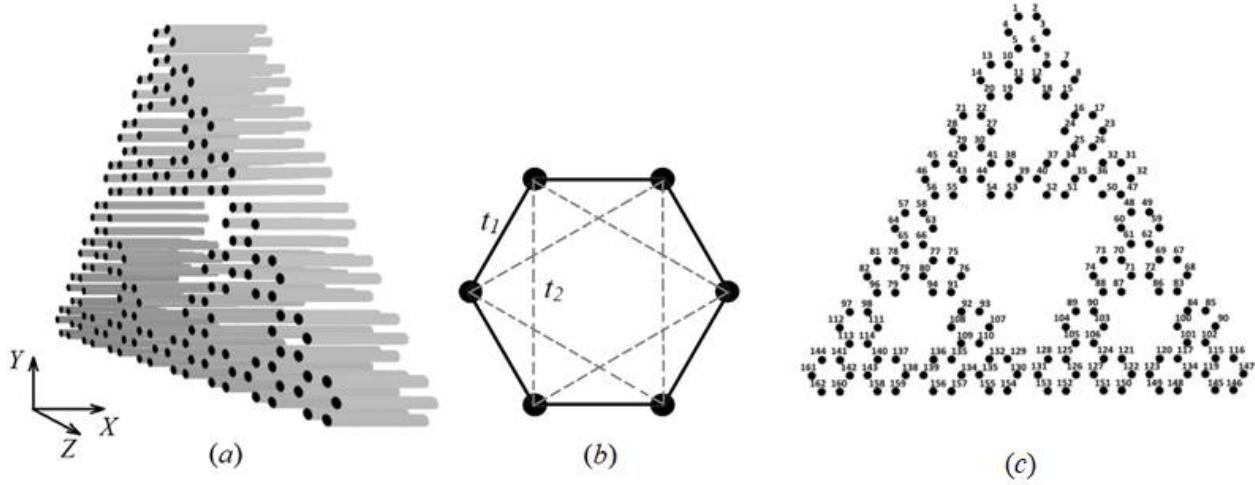


Рис. 1. Схематичное представление геометрии: (a) – общий вид; (b) – связи между узлами, (c) – нумерация узлов

Оператор Гамильтона в этом случае имеет следующий вид [24]:

$$H = - \sum_{mj\sigma} t_{mj} a_{m\sigma}^+ a_{j\sigma}, \quad (1)$$

здесь t_{mj} – интеграл прыжков между узлами m и j фрактальной решетки, который имеет два значения: t_1 и $t_2 = \alpha \cdot t_1$, α характеризует ослабление связи в случае переходов второго типа (пунктирная линия на рис. 1b) по сравнению со связью между соседними узлами – операторы создания/аннигиляции электронов на m -м узле со спином σ .

Отметим, что здесь мы рассматриваем только одноэлектронное приближение, поскольку учет кулоновского отталкивания не приводит к существенным изменениям результатов. Далее запишем уравнение движения Гейзенберга:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_{m\sigma} = [a_{m\sigma}, H], \quad (2)$$

где i – мнимая единица, \hbar – постоянная Планка, $|a_{m\sigma}|^2$ – вероятность обнаружить электрон со спином σ в m -м узле, квадратные скобки в правой части обозначают коммутатор.

Мы предполагаем, что вероятность встречи электрона со спином σ и $-\sigma$ одинакова. Отметим, что этого требует только специальных начальных условий с одинаковым распределением спина σ и $-\sigma$ спина. Ниже мы обозначаем эти спины одной буквой m , которая соотносится с номером узла и зависит от позиции электрона в решетке и времени. Вычисляя правую часть (2) и переходя к пространственному пределу вдоль оси нанопроволок, мы получаем уравнение Шредингера, которое описывает динамику распространения волн электронной плотности во фрактальной решетке:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_m = \sum_j \gamma_{mj} a_j - \frac{\hbar}{2m_{ef}} \frac{\partial^2 a_m}{\partial x^2}, \quad (3)$$

где m_{ef} – эффективная масса электрона в нанопроволоке.

После обезразмеривания уравнение (3) было численно решено с начальными условиями для волновой функции вида:

$$a_1(x, 0) = Q \cdot \exp\left(-\frac{(x-b)^2}{g^2}\right), a_m(x, 0) = 0, m = 2, \dots, N, \quad (4)$$

где Q – амплитуда волнового пакета нормировки, g , b – известные константы, g – ширина волнового пакета входящих электронов, b – максимальное нахождение волнового пакета, N – число узлов фрактальной решетки.

Уравнение (3) с начальными условиями (4) решается численно с помощью явной схемы Дюфорта-Франкеля [25]. Все вычисления производятся на графическом процессоре. Количество расчетных блоков определяется количеством узлов фрактальной решетки. При этом в каждом блоке выделяются потоки в соответствии с количеством шагов решетки, в которых выполняются вычисления по схеме Дюфорта-Франкеля для следующего момента времени.

Зависимость волновой функции электрона по времени для фиксированной координаты x показана на рис. 2.

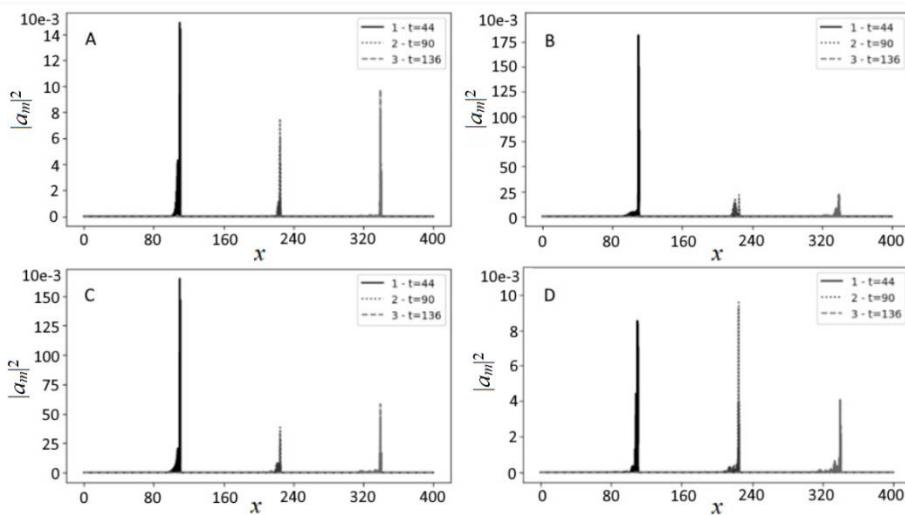


Рис. 2. Зависимость волновой функции электрона $|a_m|^2$ по x -координате для различных моментов времени: первая кривая – $t=44$; вторая кривая – $t=90$; третья кривая – $t=136$; (A) для первого узла, (B) для 38-го узла, (C) – для 89-го узла, (D) – для 138-го узла

Волна электронной плотности распространяется вдоль нанопроволок с изменением амплитуды, что характерно внутри фрактальной структуры, и возвращается к началу.

Далее мы рассмотрим интегральные характеристики электронной волновой функции: просуммированное распределение вероятности обнаружения электрона по оси x для каждого узла (рис. 3).

Рис. 3 показывает, что при распространении волн электронной плотности вдоль оси нанопроволок амплитуда первого узла постепенно уменьшается, и амплитуда нижних узлов постепенно увеличивается. Также можно наблюдать провалы в местах решетки (узлы 120 по 140) где находятся пустоты в виду геометрии фрактала.

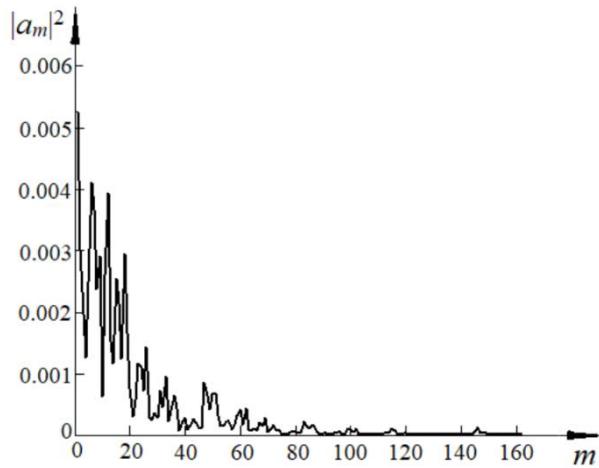


Рис. 3. Интегральная характеристика электронной волновой функции для каждого узла в момент времени $t=136$

В случае распространения электрона вдоль оси нанопроволок, можно наблюдать, что происходит распад электронной плотности, вызванный перемещением электрона между узлами, рис. 4.

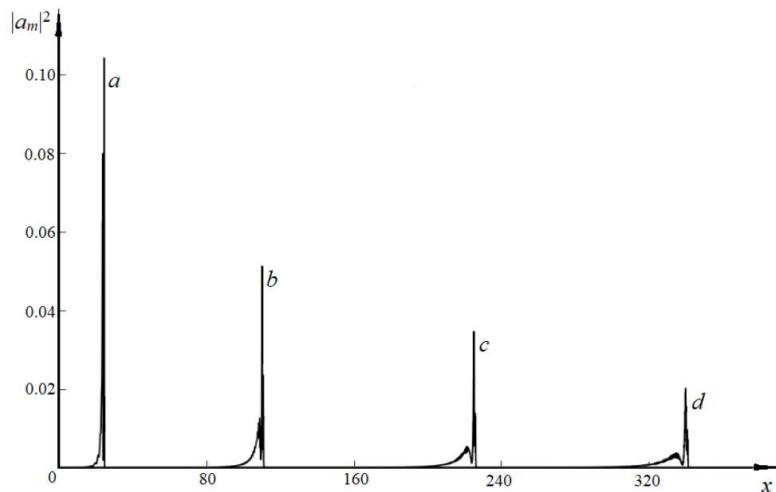


Рис. 4. Просуммированная со всех узлов по x -координате зависимость распределения плотности электрона для разных моментов времени:
(a) $t=10$; (b) $t=44$; (c) $t=90$; (d) $t=136$

Далее мы исследовали влияние учета в нашей модели энергий прыжков вторых ближайших соседних атомов на распределение электронной плотности в рассматриваемой системе (рис. 5). Мы рассчитали относительное отклонение $|a_m|^2$ для каждого узла отдельно:

$$\delta = \frac{|y_2 - y_1|}{y_1} \cdot 100\%, \quad (5)$$

где y_1 соответствует квадрату модуля волновой функции электрона без учета перескоков между ближайшими соседними атомами, y_2 соответствует случаю с учетом этих перескоков.

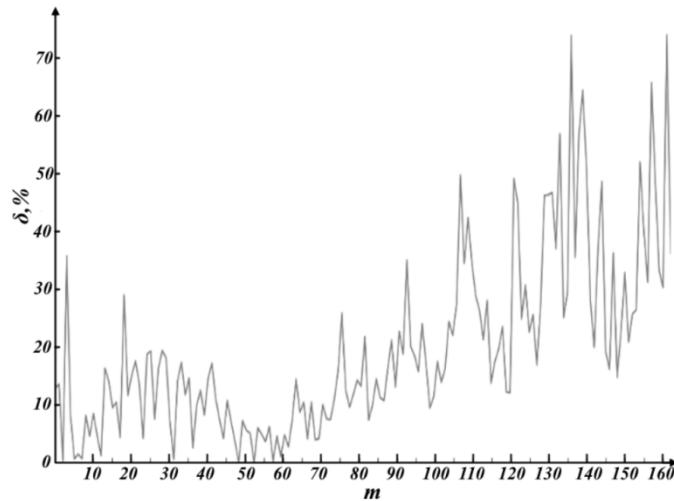


Рис. 5. Относительное отклонение $|a_m|^2$ для каждого узла m

Видно, что дополнительный учет переходов между вторыми соседними узлами существенно меняет распределение электронной плотности в системе. Учет этого фактора оказывает наибольшее влияние на относительное отклонение для более удаленных узлов от точки входа электронов в решетку (около 70 %).

Наибольшее значение абсолютного отклонения наблюдается для области, расположенной перед большим отверстием. Таким образом, геометрия решетки вносит существенный вклад в распределение плотности электрона.

Исследование спектров Фурье волновой функции показывает ее синхронизацию для разных узлов, что приводит к формированию последовательных частотных колебаний во фрактальной структуре.

В результате проделанной работы можно сделать следующие выводы:

1. Построена математическая модель и ее численное решение для описания волн электронной волны плотности во фрактальных структурах с учетом скачков через один узел.

2. Исследовано влияние фрактальной размерности на перенос электронов в нанопроводах, как в поперечном, так и в продольном направлениях. поперечном и продольном направлениях.

3. Обнаружено что учет энергии перехода электрона не только для ближайших, но и для вторых ближайших соседей оказывает существенное влияние на квантовый транспорт во фрактальной структуре, особенно в области, предшествующей самой большой дыркой.

4. В случае распределения вдоль оси нанопроволоки, суммированного по всем узлам, относительное отклонение составляет менее 1 %. То есть учет энергии переходов между вторыми ближайшими соседями мало влияет на продольное распространение волн электронной плотности в рассматриваемой фрактальной структуре рассматриваемой нами фрактальной структуре.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (РНФ) (грант № 23-71-00016, <https://rscf.ru/project/23-71-00016/>). Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература

1. Kumar A., Dewan B., Khandelwal A., Shrivastava K. On the development of fractal antenna for IoT applications. *Engineering Research Express*, 2023, **5** 035026.
2. Costanzo S., Venneri F. Polarization-insensitive fractal metamaterial surface for energy harvesting in IoT applications. *Electronics*, 2020, **9**(6) 959.
3. Moreno J., Morales O., Tejeida R., Quintana H., Sidorov G. Generation of broadcasting for fractal adaptive Internet of things reconfiguration under the swarm intelligence paradigm. *International Journal of Distributed Sensor Networks*, 2020, **16**(6) 1550147720927558.
4. Cho Y., Shin J.-H., Costa A., Kim T.A., Kunin V., Li J., Lee S.Y., Yang S., Han H.N., Choi I.-S., Srolovitz D.J. Engineering the shape and structure of materials by fractal cut. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2014, **111**(49) 17390-5.
5. Mitic V., Kocic L., Paunovic V., Lazović G., Miljkovic M. Fractal nature structure reconstruction method in designing microstructure properties. *Materials Research Bulletin*, 2018, **101** 175-183.
6. Reis F.D.A., Voller V.R. Models of infiltration into homogeneous and fractal porous media with localized sources. *Phys. Rev. E*. 2019, **99** 042111.
7. Xu X.-Y., Wang X.-W., Chen D.-Y., Smith C. M., Jin X.-M. Quantum transport in fractal networks. *Nature Photonics*, 2021, **15** 703-710.
8. Shang J., Wang Y., Chen M., Dai J., Zhou X., Kuttner J., Hilt G., Shao X., Gottfried J.M., Wu K. Assembling molecular Sierpiński triangle fractals. *Nature chemistry*, 2015, **7** 389-393.
9. Kempkes S.N., Slot M.R., Freeney S.E., Zevenhuizen S.J., Vanmaekelbergh D., Swart I., Smith C.M. Design and characterization of electrons in a fractal geometry. *Nature Physics*, 2019, **15** 127-131.
10. Pedersen T.G. Graphene fractals: Energy gap and spin polarization. *Phys. Rev. B*, 2020, **101** 235427.
11. Aggarwal D., Narula R., Ghosh S. Moiré fractals in twisted graphene layers. *Phys. Rev. B*, 2024, **109** 125302.
12. Blackledge J., Boretti A., Rosa L., Castelletto S. Fractal graphene patch antennas and the THz communications revolution, *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 2021, **1060** 012001.
13. De Nicola F., Puthiya Purayil N.S., Miseikis V., Spirito D., Tomadin A., Coletti C., Polini M., Krahne R., Pellegrini V. Graphene Plasmonic Fractal Metamaterials for Broadband Photodetectors. *Scientific Reports*, 2020, 10 Article number 6882.

MODELING OF ELECTRON DENSITY WAVES IN HEXAGONAL FRACTAL LATTICES

R.R. Trofimov, N.N. Konobeeva

Volgograd State University

Abstract: in this paper, we study the quantum transport of electrons in a system of nanowires made of connected fragments of a fractal structure. We consider the geometry of the lattice in the form of a Sierpinski triangle made of hexagons. In our case, we take into account not only the transitions between neighboring nodes of the hexagonal segment, but also the transition through one node.

Keywords: fractal lattice, electron transport, nanowires.

МОДЕЛЬ СТРУКТУРЫ МНОГОЭЛЕКТРОННОГО АТОМА

Л.В. Мигаль, В.Г. Бондарев

Белгородский государственный национальный исследовательский университет
migal@bsu.edu.ru

Аннотация: рассматривается пространственная структура многоэлектронного атома, находящегося в нормальном состоянии. Особое внимание уделено новому подходу к определению набора квантовых чисел. Предложенная модель многоэлектронного атома является графическим расширением оболочечной модели, так как дает возможность представлять структуру атома в виде набора оболочек, состоящих из совокупности электронных облаков, позволяющих определить размещение электронов вблизи ядра атома.

Ключевые слова: электронное облако, атом, оболочечная модель, квантовое число.

