

ISSN 2308-8761



ученые записки

Забайкальского
государственного
университета

2013/3(50)

серия
Физика, математика,
техника, технология

Учёные

ЗАПИСКИ

Забайкальского государственного университета

Серия

Физика, математика, техника, технология

2013/3(50)

Научный журнал

Основан в 1957 г.

Выходит шесть раз в год

Учредитель:

ФГБОУ ВПО «Забайкальский
государственный университет»

Журнал зарегистрирован

Федеральной службой по надзору
в сфере связи, информационных
технологий и массовых коммуникаций
(Роскомнадзор)

Свидетельство регистрации

ПИ № ФС77-54257 от 24.05.2013

Журнал входит

в Перечень ведущих рецензируемых
научных журналов и изданий,
в которых должны быть опубликованы
основные научные результаты
диссертаций на соискание учёных
степеней доктора и кандидата наук

Авторы несут полную ответственность
за подбор фактов, содержащихся в
статьях; высказываемые ими взгляды
могут не отражать точку зрения
редакции

Перепечатка материалов журнала
допускается только по согласованию
с редакцией

Адрес редакции:

672039, г. Чита,
ул. Александрово-Заводская, 30
Телефон: 8(3022) 35-24-79,
факс: 8(3022) 26-73-17.
E-mail: gumvector@zabspu.ru

Сайт журнала в Интернете

<http://www.zabvector.ru>

Подписной индекс журнала
в ОАО «Роспечать» **33190**

Электронная версия журнала
размещена на платформе Российской
универсальной научной электронной
библиотеки – www.elibrary.ru

© Забайкальский государственный
университет, 2013

Редакционный совет:

П. С. Атаманчук, д-р пед. наук, проф., акад. АН ВО Украины, Каменец-Подольский национальный университет им. Ивана Огиенка (Каменец-Подольский, Украина); **Б. В. Базárov**, д-р ист. наук, проф., член-кор. Российской академии наук, директор Института монголоведения, буддологии и тибетологии СО РАН, председатель президиума Бурятского научного центра СО РАН (Улан-Удэ, Россия); **Андре Буржо**, д-р социал. наук, акад., Национальный центр научных исследований Франции (Париж, Франция); **М. И. Гомбоева**, д-р культурологии, проф., Забайкальский государственный университет (Чита, Россия); **В. П. Горлачёв**, д-р пед. наук, проф., Забайкальский государственный университет (Чита, Россия); **Л. Г. Гуслякова**, д-р социол. наук, проф., Горно-Алтайский государственный университет (Горно-Алтайск, Россия); **Б. Жадамба**, акад., Монгольский государственный университет образования (Улан-Батор, Монголия); **В. К. Зубарева**, д-р филол. наук, проф., Пенсильванский университет (Филадельфия, США); **В. А. Ильин**, д-р физ.-матем. наук, проф. (Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва); **М. В. Константинов**, д-р ист. наук, проф., Забайкальский государственный университет (Чита, Россия); **Кэйдзи Идэ**, заместитель главы миссии, министр Посольства Японии в Российской Федерации (Япония); **В. В. Мазалов**, д-р физ.-матем. наук, проф., Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН (Петрозаводск, Россия); **Г. Ц. Пюрбеев**, д-р филол. наук, проф., акад. РАЕН, Институт языкознания Российской академии наук (Москва, Россия); **Ли Чуаньсюн**, проф. (Харбин, КНР); **Чжэнь Шунь**, д-р филол. наук, проф. (Харбин, КНР); **В. Д. Шадриков**, д-р психол. наук, проф., акад. Российской академии образования, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (Москва, Россия)

Редакционная коллегия серии:

С. Е. Холодовский (редактор серии), д-р физ.-мат. наук, проф. (Чита, Россия); **В. Е. Архинчеев**, д-р физ.-мат. наук, проф. (Улан-Удэ, Россия); **С. Ф. Забелин**, д-р техн. наук, проф. (Чита, Россия)

Главный редактор объединённой редакции:

И. В. Ерофеева, д-р филол. наук, доцент,
e-mail: irina-jour@yandex.ru

Ответственный секретарь объединённой редакции:

Е. В. Седина, канд. культурологии, e-mail: elvsed@mail.ru

Uchenye Zapiski

of Zabaikalsky State University

Series

Physics, Mathematics, Engineering, Technology
2013/3(50)

Scientific Journal

Founded in 1957

Bimonthly

Founder:

FSBEI HPE "Zabaikalsky State
University "

The journal is registered

by the Federal Supervision Service in the
Field of Communication, Information
Technologies and Mass Communications
(Roskomnadzor)

Registration certificate

ПИ № ФС77-54257 от 24.05.2013

The journal

is in the List of the leading refereed
scientific journals and editions which
publish the main results of dissertations
for academic degrees of doctors and
candidates of sciences

The authors are fully responsible for the
selection and presentation of the facts
contained in their articles; the views
expressed by them do not necessarily
reflect the views of the editorial board

Reproduction of any materials from the
journal is allowed only in coordination
with the editorial board

The Manuscripts submitted to the
journal are not returned

Address:

672030, Chita,
30 Aleksadro-Zavodskaya St.
Phone: 8(3022) 35-24-79,
Fax: 8(3022) 26-73-17.
E-mail: gumvector@zabspu.ru

Journal web site:

<http://www.zabvector.ru>

Subscription index of the journal
in OAO "Rospechat": **33190**

The electronic version of the journal is
placed on the platform of the Russian
Universal Scientific Electronic Library:
www.elibrary.ru

© Zabaikalsky State University, 2013

Editorial Board:

P. S. Atamanchuk, Doctor of Pedagogy, Professor, Academician of the
Academy of Sciences and Higher Education of Ukraine, Ivan Ogienko
Kamenets-Podolsky National University (Kamenets-Podolsky, Ukraine);
B. V. Bazarov, Doctor of History, Professor, Corresponding Member of
the Russian Academy of Sciences, Director of the Institute of Mongolian,
Buddhist and Tibetan Studies, Siberian Branch of the Russian Academy
of Sciences, Chairman of the Presidium of the Buryat Scientific Center,
Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (Ulan-Ude, Russia);
Andre Bourget, Doctor of Sociology, Academician, French National
Center for Scientific Research (Paris, France); **M. I. Gomboeva**,
Doctor of Culturology, Professor, Zabaikalsky State University (Chita,
Russia); **V. P. Gorlachev**, Doctor of Pedagogy, Professor, Zabaikalsky
State University (Chita, Russia); **L. G. Guslyakova**, Doctor of
Sociology, Professor, Gorno-Altaysk State University (Gorno-Altaysk,
Russia); **B. Zhadambaa**, Academician, Mongolian State University
of Education (Ulan Bator, Mongolia); **V. K. Zubareva**, Doctor of
Philology, Professor, University of Pennsylvania (Philadelphia, PA, USA);
V. A. Il'in, Doctor of Physics and Mathematics, Professor (Lomonosov
Moscow State University, Moscow, Russia); **M. V. Konstantinov**,
Doctor of History, Professor, Zabaikalsky State University (Chita,
Russia); **Keiji Ide**, Deputy Head of Mission, Minister of the Embassy
of Japan in the Russian Federation (Japan); **V. V. Mazalov**,
Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Institute of Applied
Mathematical Research, Karelian Scientific Center, Russian Academy of
Sciences (Petrozavodsk, Russia); **G. T. Pyurbeev**, Doctor of Philology,
Professor, Academician of the Russian Academy of Natural Sciences,
Institute of Linguistics, Russian Academy of Sciences (Moscow, Russia);
V. D. Shadrnikov, Doctor of Psychology, Professor, Academician of the
Russian Academy of Education, National Research University "Higher
School of Economics" (Moscow, Russia); **Li Chuangxiang**, Professor
(Harbin, People's Republic of China); **Zhen Shupu**, Doctor of Philology,
Professor (Harbin, People's Republic of China)

Series Editorial Committee:

S. E. Kholodovskiy (*Series Editor*), Doctor of Physics and
Mathematics, Professor (Chita, Russia); **V. E. Arkhincheev**, Doctor of
Physics and Mathematics, Professor (Ulan-Ude, Russia); **S. F. Zabelin**,
Doctor of Engineering Science, Professor (Chita, Russia)

Editor-in-chief of the Unified Editorial Board:

I. V. Erofeeva, Doctor of Philology, Associate Professor,
e-mail: irina-jour@mail.ru

Executive Secretary of the Unified Editorial Board:

E. V. Sedina, Candidate of Culturology, elvsed@mail.ru

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Березин С. Я., Романова Л. С.</i> Асимметрия выдавливаемых профилей при образовании гладко-резьбовых соединений	7
<i>Воронин М. С., Мерзиевский Л. А.</i> Моделирование ударно-волнового деформирования политетрафторэтилена	14
<i>Галахов А. В., Зеленский В. А., Коваленко Л. В., Забелин С. Ф., Алымов М. И.</i> Жидкофазный синтез оксинитрида алюминия	22
<i>Ефимова И. А.</i> О решении первой краевой задачи на плоскости для уравнения Лапласа в области, ограниченной параболой	29
<i>Забелин А. А.</i> Об одной динамической модели арбитража	32
<i>Зеленский В. А., Трегубова И. В., Анжудинов А. Б., Забелин С. Ф.</i> Получение пористого материала из порошков серебра	35
<i>Калашиников И. Е., Ковалевский В. В., Чернышова Т. А., Болотова Л. К.</i> Композиционные материалы, упрочнённые модифицированными шунгитовыми породами и керамическими микрочастицами	43
<i>Корчагина А. Н., Мерзиевский Л. А.</i> Численное моделирование диффузионных процессов в фрактальных средах	53
<i>Лукьянов П. Ю., Гурулев А. А., Орлов А. О., Цыренжапов С. В.</i> Измерительные приборы для исследования параметров воды меромиктических водоемов	60
<i>Малакеева М. Ю., Архинчеев В. Е.</i> Протекание холловского тока и вычисление эффективной проводимости многофазных сред в режиме КЭХ	65
<i>Менчер А. Э.</i> Комбинированная арбитражная процедура с квадратичной функцией выигрыша	70
<i>Мунгуншагай М., Мянганбатор Т., Ням-Очир Л., Энхтур Л., Архинчеев В. Е., Галбадрах Р.</i> Исследование и анализ основных источников загрязнения Улан-Батора современными физическими методами	76
<i>Орлов А. О., Бордонский Г. С.</i> Свойства переохлажденной воды при температуре ниже -40°	83
<i>Потехо А. О.</i> Об эффективном решении смешанных краевых задач на плоскости для уравнения Лапласа	89
<i>Сидоров А. А., Старченко Е. В., Матюта А. А., Кульченков Е. А.,</i> Зависимость радиусов атомов в бинарных ионных кристаллах с кубической решёткой от заряда ядра	93
<i>Сидоров А. А., Холодовский В. Е., Кульченков Е. А.</i> Аппроксимация атомно-рассеивающего фактора в кристаллической решётке на основе электромагнитной теории рассеяния	99
<i>Токарева Ю. С., Мазалов В. В.</i> Об одной задаче наилучшего выбора с правилом консенсуса	105
<i>Толпаев В. А., Ахмедов К. С., Гоголева С. А.</i> Исследование эксплуатационных режимов подземных хранилищ газа методом схмотехнического моделирования	110
<i>Толпаев В. А., Евенко И. А.</i> Математические модели плоскорадиальной фильтрации газа по закону Форхгеймера к вертикальной скважине	117
<i>Холодовский В. Е., Краюшкина Е. Ю.</i> Дисперсионные соотношения для кристаллов твердых растворов со структурой CsCl	121
<i>Холодовский С. Е.</i> Решение задачи о движении неограниченной разрывной струны (стержня) с упругим контактом	132
<i>Холодовский С. Е., Потехо А. О.</i> Решение краевой задачи о движении полуограниченной струны с граничным условием третьего рода	140
<i>Щегрина К. А., Петров О. И., Крылов С. Д.</i> Особенности микроволновых свойств льда с солевыми включениями в диапазоне температур от -20° С до -190° С	146
<i>Яковлева Г. М.</i> О решении краевых задач для уравнения Лапласа на кусочно-однородной плоскости с двумя параллельными трещинами	151