Введение

Одной из нерешенных задач атомной физики является построение наглядной модели электронной оболочки атома с целью визуализации распределения электронов внутри многоэлектронного атома [1]. В основу такой модели электронного строения атомов можно положить так называемую оболочечную модель [2]. Оболочечная модель структуры атома предложена на выборе гипотезы о возможности разделения электронов на отдельные группы, называемые электронными оболочками. Под электронной оболочкой, в настоящее время, принято понимать совокупность электронных орбиталей, характеризующихся четырьмя квантовыми числами, такими как главное n , орбитальное l , магнитное m_l и спиновое m_s квантовое число [3].

Правила заполнения атомных орбиталей в многоэлектронном атоме основывается на трех основных принципах [4]: принципе наименьшей энергии, принципе исключения Паули и принципе наибольшей мультиплетности для основных состояний электронных оболочек атомов, определяемого правилом Хунда. Порядок возрастания энергии атомных орбиталей в многоэлектронных атомах описывается правилом Маделунга-Клечковского. Также важную роль в атоме играет принцип исключения Паули, запрещающий наличие более чем одного электрона с одинаковым набором четырех квантовых чисел (n, l, m_l и m_s). Если заняты все состояния для главного квантового числа с определенным значением, то принято говорить об образовании полностью заполненной оболочки.

Для визуализации размещения электронов в атомах принято применять несколько различных способов, основными из которых являются аналитическая запись и метод квантовых ячеек [5]. Аналитическая запись представляет собой электронную формулу, которая строится из nl -подоболочек с указанием числа электронов, заселяющих каждую из них. При исследовании свойств атомов,

можно проводить моделирование структуры с помощью способа записи по квантовым ячейкам. Ячейки, входящие в ячеичную схему, могут заселяться электронами. Каждый конкретный вариант заселения называется электронной конфигурацией атома. По значениям квантовых чисел n и l ячеичную схему можно разбить на n -оболочки и nl -подоболочки. Отметим также, что повышенной устойчивостью отличаются не только электронные конфигурации отдельной выбранной подоболочки с полностью заполненными, но также и наполовину заполненными орбиталями.

Современные представления о строении электронной оболочки атома исходят из того, что движение электрона в атоме нельзя описать определенной траекторией. Можно рассматривать лишь некоторый объем пространства, в котором находится электрон, который получил название электронного облака [6]. Электронное облако представляет собой наглядную модель, отражающую распределение функции плотности вероятности обнаружения электрона в атоме в зависимости от его энергии. В тоже время, если у нас есть некоторая максимальная вероятность в определенной точке электронного облака, то приняв ее за центр облака и считая, что в этой точке располагается сам электрон, можно оценить размеры не только облака, но и самого атома.

В геометрической модели [7] размер сфер, обозначающих электронные облака, зависит от заряда ядра и близости оболочки к ядру атома. Геометрическая модель объединяет в себе достоинства как электронных схем, так и орбитальных моделей.

В начале прошлого столетия А. Парсон [8] предположил, что электроны не вращаются вокруг ядра, а под действием сил электромагнитного поля, на некотором конечном расстоянии от ядра, приходят в устойчивое равновесие с электронами, расположенными в сферически-симметричных устойчивых конфигурациях. При этом в его модели электроны располагаются на стационарных позициях вокруг ядра. В развитие этой гипотезы Дж. Ленгмюр предложил учитывать ряд других структурных особенностей атома [9]:

1. Электроны в атомах располагаются в парных плоскостях, симметричных относительно ядра. Атомы имеют ось симметрии, перпендикулярную к этим плоскостям.

2. Каждый цилиндрический слой распадается на несколько ячеек равного объема.

3. Электроны действуют друг на друга взаимно уравновешивающимися электростатическими и электромагнитными силами.

В дальнейшем, в теории М. Грызинского [10], в основе которой лежат идеи А. Парсона и Дж. Ленгмюра, было подтверждено, что электроны в атоме расположены регулярно, сам атом имеет ось симметрии и, что самое важное, электроны движутся коллективно, вследствие наличия периодической составляющей в электрическом поле атома. Более того, он пришел к выводу, что атомы могут быть описаны классическими уравнениями Ньютона с использованием известных взаимодействий без введения свободных параметров. Дополнительно отме-

тим, что структура атома, несмотря на наличие целого ряда моделей, до настоящего времени полностью не расшифрована. Однако будем считать, что её можно воспроизвести в графической форме на основе уже известных экспериментальных и теоретических данных. Именно по этой причине основной задачей, поставленной в данной работе, является уточнение физического смысла параметров атома, с целью проведения визуализации физического представления пространственной структуры электронной оболочки атома путем ее компьютерного моделирования как совокупности электронных облаков, расположенных вблизи ядра атома.

Модель электронной оболочки атома

Вначале нашего исследования определим, как заселяются электронные оболочки атома, и как изменяется при этом пространственная структура по мере его усложнения. Основным объектом моделирования выберем изолированный атом, находящийся в нормальном состоянии. В атоме изучаемой системой является совокупность электронов, расположенных в кулоновском поле ядра. При этом, объяснение поведения какого-либо отдельного электрона в составе атома, возможно лишь на основе знания его общих свойств, описываемых с помощью набора известных принципов и правил.

Для решения поставленной перед нами задачи наиболее полезной является оболочечная модель многоэлектронного атома. В рамках данного подхода будем считать, что электрон представляет собой бесструктурную материальную точку, расположенную в центре собственного электронного облака, причем положение электрона в околяядерном пространстве можно задавать набором квантовых чисел.

Пусть у атома имеется несколько составляющих, наиболее важными из которых в нашем исследовании можно считать динамическую и статическую. В соответствии с постановкой задачи динамическую составляющую жестко связываем с ядром атома, рассматривая его поведение как объекта связанного в единое целое с электронными облаками. При принятии гипотезы о вращении атома как единого целого [10] и, следовательно, использование статического представления атома позволяет исключить из нашего рассмотрения такие квантовые числа как главное и спиновое квантовые числа. Так, главное квантовое число, определяющее энергию электронного уровня, не может использоваться с целью оценки положения электронов в атоме. Аналогично, спиновое квантовое число также нельзя использовать по причине данного параметра как характеристики углового момента электрона.

Первоначально обратимся к определению способа моделирования электронной оболочки атома. Для этого, выберем цилиндрическую систему координат, в центре которой расположим ядро атома (см. рисунок). Одну из осей, например, полярную ось Ox , выделим в качестве базовой, относительно которой будет происходить вращение всего атома как единого целого. Учитывая, что координата x должна быть включена в набор величин, отвечающих за позиции электронных облаков в атоме, присвоим ей название базового квантового числа.

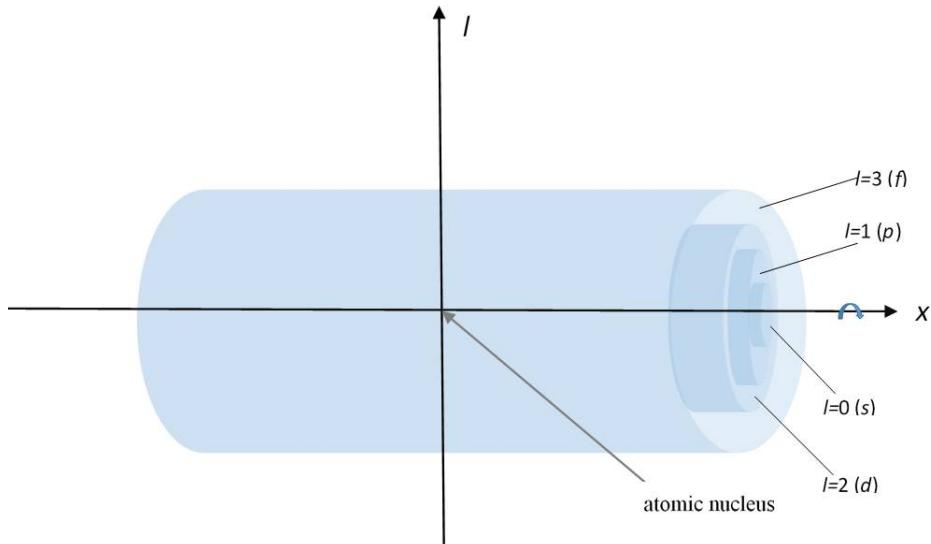


Рисунок. Схематический вид расположения электронных слоев атома

При этом выбор значения главного квантового числа n можно рассчитывать по формуле

$$n = |x| + l, \quad x \neq 0.$$

В этом случае главное квантовое число определяет только номер электронной оболочки и не будет использоваться при оценке позиций электронов. Ось аппликат Oz совместим с орбитальным квантовым числом l . Выбирая определенные значения для квантовых чисел x и l можно однозначно выяснить на какой из электронных оболочек располагается электрон, с которым связаны данные квантовые числа. Роль третьей координаты здесь играет азимутальный угол, позиционируемый как угол поворота вокруг полярной оси Ox и характеризуемый магнитным квантовым числом m_l . Магнитное квантовое число определяет возможные ориентации электронных облаков в пространстве. Количество таких ориентаций, как известно, равно: $2l + 1$. Исходя из изменения набора квантовых чисел необходимо также модифицировать и принцип Паули, который можно ограничить использованием трех квантовых чисел: базового x , орбитального l и магнитного m_l для определения пространственного расположения позиций электронных облаков.

При выборе объектов, составляющих электронную оболочку атома, необходимо взамен самих электронов взять за основу в качестве визуальных объектов, образуемые ими электронные облака. Пусть у нас вблизи ядра атома, находящегося в нормальном состоянии, имеется совокупность электронов, каждый из которых формирует вокруг себя собственное электронное облако. С целью упрощения будет рассматривать электронные облака только сферической формы, расположенные на соответствующих оболочках и подоболочках. При определении расположения облаков, будем считать, что областью их размещения является некоторая область пространства не окружающая, а расположенная вблизи ядра атома.

Каждое электронное облако характеризуется следующими основными параметрами:

- зарядом (предполагается, что заряд сосредоточен в центре электронного облака);
- радиусом электронного облака конечного размера;
- пространственным положением, определяемым координатами на основе предложенных трех квантовых чисел: x , l и m_l .

Для фиксации статического характера структуры будем считать, что процессы переконфигурирования электронных облаков вблизи ядра в данной модели отсутствуют. Не предусматривается учёт механической инерционности частиц, определяемой их массой, а также учёт собственного вращательного движения частиц. Также будем считать, что вся кинетическая энергия сосредоточена лишь во вращательном движении всего атома как единого целого.

Резюмируя все рассмотренные пояснения было решено, что при проведении компьютерного моделирования пространственной структуры электронной оболочки атома, можно принять следующие допущения:

1. Рассматриваются только атомы находящиеся в нормальном (стационарном) состоянии.

2. Электронные облака имеют форму близкую к сферической и условный конечный радиус. Каждое электронное облако занимает определенную область вблизи ядра и не пересекается как с соседними облаками, так и самим ядром.

3. Атом как единое целое находится в состоянии вращения вокруг некоторой выделенной базовой оси.

4. Модифицированный принцип Паули определяет пространственное расположение электронных облаков относительно друг друга и относительно ядра атома, а также основывается только на трех квантовых числах: x , l , и m_l .

5. Магнитное квантовое число m_l позволяет определить количество электронов, размещенных на плоскости, перпендикулярной базовой оси, при заданном значении орбитального квантового числа l .

6. Заселение электронов в многоэлектронном атоме происходит в соответствии с ранее установленными принципами и правилами.

Для проверки основных положений модели формирования пространственной структуры электронной оболочки атома был создан программный комплекс, в котором реализован механизм взаимодействия электронов между собой и с ядром атома [11]. С целью получения структуры, подобной реальному атому, проводился учет для каждого из электронов их орбитальных радиусов [12], а также расположение электронных облаков определялось на основе известных данных по энергии ионизации [13], а для s -электронов путем дополнительного расчета их радиусов для всех значений главного квантового числа.

Выводы

Основные результаты, полученные в данном исследовании, заключаются в следующем:

1. Разработан метод моделирования пространственной структуры электронной оболочки атома, включающий в себя детальное изложение и обоснование предложенного подхода, в основе которого лежит гипотеза о совместном вращении ядра и размещенных вокруг него электронных облаков.

2. Введено понятие базового квантового числа x , которое совместно с орбитальным l и магнитным m_l числами, позволяет расширить возможности описания расселения электронов в атоме.

3. Показана возможность наглядной визуализации пространственной структуры электронной оболочки атома для нормального состояния атома.

Литература

1. Урусов В.С., Еремин Н.Н. Атомистическое компьютерное моделирование. – М.: ГЕОС, 2012. – 428 с.
2. Eickerling G, Reiher M. The shell structure of atoms // J. Chem. Theory Comput. – 2008, no 4. – P. 286-296.
3. Смирнов Б.М. Физика атома и иона. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 215 с.
4. Condon E.U., Odabasi H. Atomic structure. – Lorid.: Cambridge: University Press, 1980. – 200 p.
5. Потапов А.А. Электронное строение атомов. – М: РХД, 2009. – 264 с.
6. Gillespie R.J. Molecular geometry – London: Van Nostrand Reinhold company, 1972. – 280 p.
7. Lucas J. A physical model for atoms and nuclei // Galilean Electrodynamics, January/February 1996. – Vol. 7, No. 1. – P. 3-12.
8. Parson A.L. A magneton theory of the structure of the atom: (with two plates) / Smithsonian Miscellaneous Collections. – 1915, Vol. 65, No. 11. – 80 p.
9. Langmuir J. The arrangement of electrons in atoms and molecules / Physical Review. – 1919, 22. – P. 505-587.
10. Gryziński M.A. Collisions between systems of Coulomb particles. I. Small-angle scattering for time-dependent fields / J. Chem. Phys. – 1975, Vol. 62, No. 7. – P. 2610-2619.
11. Migal L.V., Bondarev V.G., Bondareva T.P. Computer modeling of parameters of the electronic shell of the atom // Research result. Information technologies. – T.6, №1, 2021. – P. 30-39.
12. Migal L.V., Bondarev V.G. Computer visualization of the spatial structure of the atomic nucleus // Research result. Information technologies. – T.7, №2, 2022. – P. 3-18.
13. Атомная база данных США: [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://www.nist.gov/pml/productsservices/physical-reference-data> / (дата обращения: 10.10.2024).

MULTI-ELECTRON ATOM STRUCTURE MODEL

L.V. Migal, V.G. Bondarev

Belgorod State National Research University

Abstract: the spatial structure of a multi-electron atom in a normal state is considered. Special attention is paid to a new approach to defining a set of quantum numbers. The proposed model of a multi-electron atom is a graphical extension of the shell model, since it makes it possible to represent the structure of an atom as a set of shells consisting of a set of electron clouds that allow determining the placement of electrons near the nucleus of an atom.

Keywords: electronic cloud, atom, shell model, quantum number.

**ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПОДОБИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ
ОПЕРАТОРОВ ВТОРОГО ПОРЯДКА С ВОЗМУЩЕНИЕМ
ОПЕРАТОРОМ РАНГА ОДИН**

Н.Б. Ускова, А.Н. Шелковой

Воронежский государственный технический университет
nat-uskova@mail.ru, shelkovoj.aleksandr@mail.ru

Аннотация: с помощью метода подобных операторов изучаются дифференциальные операторы второго порядка с возмущением оператором ранга один. Преобразованием подобия они приводятся к диагональному (блочно-диагональному) виду. Приведены оценки собственных значений этого оператора.

Ключевые слова: возмущение, невозмущённый оператор, дифференциальный оператор второго порядка, метод подобных операторов, спектр оператора.

Пусть $L_2 = L_2[0, \omega]$ гильбертово пространство (классов эквивалентности) комплексных измеримых функций, суммируемых с квадратом модуля на отрезке $[0, \omega]$ и с обычным скалярным произведением

$$(x, y) = \frac{1}{\omega} \int_0^\omega x(t) \overline{y(t)} dt, x, y \in L_2,$$

норма в L_2 порождается этим скалярным произведением.

Пусть $W_2^2 = W_2^2[0, \omega]$ – пространство Соболева,

$$W_2^2 = \{x \in L_2 : x' \text{ абсолютно непрерывна, } x'' \in L_2\}.$$

В пространстве L_2 вводится дифференциальное выражение l формулой

$$(ly)(s) = y''(s) - (u(s), y(s))v(s), y, u, v \in L_2.$$

С помощью дифференциального выражения l зададим два оператора:

$$L_0 : D(L_0) \subset L_2 \rightarrow L_2, \quad D(L_0) = \{y \in W_2^2 : y(0) = y(\omega) = 0\},$$

и

$$L_1 : D(L_1) \subset L_2 \rightarrow L_2, \quad D(L_1) = \{y \in W_2^2 : y'(0) = y'(\omega) = 0\}.$$

Операторы L_0 и L_1 являются дифференциальными операторами второго порядка, невозмущёнными операторами ранга один (см. терминологию в [1]). Оба эти оператора представимы в виде $L_0 = A_0 - B$, $L_1 = A_1 - B$, где $A_0 : D(L_0) \subset L_2 \rightarrow L_2$, $(A_0 y)(s) = y''(s)$, $(By)(s) = (u(s), y(s))v(s)$, $A_1 : D(L_1) \subset L_2 \rightarrow L_2$, $(A_1 y)(s) = y''(s)$. Операторы A_0 и A_1 считаются невозмущёнными операторами. Оператор B является возмущением, причём B принадлежит банаховой алгебре $\mathcal{B}(L_2)$ ограни-

ченных операторов в L_2 , а также её подпространству – идеалу операторов Гильберта-Шмидта $\sigma_2(L_2)$ из $\mathcal{B}(L_2)$.

Спектральные характеристики операторов A_0 и A_1 известны. Их спектры состоят из простых собственных значений $\sigma(A_0) = \left\{ -\left(\frac{\pi n}{\omega}\right)^2 \right\}, n \geq 1$, и $\sigma(A_1) = \left\{ -\left(\frac{\pi n}{\omega}\right)^2 \right\}, n \geq 0$. Соответствующими собственными векторами являются функции $e_n(A_0) = \sqrt{2} \sin \frac{\pi n}{\omega} t, n > 0$, и

$$e_0(A_1) = 1, \quad e_n(A_1) = \sqrt{2} \cos \frac{\pi n}{\omega} t, \quad n \geq 1,$$

для оператора A_1 . Спектральные проекторы задаются формулой $P_n(A_i)x = (x, e_n(A_i))e_n(A_i), i = 0, 1$, и пусть $P_{(n)} = \sum_{i \leq m} P_i$. Отметим, что оба оператора A_0 и A_1 являются генераторами сильно непрерывных полугрупп операторов $T_0: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathcal{B}(L_2)$ и $T_1: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathcal{B}(L_2)$ и эти полугруппы задаются формулами $T_0(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}} e^{\lambda_n t} P_n(A_0)$, $T_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{Z}_+} e^{\lambda_n t} P_n(A_1)$. Отметим также, что операторы A_0 и A_1 являются спектральными операторами скалярного типа (см. [2]) и представимы в виде $A_0 = \sum_{n \in \mathbb{N}} \left(-\left(\frac{\pi n}{\omega}\right)^2 \right) P_i(A_0)$, $A_1 = \sum_{i \in \mathbb{Z}_+} \left(-\left(\frac{\pi n}{\omega}\right)^2 \right) P_i(A_1)$.

Определение 1. [3] Полугруппа $T: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathcal{B}(L_2)$ называется гиперболической, если $\sigma(T(1)) \cap \mathbf{T} = \emptyset$. (Здесь через \mathbf{T} обозначена единичная окружность).

Согласно этому определению, полугруппа T_0 является гиперболической, т. к. $T_0(1) = \sum_{n \in \mathbb{N}} e^{\left(\frac{\pi n}{\omega}\right)^2} P_n$, $\sigma(T_0(1)) = \left\{ e^{\left(\frac{\pi n}{\omega}\right)^2}, n \geq 1 \right\}$ и при $n \geq 1$ спектр $\sigma(T_0(1))$ лежит внутри единичного круга. Полугруппа T_1 не является гиперболической, в её спектре входит число 1. Полугруппы T_0 и T_1 имеют определяющее значение при определении и рассмотрении состояний обратимости операторов вида $-\frac{d}{dt} + A_i, i = 0, 1$, (см. определение в [3]), например, в пространствах $L_p(\mathbb{R}, L_2)$, $p \in [1, \infty]$.

В работе с помощью метода подобных операторов ([1, 4-8]) получены теоремы о подобии операторов L_0 и L_1 операторам диагональной (при ограничениях на норму возмущения) или блочно-диагональной (при отсутствии ограничений на малость нормы возмущения) формы. Работа перекликается со ста-

тьёй [1], где в качестве невозмущённого оператора выступал оператор дифференцирования первого порядка. Отличие условий для данных операторов от [1] также обсуждается. Отметим статью [4], в которой обсуждается применение метода подобных операторов для возмущённого дифференциального оператора с другими граничными условиями и иным типом возмущения. В качестве версии метода подобных операторов, удобной для исследования операторов L_0 и L_1 использована версия из [4], [7], [8]. Доказанные в [7], [8] теоремы применяются для L_0 и L_1 .

Начнём с самой грубой оценки спектра оператора $L_i, i = 0, 1$. Так как $A_i, i = 0, 1$ – самосопряжённый оператор и $B \in \sigma_2(L_2)$, то можно применить [9, Theorem 4.1].

Теорема. Существует такая непрерывная вещественная функция $f \in L_2(\mathbb{R})$, что для всех $\lambda \in \sigma(A_i - B), i = 0, 1$, имеет место неравенство $|\operatorname{Im} \lambda| \leq f(\operatorname{Re} \lambda)$.

Отметим, что алгоритм построения функции f можно найти там же, в [9].

Вернёмся к возмущению B . Рассмотрим оператор $L_i, i = 0, 1$. Пусть функции u и v имеют ряды Фурье вида $\sum_{n \geq 1} \hat{u}(n) e_n(A_0)$ и $\sum_{n \geq 1} \hat{v}(n) e_n(A_0)$; для оператора A_1 соответственно $\sum_{n \geq 0} \hat{u}(n) e_n(A_1)$ и $\sum_{n \geq 0} \hat{v}(n) e_n(A_1)$. Очевидно, что $\|B\|_2 = \|u\| \cdot \|v\|$.

Матрица (числовая) оператора $B \sim (b_{ij})$ состоит из элементов $b_{ij} = \hat{u}(j) \hat{v}(i)$, $i, j \in \mathbb{N}$, ($i, j \in \mathbb{Z}_+$ для A_1).

Из [4], [7], [8] вытекают две теоремы о подобии.

Теорема 1. Пусть выполнено условие

$$\begin{aligned} \|u\| \cdot \|v\| &< 0,75 \left(\frac{\pi}{\omega} \right)^2 \text{ (для } L_0 \text{),} \\ \|u\| \cdot \|v\| &< 0,25 \left(\frac{\omega}{\pi} \right)^2 \text{ (для } L_1 \text{).} \end{aligned} \tag{1}$$

Тогда операторы L_0 и L_1 подобны операторам, имеющим диагональную матрицу $A_0 - V_0$ и $A_1 - V_1, V_0, V_1 \in \sigma_2(L_2)$, соответственно.

Отметим, что условие (1) теоремы 1 очень ограничительное и соответствует условиям [1, теорема 3], позволяющим с помощью преобразования подобия приводить дифференциальный оператор первого порядка из [1] к оператору с диагональной матрицей. Операторы V_0 и V_1 можно найти приближённо с помощью стандартной схемы метода подобных операторов. Известно, что первым приближением к ним является оператор $(B_0) \sim (b_{ij}^0)$, где $b_{ij}^0 = \begin{cases} b_{ii}, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$

Из [7, 8] следует теорема о блочной диагонализации операторов L_0 и L_1 .

Теорема 2. Существует такое натуральное n , что операторы L_0 и L_1 подобны операторам $A_0 - V_{0(n)}$ и $A_1 - V_{1(n)}$, имеющим блочно-диагональные матрицы.

В теореме 2 нет условий малости норм возмущения. У операторов $V_{0(n)}$ и $V_{1(n)}$ ненулевыми являются центральный блок $n \times n$ $((n+1) \times (n+1)$ для V_1) и главная диагональ, а все остальные их матричные элементы равны нулю.

В [1, теорема 5] также выполняется блочная диагонализация возмущённого дифференциального оператора первого порядка без условия малости нормы возмущения, но там для этого используется специальное весовое операторное пространство, вложенное в $\sigma_2(L_2)$, и в нём выполняется блочная диагонализация. Для операторов L_0 и L_1 этого не требуется, так как у них собственные значения оператора A_0 (и A_1) разбегаются. Для операторов L_0 и L_1 можно рассмотреть вопросы их подобия некоторым блочно-диагональным операторам и в других операторных пространствах для оператора-возмущения, например, в $\mathcal{B}(L_2)$, но там не будут лучшими условия, при которых подобие возможно, или способы построения операторов. В [1], кроме пространств $\mathcal{B}(L_2)$, $\sigma_2(L_2)$ и $\sigma_{2,\alpha}(L_2) \subset \sigma_2(L_2)$ рассматривалось ещё одно весовое подпространство из $\sigma_2(L_2)$. Для операторов L_0 и L_1 возмущение B также принадлежит этому весовому пространству, но опять же, условие применимости не будет проще. Отметим, что обычно возмущение рассматривают, как оператор из некоторого весового операторного подпространства, когда необходимо получить оценки элементов матриц спектральных проекторов (весовые оценки), или, в некоторых случаях, оценки коэффициентов Фурье собственных векторов (см. [6]).

Из [4], [7], [8] следует

Теорема 3. Для собственных значений операторов L_0 и L_1 имеют место асимптотические формулы ($i > n$)

$$\begin{aligned}\lambda_i(L_0) &= -\left(\frac{\pi i}{\omega}\right)^2 - \hat{v}(i)\hat{u}(i) + f_i, \\ \lambda_i(L_1) &= -\left(\frac{\pi i}{\omega}\right)^2 - \hat{v}(i)\hat{u}(i) + f'_i,\end{aligned}$$

где последовательности f и f' принадлежат l_1 .

Отметим, что с помощью теории возмущений полугрупп (см. [10], [11]) и теоремы 3 можно выписать полугруппу, генератором которой есть операторы $A_i - V_{i(n)}$, $i = 0, 1$. Тогда, используя свойство подобия полугрупп для подобных операторов, т. е. $\tilde{T}_{L_i}(t) = U\tilde{T}_i(t)U^{-1}$, где $\tilde{T}_i(t)$, $t \in \mathbb{R}_+$, – полугруппа, генератором которой являются операторы $A_i - V_{i(n)}$, $i = 0, 1$, $\tilde{T}_{L_i}(t)$, $t \in \mathbb{R}_+$, – полугруппа, генератор которой – оператор L_i , $i = 0, 1$, можно выписать (оценить) полугруппу, ге-

нератором которой есть $L_i, i = 0, 1$. И, следовательно, определять операторы $-\frac{d}{dt} + A_i + B$ в различных однородных пространствах функций (см. определение в [3]) и изучать их. Здесь через U обозначен оператор преобразования оператора L_i в оператор $A_i - V_{i(n)}, i = 0, 1$, т. е. $L_i U = U(A_i - V_{i(n)})$.

Литература

1. Ускова Н.Б., Шелковой А.Н. Дифференциальные операторы первого порядка с возмущением оператором ранга один // Физико-математическое моделирование систем: материалы XXV Международного семинара (г. Воронеж, 24 - 25 ноября 2023 г.), Воронеж, 2024. С. 128-135.
2. Данфорд Н., Шварц Дж.Т. Линейные операторы. Т. 3. Спектральные операторы. М.: Мир, 1974.
3. Баскаков А.Г. Исследование линейных дифференциальных уравнений методами спектральной теории разностных операторов и линейных отношений // Успехи математических наук. 2013. Т. 68, № 1 (409). С. 77-128.
4. Баскаков А.Г., Поляков Д.М. Метод подобных операторов в спектральном анализе оператора Хилла с негладким потенциалом // Матем. сборник. 208:1 (2017). С. 3-47.
5. Шелковой А.Н. Спектральный анализ интегро-дифференциального оператора с вырожденным ядром // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2020. Т. 23, № 3. С. 76-89.
6. Ускова Н.Б. Матричный анализ спектральных проекторов возмущённых самосопряжённых операторов // Сиб. элект. матем. изв. 2019. Т. 16. С. 369-405.
7. Баскаков А.Г., Криштал И.А., Ускова Н.Б. Метод подобных операторов в спектральном анализе операторных бесконечных матриц // Прикладная математика и физика. 2020. Т. 52, № 2. С. 71-85.
8. Baskakov A.G., Krishtal I.A., Uskova N.B. Similarity techniques in the spectral analysis of perturbed operator matrices // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 2019. V. 477, N. 2. P. 930-960.
9. Baskakov A.G., Krishtal I.A., Uskova N.B. Closed operator functional calculus in Banach modules and applications // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 2020. V. 492, N. 2. P. 124473.
10. Hille, E. and Phillips, R. Functional Analysis and Semi - Groups. Providence: Amer. Math. Soc., 1957.
11. Engel, K.-J. and Nagel, R. One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equation, New York: Springer, 2000.

SIMILARITY TRANSFORMATION SECOND ORDER DIFFERENTIAL OPERATORS WITH PERTURBATION BY AN OPERATOR OF RANK ONE

N.B. Uskova, A.N. Shelkovoy

Voronezh State Technical University

Abstract: using the method of similar operators, differential operators of the second order with perturbation by an operator of rank one are studied. They are reduced to a diagonal (block-diagonal) form by a similarity transformation. Estimates of the eigenvalues of this operator are given.

Keywords: perturbation, unperturbed operator, second-order differential operator, method of similar operators, operator spectrum.

ОЧИСТКА ПОРИСТОЙ СРЕДЫ РАСТВОРИТЕЛЯМИ

Г.Я. Хусаинова

Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологии
gkama@mail.ru

Аннотация: рассматривается задача о закачке растворителя в пористую среду, засоренную за счет отложения твердой фазы (парафинов, битумов, например). В рамках схемы плоскоодномерной фильтрации получены автомодельные решения, описывающие распределения давления и скорости.

Ключевые слова: закачка, растворитель, фильтрация, автомодельное решение, очищенная зона.

Введение

Одной из наиболее распространенных причин ухудшения коллекторных характеристик пласта в призабойной зоне нефтяных скважин являются «склеротические» изменения за счет отложения твердой фазы (парафинов, например) на стенки поровых каналов. В большинстве случаях удаление этих отложений можно осуществить закачкой растворителя. Необходимые оценки для проведения технологических расчетов с применением растворителя можно получить на основе решений плоскоодномерной и радиальносимметричной задач. В частности, если радиальносимметричная постановка позволяет проанализировать очищение пористой среды вокруг скважины, то плоскоодномерная задача дает возможность проследить эти процессы вблизи трещин (образованных при гидроразрыве, например). Отметим также, что принятые в данной работе теоретические постановки задач могут быть использованы для расчетов при кислотной обработке призабойной зоны пластов для карбонатосодержащих пород. Некоторые аспекты вытеснения углеводородной жидкости из пористых сред с помощью растворителей рассмотрены в [1-4].

Основные уравнения

Пусть среда с пористостью m в исходном состоянии частично закупорена твердой фазой, которая растворяется в закачиваемой жидкости. В исходном состоянии объемная доля, занятая твердой фазой, равна ν , и поэтому «живая» пористость составляет $m' = (1 - \nu)m$. Кроме того, засоренная пористая среда, в свою очередь, насыщена жидкостью. При закачке растворителя в такую систему можно выделить три характерные зоны, а именно ближнюю, очищенную от твердой фазы пористую среду (с пористостью m), где в порах находится чистый растворитель; вторую, промежуточную зону (с пористостью m'), в которой фильтруется насыщенный твердой фазой растворитель; и третью, дальнюю зону, где происходит фильтрационное течение исходной насыщающей жидкости. Здесь отметим, что согласно принятым представлениям в этих трех зонах, вообще говоря, находятся три разные жидкости, отличающиеся вязкостью, сжи-

маемостью (определенной величиной скорости звука), а также равновесными значениями плотности. Параметры, соответствующие этим трем зонам, будут снабжены индексами 1, 2 и 3 внизу. Тогда линейное уравнение пьезопроводности и закон Дарси могут быть записаны в виде

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = \chi_i \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^n \frac{\partial p_i}{\partial r} \right), \quad u_i = m_i v_i = -\frac{k_i}{\mu_i} \frac{\partial p_i}{\partial r}, \quad \chi_i = \frac{k_i \rho_i C_i^2}{\mu_i m_i}, \quad (1)$$

$$m_1 = m, \quad m_2 = m_3 = m' = m(1 - \nu), \quad k_2 = k_3.$$

Здесь p_i , v_i и u_i – давление, истинная скорость и скорость фильтрации; m_i , k_i , μ_i и C_i – коэффициенты пористости, проницаемости, динамическая вязкость и скорость звука в жидкости, определяющее сжимаемость; χ_i – коэффициент пьезопроводности.