Даты. События. Люди

<i>Холодовский С. Е.</i> К 110-летнему юбилею Андрея Николаевича Колмогорова.....	155
<i>Хайруллин К. Ш.</i> Фридман Александр Александрович: к 125-летию со дня рождения.....	157
<i>Правила для авторов</i>	159

CONTENTS

<i>Berezin S. Ya., Romanova L. S.</i> Asymmetry of Structural Extrusion When Forming Smooth-Threaded Connections	7
<i>Voronin M. S., Merzhievskiy L. A.</i> Modeling of Shock Deformed Polytetrafluoroethylene	14
<i>Galakhov A. V., Zelenskiy V. A., Kovalenko L. V., Zabelin S. F., Alymov M. I.</i> Liquid-Phase Synthesis of Aluminum Oxynitride	23
<i>Efimova I. A.</i> On Solution of the First Boundary Value Problem on a Plane for Laplace's Equation in the Area Bounded by Parabola	29
<i>Zabelin A. A.</i> On a Dynamic Arbitration Model	32
<i>Zelenskiy V. A., Tregubova I. V., Ankudinov A. B., Zabelin S. F.</i> Production of Porous Material from Silver Powders	36
<i>Kalashnikov I. E, Kovalevskiy V. V., Chernyshova T. A., Bolotova L. K.</i> Composite Materials Reinforced with Modified Schungite Rocks and Ceramic Microparticles	43
<i>Korchagina A. N., Merzhievskiy L. A.</i> Numerical Modeling of Diffusive Processes in Fractal Media	53
<i>Luk'yanov P. Yu., Gurulev A. A., Orlov A. O., Tsyrenzhapov S. V.</i> Measuring Devices for Water Parameters Investigation of Meromictic Water Bodies	60
<i>Malakeeva M. Yu., Arkhincheev V. E.</i> Percolation of Hall Current and Calculation of Effective Conductivity of Multiphase Media in the Quantum Hall Effect Regime	65
<i>Mencher A. E.</i> Combined Arbitration Procedure with Quadratic Payoff Function	70
<i>Mungunshagai M., Myanganbaatar T., Nyam-Ochir L., Enkhtur L., Arkhincheev V. E., Galbadrakh R.</i> Investigation and Analysis of the Main Sources of Ulan Bator Pollution by Modern Physical Methods	76
<i>Orlov A. O., Bordonskiy G. S.</i> Properties of Supercooled Water at a Temperature Below $-40^{\circ}C$	83
<i>Potekho A. O.</i> On Effective Solution of Mixed Boundary Value Problems on the Plane for Laplace's Equation	89
<i>Sidorov A. A., Starchenko E. V., Matyuta A. A., Kul'chenkov E. A.</i> The Dependence of the Radii of the Atoms in Binary Ionic Crystals with Cubic Lattice on the Nuclear Charge	93
<i>Sidorov A. A., Kholodovskiy V. E., Kul'chenkov E. A.</i> Approximation of Atomic Scattering Factor in a Crystal Lattice Based on Electromagnetic Scattering Theory	99
<i>Tokareva Yu. S., Mazalov V. V.</i> On a Problem of the Best Choice with Consensus Rule	105
<i>Tolpaev V. A., Akhmedov K. S., Gogoleva S. A.</i> Research of Operating Conditions of Underground Gas Storage by a Circuit Simulation Method	110
<i>Tolpaev V. A., Evenko I. A.</i> Mathematical Models of Flat-Radial Gas Filtration by the Forchheimer Law to a Vertical Well	117
<i>Kholodovskiy V. E., Krayushkina E. Yu</i> Dispersion Relations for Solid Solution Crystals with CsCl Structure	121
<i>Kholodovskiy S. E.</i> Solution of the Problem of the Motion of Unbounded Breaking String (a Rod) with an Elastic Contact	132
<i>Kholodovskiy S. E., Potekho A. O.</i> Solution of a Boundary Value Problem on Semi-Bounded String Motion with the Boundary Condition of the Third Kind	140
<i>Shchegrina K. A., Petrov O. I., Krylov S. D.</i> Features of Microwave Properties of Ice with Salt Inclusions in the Temperature Range from $-20^{\circ}C$ to $-190^{\circ}C$	146
<i>Yakovleva G. M.</i> On Solution of Boundary-Value Problems for Laplace's Equation on a Piecewise-Homogeneous Plane with Two Parallel Cracks	151