Отметим, что принятые выше допущения для структуры зон фактически пренебрегают протяженностью областей, в которых происходит растворение и смывание твердой фазы. И тем самым эти области заменяются поверхностями разрывов для части переменных (скорости фильтрации, например) и параметров, определяющих фильтрационные характеристики (пористость, проницаемость, вязкость). Кроме того, в дальнейшем будем пренебрегать гидравлическим сопротивлением в этих областях и на границах между зонами потребуем условие непрерывности давления

$$p_1 = p_2 = p_{(12)} \quad (r = r_{(12)}), \quad p_2 = p_3 = p_{(23)} \quad (r = r_{(23)}).$$

Из закона сохранения масс для всей системы растворитель-твердая фаза в целом на границе между первой и второй зонами следует

$$\rho_1 m_1 \left(v_1 - \frac{dr_{(12)}}{dt} \right) = \rho_2 m_2 \left(v_2 - \frac{dr_{(12)}}{dt} \right) - \rho_s m v \frac{dr_{(12)}}{dt}, \quad (r = r_{(12)}), \quad (2)$$

где ρ_s – плотность твердой фазы. Запишем также уравнение сохранения массы растворителя на этой границе

$$\rho_1 m_1 \left(v_1 - \frac{dr_{(12)}}{dt} \right) = (1 - g) \rho_2 m_2 \left(v_2 - \frac{dr_{(12)}}{dt} \right), \quad (r = r_{(12)}), \quad (3)$$

здесь g – массовая концентрация твердой фазы в растворителе в состоянии насыщения. Соотношение (2) и (3) с учетом закона Дарси из (1) могут быть представлены в виде

$$\frac{k_1}{\mu_1} \frac{\partial p_1}{\partial r} = -m \frac{(1 - g) \rho_s v + g \rho_1}{g \rho_1} \frac{dr_{(12)}}{dt}, \quad \frac{k_2}{\mu_2} \frac{\partial p_2}{\partial r} = -m \frac{g \rho_2 (1 - \nu) + \rho_s v}{g \rho_2} \frac{dr_{(12)}}{dt}, \quad (r = r_{(12)}). \quad (4)$$

На границе между второй и третьей зонами полагаем условие несмешивающегося вытеснения. Тогда для этого условия, выражающего, что данная граница является и поверхностью контактного разрыва, можем записать

$$\rho_2 m_2 \left(v_2 - \frac{dr_{(23)}}{dt} \right) = \rho_3 m_3 \left(v_3 - \frac{dr_{(12)}}{dt} \right) = 0, \quad (r = r_{(23)}).$$

Отсюда, с учетом закона Дарси из (1) имеем

$$\frac{k_2}{\mu_2} \frac{\partial p_2}{\partial r} = \frac{k_3}{\mu_3} \frac{\partial p_3}{\partial r} = -m(1-\nu) \frac{dr_{(23)}}{dt}, \quad (r = r_{(23)}). \quad (5)$$

При плоскоодномерной схеме фильтрации эта задача имеет автомодельное решение.

$$p_1 = p_e + (p_{(12)} - p_{(e)}) \frac{\int_0^{\xi} \exp(-\frac{\xi'^2}{4}) d\xi'}{\int_0^{\xi_{(12)}} \exp(-\frac{\xi'^2}{4}) d\xi'}, \quad (0 < \xi < \xi_{(12)}),$$

$$p_2 = p_{(12)} + (p_{(23)} - p_{(12)}) \frac{\int_{\xi_{(12)}}^{\xi} \exp(-\frac{\xi'^2}{4\eta_2}) d\xi'}{\int_{\xi_{(12)}}^{\xi_{(23)}} \exp(-\frac{\xi'^2}{4\eta_2}) d\xi'}, \quad (\xi_{(12)} < \xi < \xi_{(23)}),$$

$$p_3 = p_{(23)} + (p_{(0)} - p_{(23)}) \frac{\int_{\xi_{(23)}}^{\xi} \exp(-\frac{\xi'^2}{4\eta_3}) d\xi'}{\int_{\xi_{(23)}}^{\infty} \exp(-\frac{\xi'^2}{4\eta_3}) d\xi'}, \quad (\xi_{(12)} < \xi < \infty),$$

Используя эти решения на основе граничных условий (4) и (5), можно получить трансцендентные уравнения для определения в автомодельных переменных координат границ $\xi_{(12)}$ и $\xi_{(23)}$ между зонами.

Литература

1. Шагапов В.Ш. Задача о закачке растворителя в пористую среду, подверженную "склерозу" / В.Ш. Шагапов, Г.Я. Хусаинова // ИФЖ. – 2000. – № 2.
2. Хусаинов И.Г. Тепловые процессы при акустическом воздействии на насыщенную жидкостью пористую среду / И.Г. Хусаинов // Вестник Башкирского университета. – 2013. – Т. 18. – № 2. – С. 350-353.
3. Хусаинова Г.Я. Очистка призабойной зоны пласта с помощью акустических волн / Г.Я. Хусаинова, И.Г. Хусаинов // Известия Уфимского научного центра РАН. – 2023. – № 4. – С. 71-75.
4. Хусаинов И.Г. Исследование параметров пласта методом опрессовки / И.Г. Хусаинов, Г.Я. Хусаинова // Современные проблемы науки и образования. – 2014. – № 3. – URL: <http://www.science-education.ru/117-13813>.

CLEANING OF THE POROUS ENVIRONMENT BY SOLVENTS

G.Ya. Khusainova

Sterlitamak branch of the Ufa University of Science and Technology

Abstract: the task about pumping solvent on the porous Wednesday littered at the expense of adjournment of a firm phase (paraffin, bitumens, for example) is considered. Within schemes ploskoodnomerny filtrations are received the automodel decisions describing distributions of pressure and speed, and also evolution of the cleared zone.

Keywords: downloading, solvent, filtration, the automodel decision, the cleared zone.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ РАЗРАБОТКИ ПЛАСТА ПРИ ПОМОЩИ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ПРЯМОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ

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

Ухтинский государственный технический университет
nchuvashov@ugtu.net

Аннотация: внедрение новых технико-технологических цифровых решений является актуальным направлением в современной промышленности. При помощи нейросетей стала возможна ускоренная обработка больших объемов информации, и, что немаловажно прогнозирование показателей. Основную область интереса для авторов представляет возможность использования нейросетевого моделирования для получения показателей работы добывающих скважин.

Ключевые слова: нейронная сеть, нефтегазопромысловая отрасль, математическая модель, прогнозирование показателей.

Нейронная сеть (также искусственная нейронная сеть, ИНС, или просто нейросеть) – математическая модель, а также её программное или аппаратное воплощение, построенная по принципу организации и функционирования биологических нейронных сетей – сетей нервных клеток живого организма. Это понятие возникло при изучении процессов, протекающих в мозге, и при попытке смоделировать эти процессы.

ИНС представляет собой систему соединённых и взаимодействующих между собой простых процессоров (искусственных нейронов). Такие процессоры обычно довольно просты (особенно в сравнении с процессорами, используемыми в персональных компьютерах). Каждый процессор подобной сети имеет дело только с сигналами, которые он периодически получает, и сигналами, которые он периодически посылает другим процессорам. И, тем не менее, будучи соединёнными в достаточно большую сеть с управляемым взаимодействием, такие по отдельности простые процессоры вместе способны выполнять довольно сложные задачи.

Многослойный персептрон – нейронная сеть прямого распространения сигнала (без обратных связей), в которой входной сигнал преобразуется в выходной, проходя последовательно через несколько слоев.

Работа искусственного персептрана описывается уравнением:

$$V_{w,b}(x) = F \left(\sum_i (w_i x_i) + b \right).$$

Структура сети представлена на рис. 1. Предполагается в качестве входного сигнала в персептрон предоставлять данные по истории разработки и получать на выходе прогнозные значения. Однако применение сети может повлечь трудности, так как выходное значение будет зависеть от качества подбора весовых коэффициентов для конкретных условий, что делает модель недостаточно универсальной в условиях разных месторождений, но данную проблему возможно решить при переобучении.

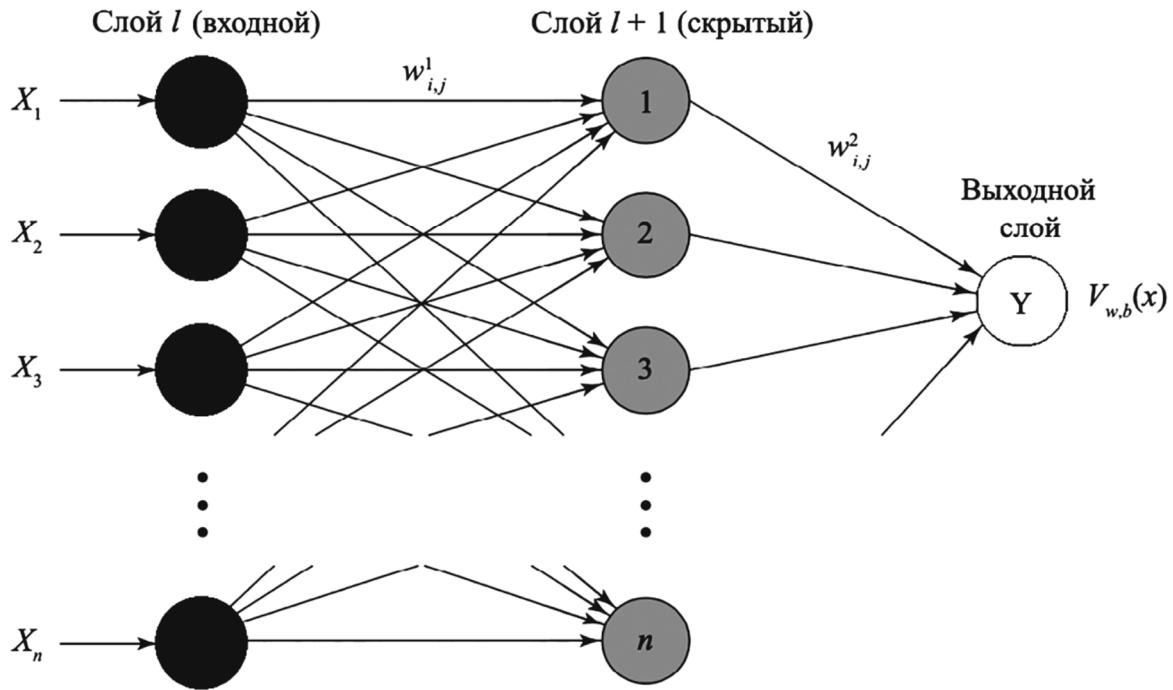


Рис. 1. Структура нейронной сети многослойного персептрана [1]. X – входные данные в виде вектора; w – весовые коэффициенты, b – смещения, $V_{w,b}(x)$ – выходной сигнал нейросети

Многослойные персептраны обучаются методом обратного распространения ошибки, заключающийся в вычислении градиента функции ошибок.

В процессе обучения веса нейронов каждого слоя нейросети корректируются с учетом сигналов, поступивших с предыдущего слоя, и невязки каждого слоя, которая вычисляется рекурсивно в обратном направлении от последнего слоя к первому.

Для осуществления численного эксперимента с нейронной сетью были взяты данные по годовой работе участка с девятиточечной схемой расстановки скважин: на котором пробурены 9 добывающих скважин и 4 нагнетательные (рис. 2). Нагнетательные скважины работали в периодическом режиме для того, чтобы оценить влияние работы каждой из возмущающей скважин на реагирующие добывающие, что понадобится на следующем этапе исследования для реализации вычислительного эксперимента по распределению фильтрационных сопротивлений в пласте.

Базой для проведения расчетов послужила программа Loginom от одноименной отечественной компании Loginom Company. Это low-code платформа, предназначенная для решения аналитических задач, в частности и работы с нейронными сетями без глубокого машинного обучения.

Эксперимент проводился следующим образом: на вход нейронной сети по-давались массивы данных о работе добывающих и нагнетательных скважин за год. Так как архитектурой нейронной сети, на основе литературного обзора, был выбран многослойный персептран – имеется только один выход, и он служил для одной из добывающих скважин. Всего было проведено 9 экспериментов.

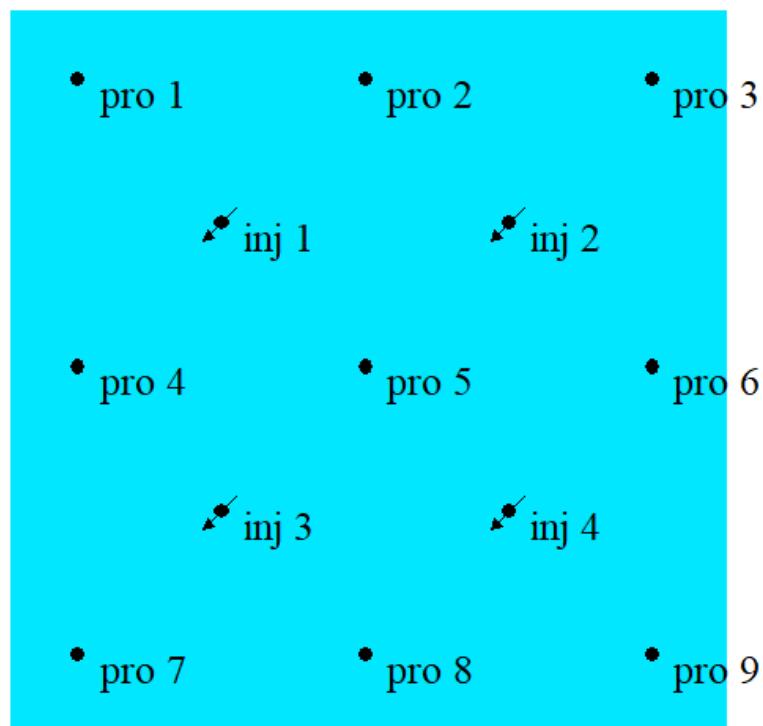


Рис. 2. Схема расстановки скважин

Основные характеристики вычислительной модели представлены в табл. 1.

Таблица 1
Характеристики численной модели многослойного персептрана

Показатель	Значение
Входные данные	дебиты/расходы скважин
Время моделирования	1 год
Дебит добывающих скважин	до $60 \text{ м}^3/\text{сут}$
Расход пара в нагнетательных скважинах	до $135 \text{ м}^3/\text{сут}$
Тип данных	вещественные, непрерывные
Разбиение на множества	обучающее – 80 % тестовое – 20 %
Метод валидации	k-fold кросс-валидация
Скрытые слои	2
Число нейронов в каждом слое	20
Степень регуляризации	100
Количество эпох	100

По итогам численных экспериментов были получены прогнозные значения дебитов для всех 9 добывающих скважин, построены графики сравнения этих значений с фактическими и оценена точность прогноза по методу средней квадратичной отклонения [2].

На рис. 3 представлен график сравнения фактических и прогнозных данных по добывающей скважине 1. Как видно, при прогнозировании у нейронной сети возникают трудности при расчете начальных значений и конечных, что видно из графика. Это может быть связано с зашумленностью и объемом исходных данных для прогнозирования, а также особенностями работы нейронной сети.

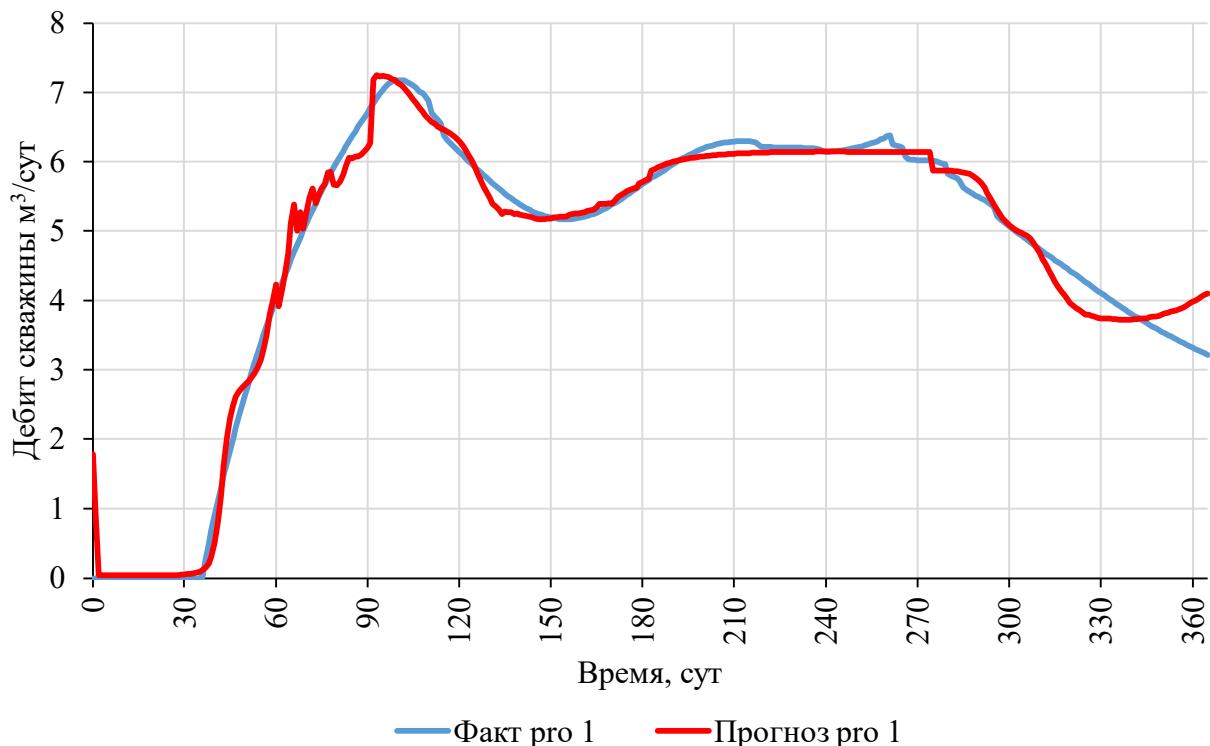


Рис. 3. Сравнение фактических и прогнозных данных для добывающей скважины 1

В табл. 2 представлены показатели точности прогнозирования дебитов, определенные по среднему квадратичному отклонению всех девяти добывающих скважин.

Таблица 2
Показатели точности прогнозирования

№ добывающей скважины	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Точность прогноза, %	88,5	80,7	14,2	89,7	84,3	43,6	76,3	15,7	26,6

Точность прогнозирования по некоторым скважинам, по результатам расчета, находится на достаточно низком уровне, что не позволяет в данном случае доверять результатам моделирования. Однако учитывая то, что программа предоставляет возможности по более гибкому обучению нейронных сетей, есть вероятность получения более точных показателей прогнозирования.

Выводы:

- по результатам проведенного исследования была изучена архитектура и математическая модель многослойного персептрона;
- проведен численный эксперимент, проанализированы результаты прогнозирования;
- требуется дальнейшее изучение вопроса прогнозирования показателей разработки пласта при помощи нейронных сетей для достижения более высокой точности прогнозирования, с целью последующей реализации численного алгоритма по определению фильтрационных сопротивлений в пласте.

Литература

1. Иваненко Б.П. Исследование точностных характеристик прогноза показателей нефтедобычи с использованием линейной нейронной сети / Б.П. Иваненко // Известия Томского политехнического университета. – 2004. – Т. 307. – № 2. – С. 160-164.
2. Теория статистики: Учебно-методический комплекс / В.Г. Минашкин, Р.А. Шмойлова, Н.А. Садовникова, Л.Г. Моисейкина, Е.С. Рыбакова. – М.: Изд. центр ЕАОИ. 2008. – 296 с.

PREDICTING OF RESERVOIR DEVELOPMENT CHARACTERISTICS WITH USING A FEEDFORWARD NEURAL NETWORK

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

Ukhta State Technical University

Abstract: the introduction of new technical and technological digital solutions is an urgent trend in modern industry. With the help of neural networks, accelerated processing of large amounts of information has become possible, and, what is quite important, forecasting indicators is important. The main area of interest for the authors is the possibility of using neural network modeling to obtain performance indicators of producing wells.

Keywords: neural network, oil and gas industry, mathematical model, forecasting of indicators.

О ДИСКРЕТНОМ КОНФЛИКТЕ В СИСТЕМЕ

С.В. Глущенко

Военный учебно-научный центр военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж
serjvladimir@rambler.ru

Аннотация: В статье рассматривается взаимодействие коррелированных дискретных случайных величин в системе с точки зрения ее оптимизации. Вводится определение конфликта между случайными величинами (признаками системы, по которым осуществляется оптимизация). Доказывается наличие конфликта между признаками в случае отрицательного значения их парного коэффициента корреляции.

Ключевые слова: оптимизация, система, случайная величина, конфликт, парный коэффициент корреляции, условное математическое ожидание.

При решении проблем управления и исследования стохастических систем одной из важнейших является задача анализа возможности достижения заданными признаками (в частности показателями качества) некоторых оптимальных с точки зрения ЛПР значений. Без ограничения общности будем считать, что оптимальным является минимально возможное значение признака. Однако одновременное достижение оптимальных значений несколькими признаками в общем случае невозможно (известная проблема векторной оптимизации), а исследователю приходится работать не с одним решением задачи оптимизации, а с целым множеством Парето, в основе построения которого лежит конфликт рассматриваемых признаков [1, 2].

Поскольку исследуемый признак в математической модели представляет-
ся случайной величиной, то рассмотрим конфликт дискретных случайных величин, используя статистический подход. Пусть X – случайная величина, принимающая значения возможных состояний признака (системы) $S_1: x_1, x_2, \dots, x_n$; Y – случайная величина, принимающая значения состояний признака (системы) $S_2: y_1, y_2, \dots, y_m$. Будем считать, что значения x_1, x_2, \dots, x_n и y_1, y_2, \dots, y_m упорядочены по убыванию (минимизация значений признаков – стремление к оптимуму для обеих систем). Поскольку с увеличением индексов i и j значения x_i и y_j становятся более желательными с точки зрения ЛПР (их полезность возрастает), то основываясь на приведенных определениях и теоремах, определим конфликт случайных величин следующим образом [3].

Определение. Между дискретными случайными величинами X и Y наблюдается конфликт ($X >| Y$), если

$$P_{Y=y_k}(X=x_k) < P_{Y=y_{k-1}}(X=x_k) < \dots < P_{Y=y_1}(X=x_k), \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (1)$$

При $k = m$ получаем

$$P_{Y=y_m}(X=x_n) < P_{Y=y_{m-1}}(X=x_n) < \dots < P_{Y=y_1}(X=x_n) = P(X=x_n)$$

или

$$P_{Y=y_m}(X=x_n) = P(X=x_n),$$

что соответствует конфликту случайных событий.

Соотношение (1) описывает такое изменение значений случайных величин X и Y , при котором меньшим значениям x_i соответствуют большие значения $M_{X=x_i}(Y)$ (условное математическое ожидание Y при $X = x_i$). Другими словами, из определения следует, что $X >| Y$, когда при возрастании одной случайной величины (в данном случае Y) другая (X) имеет тенденцию к убыванию в среднем.

Теорема. Дискретные случайные величины X и Y конфликтуют тогда и только тогда, когда парный коэффициент корреляции $R_{XY} < 0$.

Доказательство.

1) Необходимость.

Рассмотрим выражение коэффициента корреляции

$$r_{XY} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_i - m_X)(y_j - m_Y)P_{ij}. \quad (2)$$

Здесь m_X и m_Y – математические ожидания соответственно X и Y , $P_{ij} = P_{Y=y_j}(X=x_i)$.

Определим центрированные случайные величины $G = Y - m_Y$, $S = X - m_X$, $m_S = m_G = 0$. (2) перепишем в виде

$$r_{GS} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m g_i s_j P_{ij}. \quad (3)$$

Перепишем (3) следующим образом

$$r_{GS} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m g_i s_j P_{ij} = \sum_{i=1}^n g_i \sum_{j=1}^m s_j P_{ij} = \sum_{i=1}^n g_i m_{G=g_i}(S). \quad (4)$$

В (4) сделаем подстановку $z_i = m_{G=g_i}(S)$. $\sum_{i=1}^n z_i = m_S = 0$. Существует такое значение k , для которого $z_1 > 0, \dots, z_k > 0, z_{k+1} < 0, \dots, z_n < 0$. Запишем $z_k = -z_1 - \dots - z_{k-1} - z_{k+1} - \dots - z_n$. Тогда выражение (4) перепишется в виде

$$\begin{aligned} r_{GS} &= \sum_{i=1}^n g_i z_i = \sum_{i=1}^{k-1} g_i z_i + g_k z_k + \sum_{i=k+1}^n g_i z_i = \\ &= \sum_{i=1}^{k-1} g_i z_i + g_k (-z_1 - \dots - z_{k-1} - z_{k+1} - \dots - z_n) + \sum_{i=k+1}^n g_i z_i = \\ &= z_1(g_1 - g_k) + \dots + z_{k-1}(g_{k-1} - g_k) + z_{k+1}(g_{k+1} - g_k) + z_n(g_n - g_k) < 0. \end{aligned}$$

Это выражение имеет отрицательное значение в силу того, что каждое слагаемое меньше нуля, поскольку $\{g_i\}$ – возрастающая последовательность, а $z_1 > 0, \dots, z_k > 0, z_{k+1} < 0, \dots, z_n < 0$.

Прямая часть теоремы доказана.

2) Достаточность.

Пусть $r_{XY} < 0$. Тогда по [4] при возрастании одной из случайных величин (в нашем случае Y) вторая (X) имеет тенденцию к убыванию. А в этом случае $X >| Y$ согласно определению.

Теорема полностью доказана.

Конфликт такого рода назовем дискретным вероятностным конфликтом.

Литература

1. Статистические модели и многокритериальные задачи принятия решений / Под ред. И.Ф. Шахнова. – М.: Статистика, 1979. – 184 с.
2. Сысоев В.В. Системное моделирование многоцелевых объектов / В.В. Сысоев // Методы анализа и оптимизации сложных систем. - М.: РАН, ИФТП, 1993. – С. 80-88.
3. Десятов Д.Б. Анализ конфликта в стохастических системах / Д.Б. Десятов, С.В. Глущенко // Математическое моделирование технологических систем: Сб. науч. тр. – Воронеж: Воронеж. гос. технол. акад. – 1995. – С. 47-53.
4. Вентцель Е.С. Теория вероятностей. – М: Гос. издат. физ. – мат. литературы, 1962. – 564 с.

ABOUT DISCRETE CONFLICT IN THE SYSTEM

S.V. Glushchenko

Military Training and Research Center of The Air Force "Air Military Academy
n. a. prof. N.E. Zhukovsky and Yu.A. Gagarin", Voronezh

Abstract: the article examines the interaction of correlated discrete random quantities in the system from the point of view of its optimization. Definition of conflict introduced between random variables (features of the system by which optimization). It is proved that there is a conflict between the signs in the case of a negative the real value of their pair correlation coefficient.

Keywords: optimization, system, random variable, conflict, paired correlation coefficient, conditional mathematical expectation.

РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОДОЛЬНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ГИБКОГО СТЕРЖНЯ ИЗ НИКЕЛИДА ТИТАНА

М.Ю. Дёмина¹, Н.П. Богданов²

¹Санкт-Петербургский государственный университет промышленных
технологий и дизайна, Высшая школа технологии и энергетики
mdemina59@mail.ru

²Ухтинский государственный технический университет

Аннотация: предложен расчетно-экспериментальный метод определения продольной деформации гибкого стержня из никелида титана, возникающей в результате изгиба при термоциклировании под постоянной нагрузкой.

Ключевые слова: мартенситное превращение, упругая линия, гибкий стержень, радиус кривизны, продольная деформация.

Введение

Линейная теория упругого изгиба стержней, применяемая в курсе сопротивления материалов и строительной механике, основана на предположении о малости перемещений при изгибе по сравнению с длиной стержня и радиусом его начальной кривизны. При этом прогиб стержня линейно зависит от внешних сил [1].

Встречаются такие конструкции, в которых стержень или тонкая полоска сильно изгибаются при работе материала в пределах упругости. Примерами могут служить различного рода плоские или ленточные пружины, гибкие токоподводы к подвижным частям в электромеханических системах, детали клапанов, гибкие упругие связи и т.д.

В связи с этим весьма актуальной является задача определения больших перемещений при изгибе, когда в процессе деформирования тонкой детали сильно изменяется ее первоначальная конфигурация, причем перемещения становятся соизмеримыми с длиной самой детали. Поэтому целый ряд важных для практики особенностей поведения гибких деталей и возможных форм упругой линии при изгибе с большими перемещениями не может быть изучен даже качественно с помощью обычной линейной теории изгиба и возникает проблема определения перемещений и деформаций [2, 3] особенно при дополнительном изменении температуры тела.

Эксперимент

В данном сообщении предлагается применить расчетно-экспериментальный метод для определения радиуса кривизны и деформации при изгибе гибкого тонкого стержня прямоугольного сечения, выполненного из никелида титана.

Стержень представляет собой прямоугольную пластину толщиной $h = 0,60 \pm 0,05$ мм, шириной $b = 18,31 \pm 0,08$ мм и длиной $l = 77,16 \pm 0,08$ мм, выполненную из эквиатомного никелида титана с температурами фазовых переходов $M_h = 62$ °С, $M_k = 30$ °С, $A_h = 44$ °С, $A_k = 72$ °С.

Пластину подвергали плоскому изгибу под действием постоянной силы P при изменении температуры в интервалах мартенситных переходов. Пластину защемляли жестко по одной из коротких сторон, нагревали до температуры 90 °С, нагружали постоянной сосредоточенной силой P , приложенной к противоположному незакрепленному концу, и охлаждали под нагрузкой до температуры ~24 °С, затем нагревали до 90 °С. Нагрев выполняли при помощи инфракрасной лампы ИКЗК электрической мощностью 200 Вт, скорость нагрева составляла 2 градуса в минуту. При охлаждении под нагрузкой пластина изгибалась в вертикальной плоскости, изменяя кривизну, при нагреве под нагрузкой плоская форма пластины восстановливалась.

Деформационный эффект при нагревании через интервал обратного мартенситного перехода фиксировали на видео. Камеру располагали таким образом, чтобы видеть показания температуры нагрева, а изгиб пластины был зафиксирован во всех деталях. Образец закрепляли перед экраном с миллиметровой разметкой. Температуру измеряли с помощью электронного термометра с измерительным щупом на базе термопары из сплава (хромель-алюмель).

Расчетная часть

Для оцифровки экспериментальных данных – температуры и координат образца при изгибе принцип «стоп кадра» для заданных температур с интервалом 5 °С. Скрин стоп кадра загружали в ПО - утилита для Windows «Grafula», которая позволяет перевести в числовую форму данные, представленные в виде нарисованного или отсканированного графика (рис. 1).

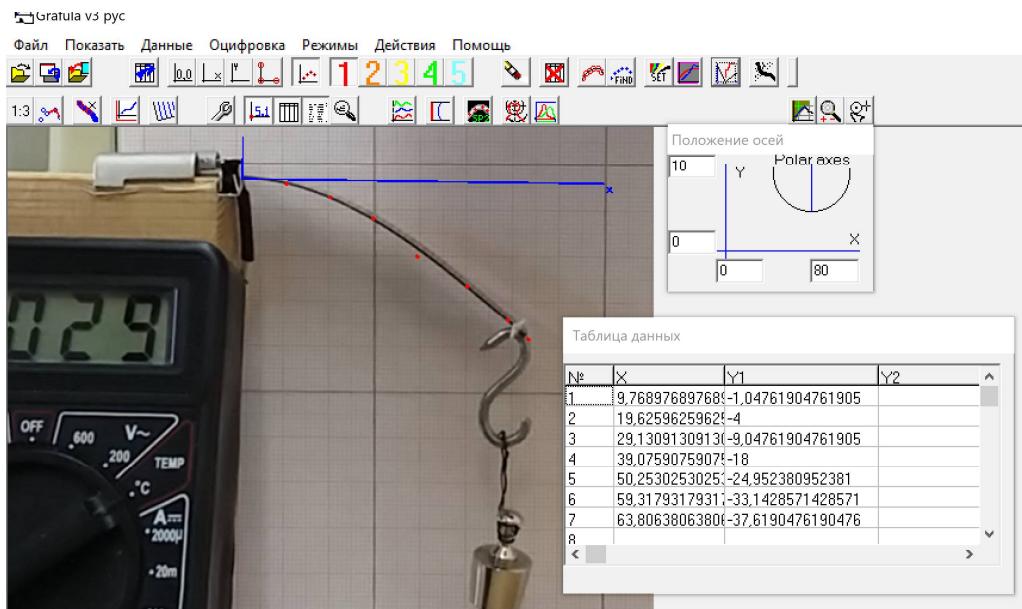


Рис. 1. Определение смещений поперечных сечений гибкого стержня при нагреве под постоянной нагрузкой

Полученные экспериментальные смещения точек в вертикальном и горизонтальном направлениях использовали для определения уравнения упругой линии. Методом наименьших квадратов, реализованным в Microsoft Excel, аппроксимировали кривую полиномом третьей степени. На рис. 2а показаны построенные в результате числовой обработки экспериментального видеоряда продольные оси гибкого стержня относительно недеформированного состояния при разных температурах на этапе нагрева, а на рис. 2б на этапе охлаждения для приложенной нагрузки $P = 1$ Н.

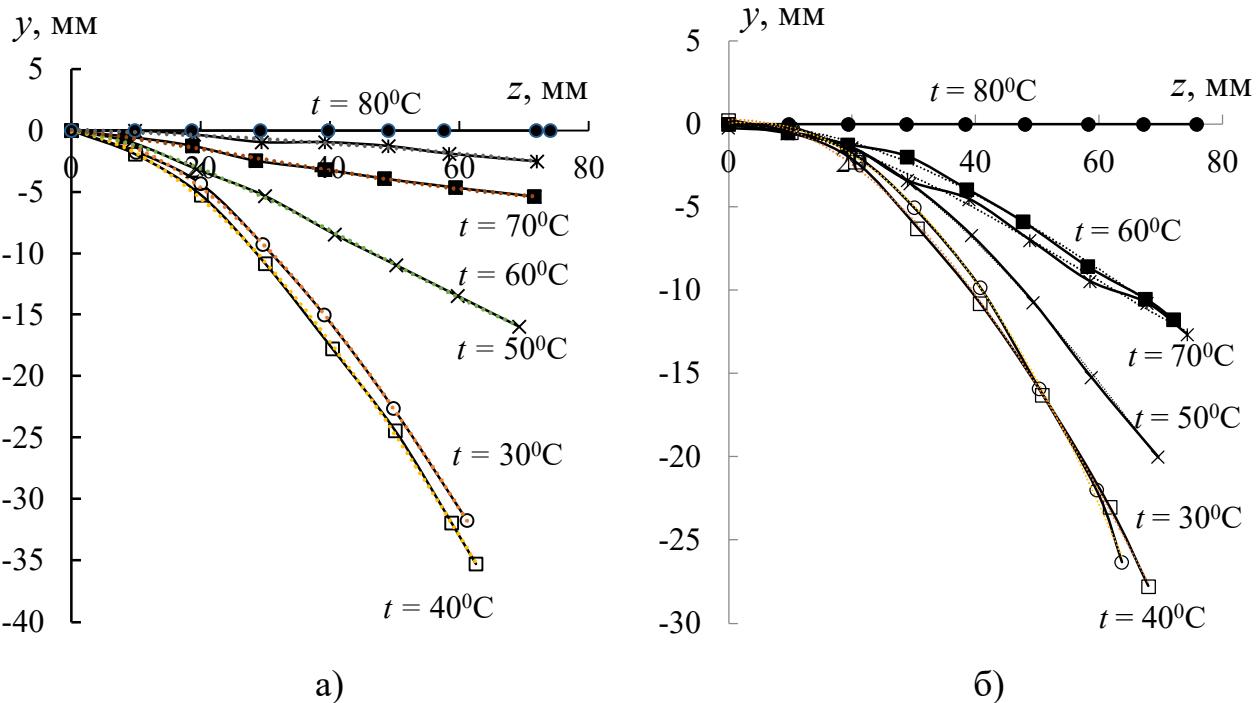


Рис. 2. Упругие линии защемленного стержня из никелида титана под постоянной нагрузкой $P = 1$ Н при: а) нагреве; б) охлаждении

Полученные уравнения использовали для определения кривизны упругой линии в конкретной точке, так как между радиусом кривизны плоской кривой ρ и координатами ее точек y и z существует зависимость

$$\frac{1}{\rho} = \frac{\frac{d^2 y}{dz^2}}{\left(1 + \left(\frac{dy}{dz}\right)^2\right)^{3/2}}. \quad (1)$$

Определив радиус кривизны ρ , вычисляли продольную деформацию поверхности стержня в точке с координатой z

$$\varepsilon_{max} = \frac{h}{2\rho}. \quad (2)$$

Ниже приведена последовательность расчета деформации и напряжения для сечения с координатой $z = 40$ мм относительно заделки на этапе нагрева под нагрузкой $P = 1$ Н при температуре $t = 30^0\text{C}$.