Dates. Events. People

Kholodovskiy S. E. On the 110th Anniversary of the Birth of Andrey Nikolaevich Kolmogorov .. 155
Khairullin K. Sh. On the 125th Anniversary of the Birth of Aleksandr Aleksandrovich Friedman. 157
Rules for Authors..... 159

УДК 621.88.083.8
ББК34.441

Сергей Яковлевич Березин
доктор технических наук, профессор,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: berlog_berezin2011@mail.ru
Людмила Сергеевна Романова
канд. техн. наук, доцент
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: Kurlser@yandex.ru

Асимметрия выдавливаемых профилей при образовании гладко-резьбовых соединений

Рассмотрены вопросы формирования внутренних резьбовых профилей при ввинчивании шпилек в гладкие отверстия. Установлены причины появления значительной асимметрии профилей, связанные с геометрией деформирующих участков заходного витка шпилек, образованного торцовой фаской. Серией моделирующих экспериментов установлен характер течения металла при деформации и влияние геометрии на степень асимметричности профилей внутренней резьбы.

Ключевые слова: резьбовыдавливание, гладко-резьбовые соединения, резьбовой профиль, асимметрия, резьбовые шпильки, деформирующий виток, напряжения, внутренняя резьба, микротвердость, изосклеры, кратер.

Sergey Yakovlevich Berezin
Doctor of Engineering Science, Professor,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: berlog_berezin2011@mail.ru
Lyudmila Sergeevna Romanova
Candidate of Engineering Science, Associate Professor
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: Kurlser@yandex.ru

Asymmetry of Structural Extrusion When Forming Smooth-Threaded Connections

The paper considers the issues of internal thread profile formation when screwing studs in smooth holes. The reasons of emergence of considerable asymmetry of the profiles connected with geometry of deforming sites of a beginning spire of the studs formed by a butt facet are determined. A series of modeling experiments established a character of a metal current under deformation and influence of geometry on asymmetry degree of internal thread profiles.

Keywords: tapping thread, smooth-threaded connections, thread profile, asymmetry, thread studs, deformation beginning spire, stresses, internal thread, microhardness, isoskleres, crater.

Первые сведения о резьбовыдавливающих шпильках стали появляться в 60–70 годах прошлого столетия в Германии и в СССР. Одно из первых сообщений было сделано А. Гётлингом в 1968 г. [1]. Он описал возможности завинчивания шпилек диаметром М12 в гладкие отверстия корпусных деталей из алюминиево-медного сплава AlCuSi. Впоследствии Хр. Ингером были также представлены результаты экспериментов по ввинчиванию шпилек М10 в гладкие отверстия алюминиевых корпусов [2].

Советская промышленность и наука очень быстро отреагировали на данную информацию. Тремя годами позже были опубликованы данные об опыте внедрения такой технологии на Уфимском моторостроительном заводе при сборке блоков двигателя автомобиля «Москвич-412» [3]. Применялись шпильки М6...М12 из стали 38ХА. Параллельно эта технология начала внедряться на производственном объединении «Пермские моторы». В Перми над данной проблемой работали

И. Ф. Молохов, В. А. Оконешников [4]. Научное обоснование метода в Башкирии разрабатывалось Н. С. Буткиным, В. С. Гепштейном, Н. Н. Красильниковым на базе Уфимского авиационного института под руководством к. т. н. С. Н. Захарова. В дальнейшем опыт сборки таких соединений с успехом применяли на Алтайском моторном заводе, Днепропетровском агрегатном, Львовском автобусном, ряде мотоциклетных заводов, Читинском машиностроительном и других предприятиях.