Уравнение упругой линии для этой температуры имеет вид

$$y = 4 \cdot 10^{-5} z^3 - 0,0106 z^2 - 0,0326 z - 0,0916,$$

находим производные полинома

$$y'(z) = 12 \cdot 10^{-5} z^2 - 0,0212 z - 0,0326,$$

$$y''(z) = 24 \cdot 10^{-5} z - 0,0212.$$

Определяем численные значения производных для координаты $z = 40$ мм

$$y'(40) = 12 \cdot 10^{-5} \cdot 40^2 - 0,0212 \cdot 40 - 0,0326 = -0,6886,$$

$$y''(40) = 24 \cdot 10^{-5} \cdot 40 - 0,0212 = -0,0116,$$

которые подставляем в уравнение (1) для определения кривизны стержня

$$\frac{1}{\rho} = \frac{y''}{\left(1 + (y')^2\right)^{3/2}} = \frac{-0,0116}{\left(1 + 0,6886^2\right)^{3/2}} = -0,00648 \text{ мм}^{-1}.$$

Максимальная деформация в сечении с координатой $z = 40$ мм при температуре $t = 30^0\text{C}$ и нагрузке $P = 1$ Н составила

$$\varepsilon_{max} = \frac{h}{2\rho} = -0,0194\%.$$

Подобная последовательность расчетов была выполнена для точек с другими координатами z и представлена в таблице. Продольная деформация гибкого стержня из никелида титана при нагреве через интервал мартенситного превращения под нагрузкой $P = 1$ Н не превышала 1%, при этом смещение сечений от положения недеформированного состояния составляло значительную величину.

Максимальная деформация при изгибе гибкого стержня из никелида титана на этапе нагрева под нагрузкой, %

t ^0C	Положение поперечного сечения гибкого стержня относительно заделки, мм					
	10	20	30	40	50	60
30	-0,521	-0,390	-0,278	-0,194	-0,132	-0,087
40	-0,487	-0,359	-0,254	-0,176	-0,119	-0,077
50	-0,179	-0,123	-0,071	-0,0216	0,027	0,076
60	-0,031	-0,015	0,001	0,016	0,032	0,048
70	-0,013	-0,014	-0,016	-0,017	-0,019	-0,021

Таким образом, предложенный расчетно-экспериментальный метод позволяет определить продольные деформации гибкого стержня из никелида титана, возникающие в результате изгиба при термоциклизации под постоянной нагрузкой.

Литература

1. Тимошенко, С. П. Курс теории упругости [Текст] / С. П. Тимошенко. – М.: Изд-во «Наукова думка». - 1972. - 501 с.
2. Ландау, Л. Д. Теория упругости [Текст] / Л. Д. Ландау, Е. М. Лившиц. – М.: Наука. – 1987. – 248 с.
3. Попов, Е. П. Теория и расчет гибких упругих стержней [Текст] / Е. П. Попов. – М.: Наука. – 1986. – 296 с.

CALCULATION AND EXPERIMENTAL METHOD FOR DETERMINING LONGITUDINAL DEFORMATION OF A FLEXIBLE TITANIUM NICKELIDE ROD

M.Yu. Demina¹, N.P. Bogdanov²

¹ Saint Petersburg State University of Industrial Technologies and Design Higher School of Technology and Power Engineering

² Ukhta State Technical University

Abstract: A calculation and experimental method is proposed for determining the longitudinal deformation of a flexible titanium nickelide rod resulting from bending during thermal cycling under a constant load.

Keywords: martensitic transformation, elastic line, flexible rod, radius of curvature, longitudinal deformation.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАТВЕРДЕВАНИЯ ДЕТАЛИ ОТВЕТСТВЕННОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Т.И. Сушко¹, А.Е. Кожемякин¹, С.В. Ильинский¹, Т.В. Пашнева²

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

²Воронежский государственный технический университет
tat120675@yandex.ru

Аннотация: инженерную подготовку курсантов, на наш взгляд, можно улучшить посредством формирования междисциплинарной компетенции. Рассмотрен процесс формирования междисциплинарной компетенции курсантов на примере решения практической задачи, а именно, моделирования теплофизических процессов затвердевания детали ответственного назначения. При решении прикладных задач курсанты авиационного военного технического вуза приобретают первые проектные навыки инженерного образования посредством компьютерных технологий, которые помогают им научиться составлять технические задания с разработкой технологического процесса для обеспечения как ремонта авиационного оборудования, так и понимания многих специальных дисциплин, что соответствует индивидуализации образовательной траектории.

Ключевые слова: физические процессы затвердевания, имитационное моделирование, компьютерное моделирование.

Практическую реализацию индивидуализации образовательной траектории (ИОТ) [1] помогает осуществить компьютерное моделирование на основе математических моделей и граничных условий, теоретических сведений и набора опытных решений для возникающей технологической задачи. По окончании поиска оптимальных вариантов решения поставленной задачи курсанты представляют отчеты на заседаниях военно-научной секции кафедры физики в виде проектов. Моделирующей программой физических процессов затвердевания на основе русского интерфейса является программа LVMFlow, позволяющая посредством зрительного графического восприятия как статической, так и динамической информации (например, видео) создать и апробировать трехмерные конструкции деталей и узлов, провести выборку и инженерный анализ, быстроту поиска дефектов в данных конструкциях и узлах, визуально оценить технологический процесс затвердевания детали. В ходе имитационного моделирования задаются параметры, такие, как граничные условия, геометрия отливки и детали в соответствии с чертежом. Результаты расчетов представляются курсантами в проектах в виде графиков, этапов создания трехмерных моделей отливки и визуализации последовательного цикла воспроизведения качественной детали, начиная от чертежа до трехмерного изображения деталей и узлов с возможностью последующей корректировки в графических системах, таких, как SolidWorks и LVMFlow, посредством которых курсанты овладевают виртуальными способами восстановления деталей авиационной техники. Комплекс САПР SolidWorks обладает всеми возможностями для оформления чертежей во

многих системах стандартов, с визуальным наблюдением направленности затвердевания деталей, гидравлических потоков. Процесс охлаждения отливки происходит в результате теплообмена между залитым металлом и смесью, облицовывающей стенки отливки. Математическая модель процесса затвердевания отливки – это система дифференциальных уравнений теплопроводности с граничными и начальными условиями, задаваемыми преподавателем, технологическими данными и геометрическими параметрами отливки и формы, диаграммой состояния сплава заданного состава.

В работе представлены результаты ИОТ посредством компьютерного моделирования процесса затвердевания отливки «Корпус клапана» из стали 30ХМЛ ответственного назначения на основе аналитических возможностей программы LVMFlow, способ литья – литье по выплавляемым моделям (ЛВМ) [3]. К детали предъявляют особо высокие требования по качеству, а именно по плотной структуре металла, отсутствию недоливов и пустот, обусловленных газовой пористостью, герметичности и износостойкости. Дефекты в отливке в виде усадочных раковин и газовой пористости при литье в большинстве случаев связаны с неправильным устройством и влиянием различных технологических факторов: температуры формы, температуры заливки, количества слоев огнеупорного покрытия. Влияние этих факторов на отливку «корпус клапана» будет рассмотрено в данной работе. Решение данной задачи строится на визуальном наблюдении течения процесса направленного объемного охлаждения и затвердевания стенок отливки при параметрах, задаваемых курсантом. Результатом считалось определение для каждой выделенной графической области такого значения параметра теплоаккумуляции огнеупорного покрытия, которое бы обеспечивало для данной технологии литья в ЛВМ получение плотной структуры металла [5].

Технология изготовления детали «Корпус задвижки» методом ЛВМ подразумевает наличие дефектов, таких, как газовая рыхлota и пористость в тепловом узле и в нижней зоне фланцев патрубков в соответствии с теоретическими представлениями. Первоначально в CAD-системе SolidWorks [4] была построена геометрическая виртуальная трехмерная модель отливки с литниково-питающей системой, рекомендуемой для данного типа. Как известно, термические узлы препятствуют направленному затвердеванию отливки снизу вверх, т.е. в зону прибыли, поэтому расчет толщины стенок детали проводился как в зависимости от теплоаккумуляции материала, так и согласовывался с зоной термического влияния узлов. Трехмерное виртуальное изображение отливки с конструктивными элементами системы питания (СП) и отметкой вероятных дефектных мест в отливке изображены на рис. 1. Масса детали составляет 150 кг, размеры $541 \times 229 \times 302$ мм. Для имеющегося геометрического образа объекта моделирования была сгенерирована конечно-разностная сетка отливки и сетка для всех объемов формы, импортируемая в систему компьютерного моделирования.



Рис. 1. Модельное представление отливки

Теплофизические свойства сплава 30ХМЛ смоделированы в подпроцессорном модуле программы LVMFlow, также из банка программы выбирались как теплофизические свойства материала отливки, так и формы, и задавались усадочные свойства сплава. Виртуальную трехмерную модель отливки конвертировали в формат CVG и проводили работы, кинематические расчеты в соответствии с условиями рассматриваемого процесса затвердевания. Также нами был определен размер ячейки сетки для расчетов количества всех ячеек и объема необходимой памяти процесса. Способ оптимальной конструкции системы питания жидким металлом корковой формы для получения качественной отливки выбирался в соответствии с необходимыми условиями, такими, как обеспечение направленного затвердевания отливки снизу вверх, конструктивных элементов литниково-питающей системы, рассчитанных теоретически и построенных виртуально, технология изготовления парафиновой массы для корковой формы, оптимального числа слоев огнеупорного покрытия для данной массы отливки, материала пресс-формы для получения модельных звеньев и др. По нашему мнению, оптимальным вариантом конструкции системы питания оказался восьмой (система местных прибылей) тип, что совпадает с теоретическими рекомендациями. Трехмерная виртуальная модель системы питания представлена на рис. 2.

Следующим этапом стала серия собственно расчетов затвердевания детали. Расчет усадочных дефектов проводили на модели со сложной структурированной двухфазной зоной сплава 30ХМЛ с критическими точками, определяемыми количеством жидкой фазы по объему расплава в любой момент времени. К ним относятся следующие точки: первая – начала линейной усадки, вторая – гравитационного течения жидкости и третья – полного прекращения междендритных каналов, изменяющихся в широких пределах. К исходным данным для компьютерного моделирования отнесли: шамотный наполнитель с теплофизическими параметрами из банка подпрограммного модуля, опока без наполнителя, температуру заливки выбирали из банка «Сплав» 1600° С; толщину нанесенной оболочки для деталей ответственного назначения выбрали порядка 16 мм; начальную температуру огнеупорной формы выбирали 700 °С, время заливки порядка 30-40 с. Границные условия: излучение в среду с температурой 20°С. Соотношение критических точек в нашем случае жесткие – 0,5-0,45-0,4. Отливку считаем бездефектной, если значение усадки и микропористости попадут в допустимый интервал, он представлен на шкале и окрашен в цвета от белого до красного для усадки и от белого до зеленого для пористости. Все что меньше 1 % в объеме одного узла сетки является допустимым значением. Максимальное значение пористости в нашем расчете на один объем сетки составило порядка 6% в тепловом узле под центральной прибылью отливки, что явля-

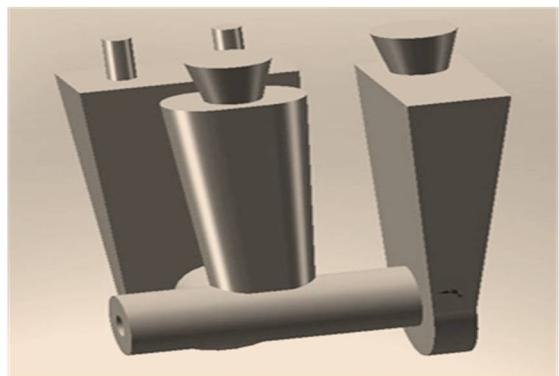


Рис. 2. Модельное представление системы питания отливки

ется недопустимым значением. На рис. 3 представлен результат компьютерного моделирования отливки «Корпус клапана» с формовкой в опоке для выявления мест со значениями, превышающими допустимые, для усадки и газовой пористости.

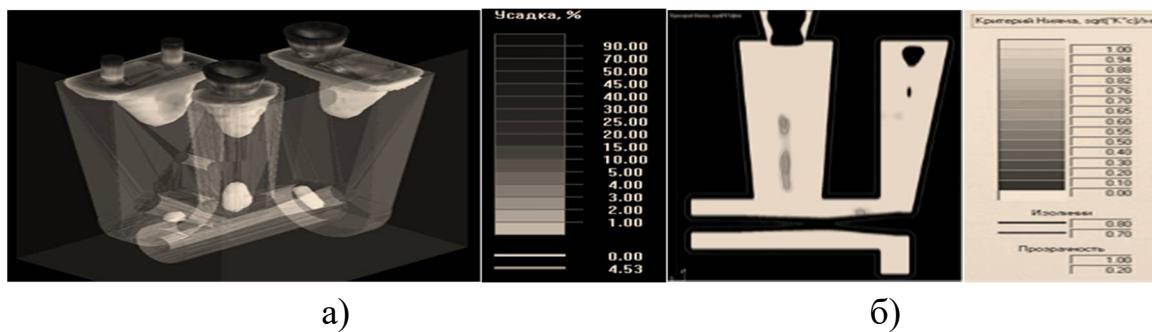


Рис. 3. Усадка и пористость, выявленные в детали по расчетам:
а) усадка; б) пористость

Полный анализ результатов расчетов выявил большую вероятность образования усадочных дефектов в районе тепловых узлов, что, по нашему мнению, связано с несовершенной системой питания отливки. Как и предполагалось, в верхней части под прибылью находится самый большой объём усадочной раковины, порядка 6% на единицу объема конечно-разносной сетки отливки в тепловом узле под центральной прибылью отливки, что является недопустимым значением. В других термических зонах отливки, а именно, в нижней зоне фланцев, значение усадки составило порядка 3%, данное значение усадки указывает на дефекты, приводящие к неплотной структуре и вероятности ее разрушения. Компьютерный расчет критерия Нияма (он характеризует газовую пористость) также указывает на наличие обширных зон микропористости в тех же самых областях. Места их залегания как в центральной части отливки, так и во фланцах. Таким образом, можно сделать вывод о недостаточной работе по питанию отливки центральной прибыли. Металл в последнюю очередь затвердевает в тепловом узле, а не в прибыли, что, по нашему мнению, и приводит к образованию усадочных дефектов, центральная прибыль не справляется со своей задачей [6].

Процесс моделирования позволил наглядно увидеть недостатки способа заливки стали через центральную прибыль. Выбранный тип питания, к сожалению, влияет на неравномерную теплопроводность и нагрев корковой формы в месте соединения литьевых каналов и приводит к значительным дефектам. По нашему мнению, необходимо провести оптимизацию как конструкции литниково-питающей системы, так и технологического процесса, посредством подбора оптимальных технологических параметров для литья по выплавляемым моделям.

Литература

1. Сушко Т.И. Междисциплинарное обучение курсантов физике посредством моделирования физических процессов затвердевания / Т.И. Сушко, Р.Ш. Караев, Т.В. Пашнева // Научный альманах. – 2019. – № 6. – С. 128-134.

2. Турищев, В.В. Моделирование литейных процессов: что выбрать? [Текст] // САПР и графика. – 2005. – № 11. – С. 27-30.
3. Программное обеспечение LVMFlowCV. Разработка НПО МКМ // URL: http://wp_lvm.mkmsoft.ru/?page_id=2 (дата обращения 12.04.2024)
4. SolidWorks 3D CAD // URL: <https://www.solidworks.com/ru/product/solidworks-3d-cad> (дата обращения 12.04.2024) 3D CAD Design Sofware SolidWorks [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.solidworks.ru> (06.10.2018).
5. Баландин Г.Ф. Теория формирования отливки: Основы тепловой теории. Затвердевание и охлаждение отливки. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1998. 360 с.
6. Сушко Т.И. Компьютерное моделирование как способ корреляции снижения затрат на изготовлении стальных отливок / Т.И. Сушко, Р.Ш. Караев // Сб. науч. ст. по материалам X Национальной научно-практической конференции с международным участием «Моделирование энергоинформационных процессов» (21–23 декабря 2021 г.). Воронеж: ВГУИТ, 2022. С. 207-211.

MODELING THE SOLIDIFICATION PROCESS OF A CRITICAL COMPONENT

T.I. Sushko¹. A.E. Kozhemyakin¹, S.V Iliinskiy¹, T.V. Pashneva²

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

²Voronezh State Technical University

Abstract: in our opinion, the engineering training of cadet can be improved through the development of interdisciplinary competence. The process of developing interdisciplinary competence of cadet is considered using the example of solving a practical problem, namely, modeling the thermophysical processes of solidification of a critical part. When solving applied problems, cadets of the Aviation Military University acquire the first project skills of engineering education through computer technologies, which help them learn how to draw up technical specification with the development of technological processes to ensure both the repair of aviation equipment and an understanding of many special disciplines, which corresponds to the individualization of the educational trajectory.

Keywords: physical processes of solidification, simulation modeling, computer modeling.

СОЗДАНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ ВОЗДУШНОГО СТАРТА И ОПТИМИЗАЦИЯ ПОЛЕТА БПЛА ВЕРТИКАЛЬНОГО ВЗЛЕТА С ОГРАНИЧЕННЫХ ПЛОЩАДОК

А.Е. Кожемякин¹, Т.И. Сушко¹, Т.В. Пашнева²

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

²Воронежский государственный технический университет
tat120675@yandex.ru

Аннотация: одним из результатов проектной деятельности курсантов является опыт совместной разработки проектов по тематике «Разработка и оптимизация беспилотных летательных аппаратов (БПЛА) вертикального взлета и посадки (ВВП) малых размеров повышенной грузоподъемности» [1]. Тема является актуальной, так как диапазон современных беспилотных аппаратов очень широк: от микро- и мини-БПЛА до тяжелых многотонных аппаратов, а их назначение не ограничивается только военной промышленностью, поскольку с необходимостью они применяются в спасательных операциях, грузоперевозках, сельском хозяйстве, охране границ, что придает импульсы к развитию беспилотной авиационной техники. Взлет и посадка – важные этапы полетов современных БПЛА, от качества расчета и выполнения этих операций зависит не только эффективность проводимых с их использованием работ, но и возможность их многоразового применения. С увеличением применения беспилотных летательных аппаратов (БПЛА) в различных сферах, таких как военные операции, мониторинг окружающей среды и доставка грузов, возникает необходимость в эффективных методах их запуска. Запуск БПЛА с закрытых позиций становится особенно актуальным в условиях современных конфликтов, где скрытность и безопасность операций имеют первостепенное значение.

Ключевые слова: беспилотная авиация, взлет, посадка, мультикоптер.

Одним из ограничений применения БПЛА является требование наличия полосы для взлета и посадки. Задачей управляемого полета в беспилотной авиации является проектирование программ полета на основе частных математических моделей движения в вертикальной или горизонтальной плоскостях и конкретизации векторов косвенного управления [2]. Существенной проблемой остается малое количество работ в открытом доступе по математическому и физическому описанию основных видов взлета и посадки современных БПЛА, что не позволяет при моделировании учитывать характеристики местности для выбранных взлетно-посадочных площадок беспилотных подразделений. Для облегчения сложных электрических расчетов и имитационного моделирования двигателя возможно использование условно бесплатного веб-сервиса eCalc, который с 2004 года предоставляет услуги по моделированию и оценке проектов радиоуправляемых моделей, представляющий собой онлайн-калькулятор [3]. Целью этапа работы, выполняемой в рамках указанного проекта, является разработка БПЛА вертикального взлета малых размеров повышенной грузоподъемности с двигателями, расположенными в разных плоскостях, и новым видом

крепления груза в виде электромагнитного замка, с изменением запуска БПЛА малого радиуса действия массой от 35 до 150 кг. Исходные данные: материал балки: карбон (модуль упругости $E = 70$ ГПа, предел прочности $\sigma = 600$ МПа), длина балки: 0.7 м. Нагрузка: тяга двигателя 65 кг (637 Н) + вибрации (коэффициент запаса 2.5), рис. 1.



Рис. 1. Трехмерная модель балки

Подъём БПЛА: мультикоптер поднимает БПЛА самолетного типа на расчетную высоту до 1500 м. Запуск двигателя БПЛА: оператор БПЛА самолетного типа активирует электростартер через радиоканал, рис. 2.

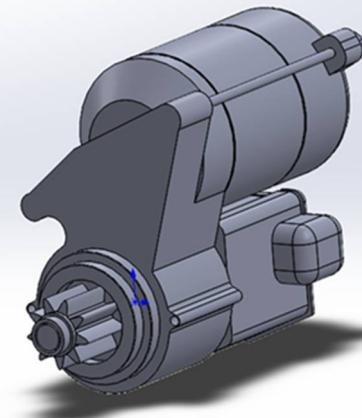


Рис. 2. Трехмерная модель электростартера

При механическом движении аппарата учитывалась несбалансированность основных сил, возникающих в полете: тяга, лобовое сопротивление, подъемная сила и вес; – для ускорения в направлении большей силы в соответствии с законами механики сред. Имитационное моделирование полета БПЛА проводилось в веб-сервисе eCalc с учетом объективных технических характеристик: взлетная масса, дальность, высота и продолжительность полета, размеры аппарата, размер и мощность электродвигателей, определяемые габаритами выбранной рамы БПЛА. Компьютерное моделирование полета БПЛА малого радиуса действия позволило авторам внести изменения в конструкцию его крепления к фюзеляжу. Основу расчетов составляют кинематические уравнения механического движения и законы аэродинамики. На рис. 3 показан расчет дальности полета и воздушная скорость при выбранном типе двигателей.

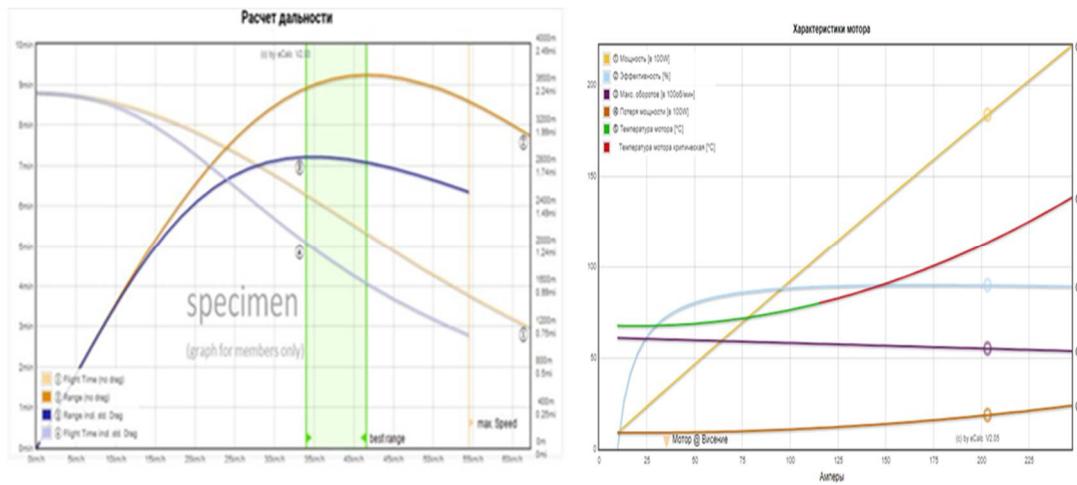


Рис. 3. Расчет дальности полета и воздушная скорость при выбранном типе двигателей

Ранее, с помощью программного комплекса SolidWorks [4] были разработаны трехмерные модели крестовины, подкоса, вставки крепления, штанги для крепления двигателя, подкоса и крестовины на основе конечно-разностной сетки, состоящую из трех элементов формы БПЛА (рис. 4), функция комплекса «Сборка» позволяет осуществить получение трехмерного изображения мультикоптера.

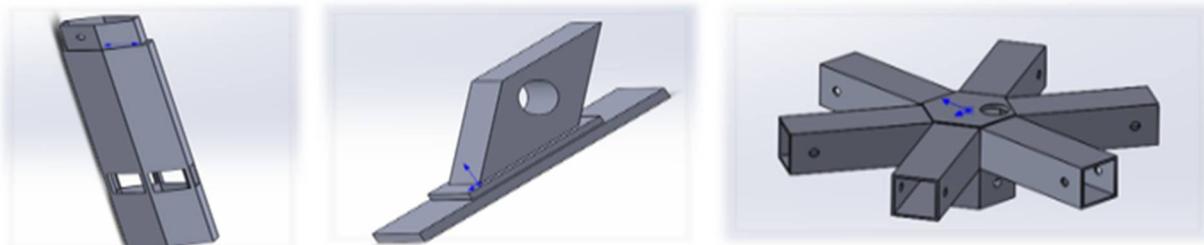


Рис. 4. Трехмерные модели подкоса, вставки крепления и крестовины

Формат .stl позволяет передавать трехмерные модели на 3D-принтер для изготовления элементов БПЛА, процесс его сборки и изготовление частей показан на рис. 5.



Рис. 5. Процесс сборки БПЛА

Условия рельефа местности в некоторых регионах не позволяет иметь взлетно-посадочную полосу, что является основной проблемой для мультикоптера вертикального взлета. Одним из способов решения проблемы взлета с любой наземной точки, по нашему мнению, могут являться конструктивные изменения вида крепления. В качестве такой модернизации предложен электромагнитный замок, позволяющий без потери времени и с большей надежностью поднимать и отпускать груз при сохранении нужной грузоподъемности (рис. 6). Это позволит осуществить оптимизацию конструкции крепления посредством изменения подъема за счет системы электромагнитных замков в виде 10-мм металлических шайб, приклеенных к фюзеляжу в количестве четырех штук, и добавления электростартера на двигатель внутреннего сгорания.



Рис. 6. Изменения, внесенные в конструкцию крепления

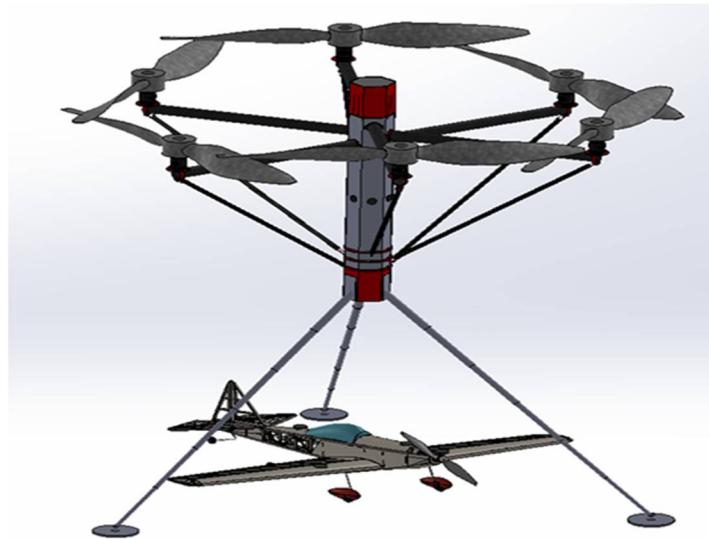


Рис. 7. Разработанный мультикоптер

С помощью разработанного мультикоптера (рис. 7) осуществляется подъем БПЛА на высоту и обесточивание электрозамков с дальнейшим пикированием БПЛА до набора необходимой скорости, переход с набора вертикальной скорости в горизонтальную с дальнейшим продолжением полета и выполнением

ем необходимых задач. Расчет радиуса выхода из набора вертикальной скорости в горизонтальную при данном способе запуска был проведен с учетом тяги и лобового сопротивления. Радиус изменялся от 6,57 м при скорости 100 км/ч до 19 м при скорости 170 км/ч. Сравнительный анализ показал, что использование новых технологий крепления груза, таких как электромагнитные замки, значительно увеличивает эффективность операций по доставке. В отличие от традиционных систем, которые часто полагаются на механические замки или веревочные системы, электромагнитные замки обеспечивают более быструю и надежную фиксацию груза. Это особенно важно при запуске с закрытых позиций, где время имеет критическое значение. Электромагнитные замки, напротив, обеспечивают мгновенное освобождение груза по команде, что позволяет значительно сократить время на подготовку к запуску. Это также снижает риск случайного освобождения груза во время полета, что может привести к авариям.

Таким образом, в процессе разработки и конструирования предложено решение в изменении расположении двигателей в разных плоскостях, позволяющее повысить грузоподъемность мультикоптера, но при этом сохранить малые размеры по сравнению с аналогичными. По результатам имитационного моделирования авторами внесены конструктивные изменения в способ запуска БЛА самолетного типа, которые выразились в изменении крепления в виде электрозамка. Проведены расчеты воздушной скорости, дальности полета, она составила при максимальной нагрузке 150 кг около 3200 м [5]. Проект не только имеет «смысл жизни», но и предлагает прорывные решения для индустрии беспилотников. Его ключевое преимущество – универсальность: один аппарат заменяет две платформы (грузовой мультикоптер и стартовую площадку для БПЛА). При успешной реализации и оптимизации затрат разработка может занять нишу между малогабаритными дронами и тяжелыми промышленными моделями, предложив уникальный функционал по конкурентной цене.

Литература

1. Сушко Т.И., Формирование инженерных навыков курсантов посредством компьютерного моделирования / Т.И. Сушко, А.Е. Кожемякин, Т.В. Пащенева // Физико-математическое моделирование систем: материалы международного семинара. – Воронеж: ФГБОУ ВО «ВГТУ», 2023. – С. 122-126.
2. Булат П.В. Основы аэродинамики и динамики беспилотных летательных аппаратов: учебное пособие / П.В. Булат, С.Ю. Дудников, П.Н. Кузнецов. – М.: Спутник+, 2021. – 273 с.
3. eCalc - reliable electric drive simulations. - URL: <https://www.ecalc.ch> (дата обращения 12.03.2025)
4. SolidWorks 3D CAD. - URL: <https://www.solidworks.com/ru/product/solidworks-3d-cad> (дата обращения 17.03.2025)
5. Кожемякин А.Е. Расчет радиуса кривизны полета самолета при переходе к набору вертикальной скорости с учетом тяги двигателя и лобового сопротивления при старте с нулевой скоростью. – Свидетельство о государственной регистрации программы № 2024681669 от 06 сентября 2024 г.

CREATION OF 3D MODEL OF AIR LAUNCH AND OPTIMIZATION OF FLIGHT OF VERTICAL TAKEOFF UAVS FROM RESTRICTED SITES

A.E. Kozhemyakin¹, T.I. Sushko¹, T.V. Pashneva²

¹Military Educational and Scientific Center of the Air Force “N.E. Zhukovsky
and Yu.A. Gagarin Air Force Academy”, Voronezh
²Voronezh State Technical University

Abstract: one of the results of the cadets' project activities is the experience of joint development of project on the topic of “Development and optimization of small-sized unmanned aerial vehicles (UAVs) with vertical takeoff and landing (VTOL) and increased carrying capacity” [1]. The topic is relevant as the range of modern unmanned aerial vehicles is very broad: from micro- and mini-UAVS to heavy multi-ton devices, and their purpose, is not limited to the military industry, as they are used in rescue operations, cargo transportation, agriculture, border protection, which gives impetus to the development of unmanned aerial vehicles. Takeoff and landing are crucial stages of modern UAV flight. The quality of calculation and execution of these operations determines not only the effectiveness of operations carried out using them, but also their reusability. With the increasing use of unmanned aerial vehicles (UAVs) in various fields such as military operations, environmental monitoring, and cargo delivery, there is need for efficient launch method. Launching UAV's from concealed positions is becoming especially relevant in modern conflicts, where operational secrecy and security are paramount.

Keywords: unmanned, takeoff, landing, multicopter.

ОПТИМИЗАЦИЯ И КОНСТРУИРОВАНИЕ КОКИЛЯ ДЛЯ ОТЛИВКИ «ВТУЛКА» ПОСРЕДСТВОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Т.И. Сушко¹, А.Е. Кожемякин¹, Т.В. Пашнева²

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

²Воронежский государственный технический университет
tat120675@yandex.ru

Аннотация: для укрепления обороноспособности страны необходимо развивать не только крупные предприятия машиностроительного комплекса, но и оказывать помощь малым частным литейным предприятиям по выпуску широкой линии изделий из различных марок сплавов, в том числе и для оборонной промышленности. Система компьютерного моделирования LVMFlow давно применяется в нашей стране для ускоренной оптимизации технологии изготовления отливок и помогает малым предприятиям в поисках способов снижения себестоимости продукции, что возможно не только инженеру-технологу, но и курсанту, в случае изучения CAD-программ, существующих на современном рынке труда. Имитация физических процессов на основе математических методов моделирования остаётся основной методикой для малых и иных предприятий для проектирования деталей с выполнением требований заказчиков по наличию заданных эксплуатационных и технических свойств. Выбор способа литья в данном случае определялся возможностями малого предприятия.

Ключевые слова: литье в кокиль, технология изготовления отливок, компьютерное моделирование.