В 70-е годы соединения, образованные путем ввинчивания шпилек в гладкие отверстия корпусов из алюминиевых, магниевых и цинковых сплавов получили название «гладко-резьбовых соединений». Данный термин долго использовался практически в течение 20 последующих лет, однако не получил законной силы, очевидно, потому, что он был технически некорректен. Поэтому в государственных и отраслевых стандартах на шпильки для этой технологии их стали называть «шпильки для деталей с гладкими отверстиями», а термин «гладко-резьбовые соединения» стал своего рода техническим жаргонизмом, который иногда встречается даже в современных источниках [5].

При образовании такого соединения резьба в гнезде выдавливается заходным витком шпилек. По мере завинчивания на требуемую глубину образуется тугое резьбовое соединение с натягом по среднему диаметру. Экономия от применения гладко-резьбовых соединений складывалась от устранения затрат на операцию предварительного резьбонарезания, экономии режущего, мерительного инструмента и т. п. Действительно, операция была достаточно простой и не требовала тщательной подготовки отверстий под шпильки. Их можно было получать, как говорили «из-под сверла», т. к. вполне подходили допуски по 9–12 квалитетам.

Диапазон материалов корпусных деталей, в отверстия которых завинчиваются шпильки, достаточно многообразен. Все определяет класс прочности материала самой шпильки, точнее соотношение пределов прочности материалов резьбовой пары. Наиболее целесообразно соотношение пределов прочности материалов корпуса и шпильки, установленное Н. С. Буткиным, при котором предел прочности шпильки должен превышать аналогичный параметр корпуса в 3,33 раза [6]. Это соответствует возможности ввинчивания шпилек в гнезда корпусов из алюминиевых, магниевых и цинковых сплавов: АЛ4, АЛ5, АЛ9, АК4, МЛ5, МЛ7, ЦАМ 4-1, ЦАМ 4-3, наиболее распространенные в агрегатостроении, приборо-, моторостроении и других областях производства машин. При использовании упрочненных шпилек возможно образование таких соединений в малоуглеродистых сталях и серых чугунах.

При исследовании процессов резьбообразования в гладко-резьбовых соединениях Н. С. Буткиным и В. М. Лабецким был установлен факт образования асимметрии формируемого профиля. Причиной асимметрии являлась своеобразная схема внедрения деформирующего витка шпилек, особенно той его части, которая образована плоскостью торцевой фаски. Металлографические исследования авторов позволили установить картины течения металла при заполнении впадин охватываемой резьбы. Конфигурация вершин внутренней резьбы зависит от угла фаски заходного витка и чем он более пологий, тем равномернее происходит формирование вершины, и тем симметричнее располагается ее кратер (см. рис. 1).

Однако, несмотря на установленные причины, в печати еще появляются работы, посвященные данной проблеме [5; 7], поэтому для разъяснения сути процессов, происходящих при работе деформирующего витка, авторы представляют результаты собственных исследований, произведенных на специальной установке, моделирующей процесс в укрупненных формах, а также металлографических исследований и измерений микротвердости.

Установка представляет собой специальный пресс в виде крупной резьбовой пары М50х18,0, включающей гайку-матрицу и винт-пуансон (рис. 2). Матрица 1, в которую завинчивается пуансон 2, установлена на основании 3 и зафиксирована сваркой. В матрице сделан секторный вырез, на левой стенке которого обработан фрезой специальный паз 4 для закрепления в нем винтами свинцовых образцов. Винты завинчиваются в отверстия 5 паза матрицы. Свинцовые образцы, приведенные на рис. 3, рис. 4 применялись сдвоенные и одинарные. Они отливались в специальной форме, затем обрабатывались, и далее на их плоскости наносилась координатная сетка для установления траектории течения металла.

На рис. 5 приведена картина искривления линий координатной сетки свинцовых образцов.