Авторами в данной статье рассматривается литье в кокиль, так как форма кокиля сходна с конфигурацией деталей типа тел вращения. Детали можно отлить с маленькими припусками, с меньшим расходом сплава, минимальными затратами на механическую обработку и себестоимостью готовых продуктов, деталей массой от нескольких грамм до сотен тонн, с толщиной стенок от десятых долей миллиметра до нескольких метров. Конструирование оснастки всегда необходимо для повышения показателей кокиля. Разработка оптимального кокиля оказывает влияние на процесс затвердевания и формирования отливки, трудоемкость технологических операций при сборке – разборке кокиля, экономические затраты и себестоимость деталей при литье в кокиль. При разработке технологического процесса изготовления, а также при выборе наиболее выгодного варианта, включающего все технические, экономические и эксплуатационные свойства детали, особое внимание уделяют разработке конструкции оснастки. Для этого надо использовать минимальное количество разъемов стенок, как в детали, так и в кокиле с формированием внутренних и наружных поверхностей системы питания отливки, устройством установки и извлечения стержней, а также выбора материала стержня на основе свойств теплопроводности, выбора вытряхного или разъемного кокиля. Вытряхной кокиль требует больше операций и наличия вкладышей для отделения затвердевшей отливки от стенок кокиля, но тем самым можно получать более плотные отливки. Од-

ним из существенных минусов литья в кокиль остается повышенная склонность медного сплава к возникновению термических напряжений в теле отливки, не обеспечивающих требований заказчиков по качеству. Поэтому при литье в кокиль полых отливок тел вращения из медных сплавов [1] рекомендуется создание условий для встречи фронтов затвердевания заливающего расплава со стороны формы и стержня, исходя из условий использования металлических составных стержней большой теплоёмкости при использовании разъёмного кокиля.

Цель данной работы – посредством компьютерного моделирования провести выбор конструкции кокиля для изготовления отливки из бронзы «Втулка дробильная», в которой выполняются требования по техническим характеристикам и качеству детали. Масса детали порядка 200 кг, масса отливки при единичном производстве порядка 340 кг, геометрические размеры – длина втулки порядка 1000 мм, конусность 1:10, наружные диаметры 350 и 450 мм, внутренние диаметры 280 и 350 мм. Заказчик определил ее как отливку ответственного назначения, к ней предъявляются требования по износостойкости, герметичности и плотности материала бронзы БрО5Ц5С5. Геометрическую конструкцию детали можно представить как полый конус с толщиной верхнего основания стенок 50 мм и порядка 30 мм нижнего основания. Деталь не имеет переходов и выступов, что говорит о небольшой вероятности возникновения термических узлов и напряжений в отливке. Оловянная бронза имеет узкий интервал кристаллизации, значит, в системе питания отливки жидким сплавом необходима прибыль для уменьшения дефектов усадочного происхождения, что заложено нами при создании цифровых виртуальных трехмерных моделей отливки и системы питания в соответствии с принципом направленного затвердевания.

Нами были построены в CAD-системе «Компас» и Solidworks 2021 [2] виртуальные цифровые трехмерные модели отливки, кокиля и металлического составного стержня. Для проектирования и моделирования процессов затвердевания отливки «Втулка дробильная» связь моделирующей программы LVMFlow с геометрической CAD-системой осуществляли посредством конвертора, преобразующего файлы форматов STEP, DXF, STL, ASCII во внутренний формат моделирующей системы CVG. Для ориентации трехмерной модели в пространстве относительно поля тяжести отливки нами заданы углы Эйлера, а вращение отливки на виртуальном экране осуществляли при помощи устройства «мышь» с визуальным контролем, ее ориентацией и масштабированием. Ориентация отливки в трехмерной модели кокиля соответствовала ее положению при заливке, т.е. вертикальному. Для этого значение угла Эйлера изменилось на 45° , и полученная цифровая трехмерная модель переводилась в формат CVG для моделирования процесса затвердевания и выбора оптимальных размеров кокиля. На границе расчетной области задавались граничные условия: температура (излучение) кокиля порядка 300°C , плоскость симметрии кокиля вертикальная, граница расчетной области кокиль – воздух, температура воздуха внутри кокиля составила около 300°C , время прогрева кокиля задавали около

1800 с. Толщину стенок кокиля выбирали по рекомендациям из литературных источников [3] для оловянных бронз, обладающих повышенными механическими свойствами. Материал кокиля – серый чугун. Толщина стенок кокиля задавалась порядка 20 мм в соответствии с требованиями к материалу изготовления.

С учетом того, что отливка имеет вертикальную плоскость симметрии в кокиле, ее наружную поверхность представляли в двух изложницах с металлическим стержнем, т.е. полуформах кокиля, состыкованных на плоскости симметрии. Конфигурация наружных поверхностей системы питания отливки включает шейку прибыли, прибыль, стояк, выпор в соответствии с требованиями, описанными в литературных источниках. Все эти поверхности формировали трехмерными цифровыми моделями в двух полуформах кокиля с вертикальной плоскостью разъема, проходящими в сечении через середину выступа в цифровой модели отливки, стояка и выпора. Внутреннюю поверхность отливки с учетом конусности, прибыли, шейки и наружную поверхность прибыли в виде цифровой трехмерной модели оформляли одним составным металлическим стержнем, установленным по вертикальной оси симметрии втулки.

Трехмерную модель стержень рисовали с открытой полостью в верхней части отливки из-за конусности, для увеличения поверхности его теплоотдачи и уменьшения температуры разогрева стенок кокиля. По нашему мнению, таким образом создавались условия для получения плотного материала оливки «Втулка» в кокиле и обеспечивающие интерференцию фронтов затвердевания оловянной бронзы со стороны стенок чугунного кокиля и теплоемкого стержня на тепловой оси стенки отливки. Итак, для получения отливки вместе с элементами системы питания необходимо было пять формообразующих деталей, для которых были построены геометрические цифровые трехмерные модели. Размеры их определены отдельными расчетами для создания цифровых моделей на экране. Для конструирования кокиля проводилась разработка цифровых трехмерных моделей деталей механизмов и устройств, обеспечивающих надежность его работы в соответствии с принципом направленного затвердевания. Система раскрытия и закрытия кокиля нами задавалась ручной в соответствии с серийностью. Производство деталей «Втулка» единичное и составляет пять деталей под заказ. Стержень из кокиля также извлекался вручную с подрывом ломиком, что может приводить к нарушению геометрических размеров внутренней поверхности затвердевающей детали. Поэтому при возможности увеличения себестоимости отливки, подрыв стержня и раскрытие кокиля осуществлять при помощи гидроцилиндров.

Система «оснастка – система питания отливки» в проектировании и разработке цифровых моделей, моделирование процессов затвердевания отливки нами исследовалась с точки зрения улучшения качества отливок по плотности и долговечности службы кокиля. Для этого использованы возможности геометрических CAD-систем по определению объемных размеров модели отливки, кокиля и стержня [4]. Посредством моделирования выбирали оптимальный вариант для получения отливки с заданным заказчиком набором характеристик

для экспериментального апробирования полученного варианта и внесения корректировок в конструкцию кокиля, системы питания. Математическое моделирование процессов затвердевания оловянной бронзы проводили в модуле «Полная задача» в соответствии с заданными граничными условиями из банка данных программы. Моделирование проводили по распределению температур в теле отливки, усадочных дефектов и их распределению по оси симметрии, по наличию инородных включений в расплаве, наличию газовой микропористости, исходя из технологических свойств материала сплава, технологии плавки и заливки. Полученные результаты представлены графически в цифровом трехмерном и двумерном сечении изометрии, в том числе и прозрачной по различным критериям, таким, как жидкая фаза, усадка, критерий Нияма, температура. Виртуальное изображение процесса полного затвердевания отливки наглядно продемонстрировало правильность задания как оптимальных технологических параметров материала отливки и кокиля, так и соответствие геометрических параметров конструкции кокиля и стержня.

Наши предположения подтвердились отсутствием усадочных дефектов в самом теле отливки, выполнением условия направленного затвердевания, интенсивным охлаждением отливки в кокиле благодаря теплоемкому материалу металлического стержня посредством охладителя из меди. По нашему мнению, минимальные значения по микропористости в пределах от 0,75 и выше свидетельствуют о достаточно быстром охлаждении сплава, не успевающим при такой его скорости образовывать газовые пузырьки в виде водородной болезни, или процесс образования газовых пузырьков протекает в допустимых по шкале Нияма пределах. Быстрое затвердевание нижней части симметричной части отливки подтверждено расчетом температурно-временных полей, проведенным нами в модуле «Полная задача» и представленном графически на экране монитора. Установлено, что охлаждение нижней части отливки начинается в соответствии с принципом направленного затвердевания после заполнения жидким расплавом из печи кокиля по оси симметрии с доступностью питания вышележащих частей отливки, вследствие чего и получается плотная структура без микротрецин, рыхлот усадочного характера и газовой пористости [5]. Заполнение расплава ламинарное, вероятность замешивания в расплав шлаковых включений минимальная, что подтверждают графические данные, представленные на мониторе. Вероятность размыва стержня также минимальная. По нашему мнению, геометрическая конструкция представленного разработанного кокиля обеспечивает принцип направленного затвердевания отливки «Втулка» снизу вверх по направлению оси симметрии полости и ее конусности. Тем самым мы устранием в теле отливки возможные усадочные дефекты узко интервального бронзового сплава. Газовую водородную пористость снижаем за счет установки на дно кокиля охладителя из меди толщиной 20 мм по наружному диаметру нижней части кокиля. Таким образом, цели работы достигнуты и получены оптимальные технологические и геометрические параметры материала отливки и конструкции кокиля.

Литература

1. Баландин Г.Ф. Теория формирования отливки: Основы тепловой теории. Затвердение и охлаждение отливки Г.Ф. Баландин. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1 8. – 360 с.
2. SolidWorks 3D CAD. – URL: <https://www.solidworks.com/ru/product/solidworks-3d-cad> (дата обращения 17.03.2025).
3. Сушко Т.И. Междисциплинарное обучение курсантов физике посредством моделирования физических процессов затвердевания Т.И. Сушко, Р.Ш. Караев, Т.В. Пашнева Научный альманах. – 2019. – 6. – С. 128-134.
4. Галдин Н.М. Цветное литье : справочник Н.М. Галдин, Д.Ф. Чернега, Д.Ф. Иванчук и др. – М: Машиностроение, 1 8 . – 51 с.
5. Чичко А.Н. Алгоритмы оптимизации кокильной оснастки для САПР литьевых процессов А.Н. Чичко, Т.В. Матюшинец Литейное производство. – 2007. – 6. – С. 33-36.

OPTIMIZATION AND DESIGN OF A CHILL MOLD FOR CASTING “BUSHING” USING COMPUTER SIMULATION

T.I. Sushko¹, A.E. Kozhemyakin¹, T.V. Pashneva²

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

²Voronezh State Technical University

Abstract: to strengthen the country's defense capability, it is necessary to develop not only large-scale engineering enterprises, but also to provide assistance to small private foundries for the production of a wide range of products from various grades of alloys, including for the defense industry. The LVMFlow computer modeling system has long been used in our country to accelerate the optimization of casting, manufacturing technology and helps small business find ways to reduce production costs. This is possible not only for process engineers but also for students who have studied CAD programs in the modern labor market. Simulation of physical processes based on mathematical modeling methods remains the main technique for small and other enterprises to design components that meet customer requirements for the presence of specified operational and technical properties. The choice of casting method in this case was determined by the capabilities of the small enterprise.

Keywords: chill casting, casting manufacturing technology, computer modeling.

СОДЕРЖАНИЕ

Абдурагимов Г.Э.	
О существовании положительного решения краевой задачи для одного нелинейного дифференциального уравнения четвертого порядка с симметричными граничными условиями	3
Белов А.Н., Орлов Ю.Д.	
Волновая функция в задаче внутреннего вращения в базисе плоских волн и функций Матье	5
Буховец А.Г., Семин Е.А.	
Модели фазовых состояний фрактальных структур	7
Бывальцев А.Е., Пашали Д.Ю., Афанасьев Ю.В.	
Влияние сверхмалых магнитных аномалий на полёт беспилотного летательного аппарата	11
Седов А.В., Вербин Н.В.	
Разработка алгоритма и модели прогнозирования остаточного ресурса изоляции асинхронного двигателя	18
Майков Н.Д., Глотов В.В., Ромашенко М.А.	
Метод нелинейных наименьших квадратов для решения задач обеспечения электромагнитной совместимости радиоэлектронных средств	22
Григорьев Е.Г., Гольцов В.Ю., Осинцев А.В., Стрижаков Е.Л., Нескоромный С.В., Чумаков А.Н., Кузнецик О.О.	
Моделирование электротепловых процессов высоковольтной консолидации порошков	27
Седов А.В., Жариков К.О.	
Анализ математических моделей сжатия сигналов	33
Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В., Соловьев М.В., Васильев В.П., Зайцев А.А., Шиховцев А.В., Добровольский Ю.А.	
Квантово-химическое моделирование строения и стабильности бикатионного комплекса $ZnMg(BH_4)_4 \cdot 4NH_3$	38
Зюбина Т.С., Зюбин А.С., Укше А.Е., Глухов А.А., Добровольский Ю.А.	
Удаление атомов серебра с окисленной поверхности $Ag(111)$. Квантово-химическое моделирование	45
Зюзин Д.И., Маркидонов А.В.	
Исследование зависимости полной энергии примесного атома водорода с помощью компьютерного моделирования	51
Камалова Н.С., Матвеев Н.Н., Лисицын В.И., Евсикова Н.Ю.	
Оценка поляризованности полимеров при кристаллизации в неоднородном температурном поле	57
Котомкин А.В., Орлов Ю.Д.	
Энталпии образования разветвленных фторалканов	63

Мамедова Е.В.	
Исследование переходов $\gamma^*\gamma^*\rightarrow\eta$, $\gamma^*\gamma^*\rightarrow\eta'$ в обычной схеме смешивания.....	67
Моисеев Д.А.	
О фундаментальном решении сингулярного оператора теплопроводности.....	73
Перова И.В.	
Аппроксимация дифференциальных операторов в задачах колебаний упругих континуумов с пространственной переменной на граfe.....	77
Панюшкин А.Н., Бирюкова И.П., Панюшкин Н.Н.	
Моделирование дополнительной радиационной защиты от электронного и протонного излучений.....	82
Парамонов А.А., Калач А.В.	
Применение пространственных преобразований для решения задачи почти периодического анализа изображений тропических циклонов.....	88
Седов А.В., Пушкарева О.О.	
Модель цифрового двойника распознавания дефектов в системах неразрушающей диагностики.....	92
Рязанцев Т.Р.	
Прогнозирование ценности нефтегазовых месторождений на основе природных показателей.....	96
Батаронов И.Л., Шунин Г.Е., Кострюков С.А., Пешков В.В., Шунина В.А.	
Моделирование влияния эллиптичности формы цилиндрического резонатора волнового твердотельного гироскопа на спектр собственных частот.....	107
Дорохова О.А., Батаронов И.Л.	
Моделирование параметров теплообмена термоэлектрического модуля с турбулентным потоком на основе асимптотического распределения.....	112
Батаронов И.Л., Надеина Т.А., Надеин Р.О.	
Моделирование электронно-пластического эффекта в застопоренном дислокационном скоплении.....	126
Пантелейев И.Н., Поляков К.С.	
Оценка риска при исследовании сложных технических систем.....	133
Семилетов И.М.	
Моделирование электронного облака в молекуле водорода с учётом колебаний.....	138
Смирнов Ю.Г.	
О применении нейросетей для гамма-спектрометрического анализа проб при радиоэкологических исследованиях.....	144
Тараканов А.Ф.	
Задача оптимального управления динамической системой с ограничениями на управление и фазовую переменную и ее численное решение.....	148

Трофимов Р.Р., Конобеева Н.Н.	
Моделирование волн электронной плотности в шестиугольных фрактальных решетках	155
Мигаль Л.В., Бондарев В.Г.	
Модель структуры многоэлектронного атома	161
Ускова Н.Б., Шелковой А.Н.	
Преобразование подобия дифференциальных операторов второго порядка с возмущением оператором ранга один	167
Хусаинова Г.Я.	
Очистка пористой среды растворителями	172
Чувашов Н.А., Кунцев В.Е., Кожевникова П.В.	
Прогнозирование показателей разработки пласта при помощи нейронной сети прямого распространения	175
Глущенко С.В.	
О дискретном конфликте в системе	180
Дёмина М.Ю., Богданов Н.П.	
Расчетно-экспериментальный метод определения продольной деформации гибкого стержня из никелида титана	183
Сушко Т.И., Кожемякин А.Е., Ильинский С.В., Пашнева Т.В.	
Моделирование процесса затвердевания детали ответственного назначения	188
Кожемякин А.Е., Сушко Т.И., Пашнева Т.В.	
Создание трехмерных моделей воздушного старта и оптимизация полета БПЛА вертикального взлета с ограниченных площадок	193
Сушко Т.И., Кожемякин А.Е., Пашнева Т.В.	
Оптимизация и конструирование кокиля для отливки «втулка» посредством компьютерного моделирования	199

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XXVI Международного семинара

(г. Воронеж, 30 ноября 2024 г.)

Издаётся в авторской редакции

Подписано к изданию 03.12.2025.

Объём данных 9,2 Мб.

Тираж 10 экз.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»
394006 Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84