Поскольку геометрия деформирующего витка сформирована торцевой фаской шпильки, то линия его главного ребра не следует по общей винтовой линии нарезки и деформирующий виток внедряется не в радиальном направлении, как у раскатника, а работает как плуг, толкая волну металла перед собой (рис. 2в). По мере завинчивания главное ребро теряет остроту, завальцовывается и первый виток уменьшается по высоте. Образуется небольшая конусность по наружному диамет-

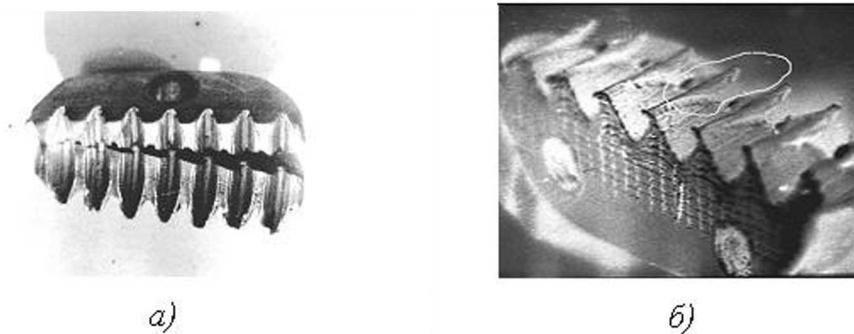


Рис. 3. Свинцовые образцы: а) двойные свинцовые образцы; б) вид координатной сетки; контуром обведена волна выдавливаемого металла

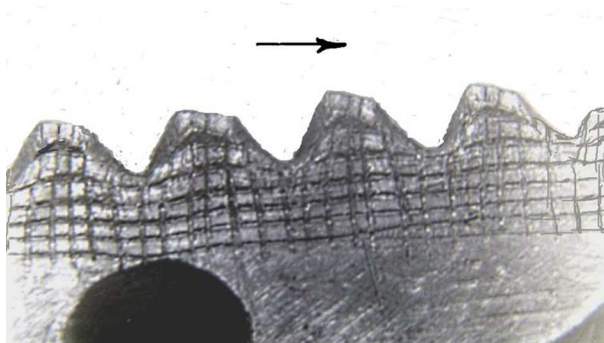


Рис. 4. Деформация координатной сетки при вдавливании деформирующего витка (стрелка показывает направление ввинчивания. Видны уширения линий координатной сетки в зоне растягивающих напряжений)

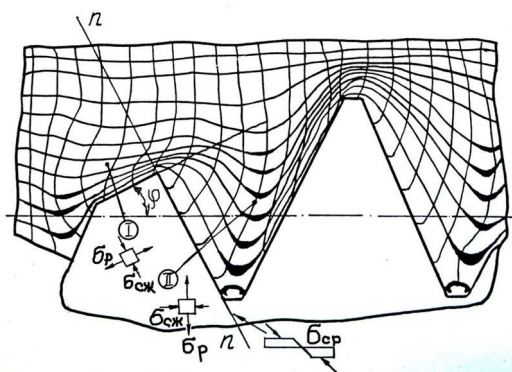


Рис. 5. Картина искривлений координатной сетки свинцовых образцов после внедрения задней части резьбового пуансона (φ – угол торцевой фаски и, соответственно, угол наклона деформирующей грани задней части витка)

бых искривлений прилегающих линий, что свидетельствует о действии на этом участке срезающих напряжений от косо́го резания. Эти напряжения кратно меньше напряжений, действующих в I области.

По мере внедрения заднего витка с углом фаски от 45° и выше, формирование внутреннего профиля проходит несколько этапов. В начале внедрения деформирующего ребра с левой стороны грани образуется небольшой выступ (рис. 6а), который растет по высоте, образуя в сечении треугольник с углом нижней стороны (рис. 6б). На следующем обороте шпильки задний виток вмывает часть выступа в форме треугольника abc и вместе с ним формирует следующий выступ (рис. 6в). При крутом угле фаски выступ не имеет четкой треугольной геометрии, а напоминает волну,

которую катит перед собой заходной виток (рис. 6в), образуя левую сторону кратера, показанного на микрошлифах левого рис. 1 и рис. 5а. Затем эта сторона (волна) завивается в узел, который далее может уплотняться и калиброваться площадкой внутреннего диаметра резьбы шпильки (рис. 7б, в).

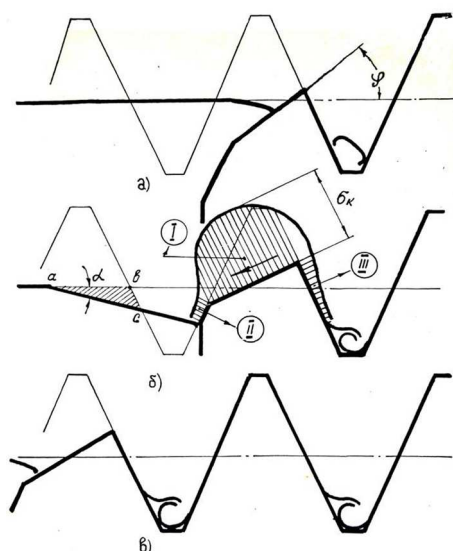


Рис. 6. Этапы внедрения деформирующего витка:
 а) начало внедрения; б) образование наплыва (волны); в) внедрение на следующем обороте

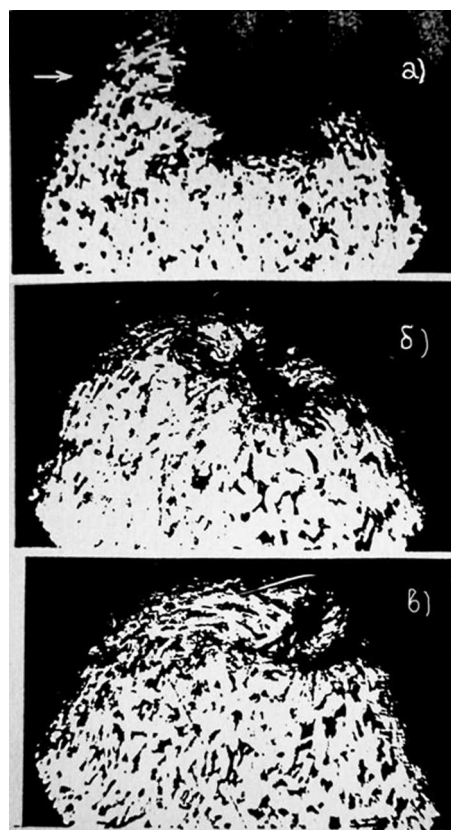


Рис. 7. Фазы формирования асимметричного профиля в стали 20 при угле фаски 45°:
 а) образование кратера;
 б) смыкание стенок кратера и завивка вершины;
 в) уплотнение вершины

На рис. 7 представлены этапы формирования вершин внутреннего профиля резьбы М14х1,5, полученных ввинчиванием закаленных шпилек из стали 38ХА в гладком отверстии образца из стали 20 с небольшой конусностью. Конусность позволила выявить витки, соответствующие указанным на рис. 7 этапам формирования вершины.

Для уменьшения асимметрии и усилий, необходимых для формирования резьбы, некоторые авторы предлагали оптимизировать форму заходного витка шпилек путем шлифовки и выполнять его островершинным. Данный подход достаточно проблематичен, поскольку любая дополнительная обработка стержней или их резьбы ведет к удорожанию производства крепежных деталей и экономически нецелесообразна. Более приемлемым может быть вариант этапной прокатки стержней шпилек на плоскокатных станках. На первом этапе прокатываются фаски, а на втором резьба.

Образование асимметрии проявляется не только в форме витка, но и в степени упрочнения его боковых сторон. На рис. 8, рис. 9 приведены результаты измерения микротвердости материала профиля резьбы из сплава АЛ-10В, полученного путем завинчивания деформирующих шпилек с ультразвуком.

Наибольшую степень упрочнения получает материал в области вершины заходного витка и верхней части его деформирующей грани, т. е. в сечениях I-I и IV-IV.

В меньшей степени упрочняется материал в нижней части формирования наплыва (сечение III-III), а в еще более меньшей тыльная сторона витка (сечение II-II). Как видим, также изосклеры имеют заметный наклон в сторону областей, сформированных деформирующей частью витка.

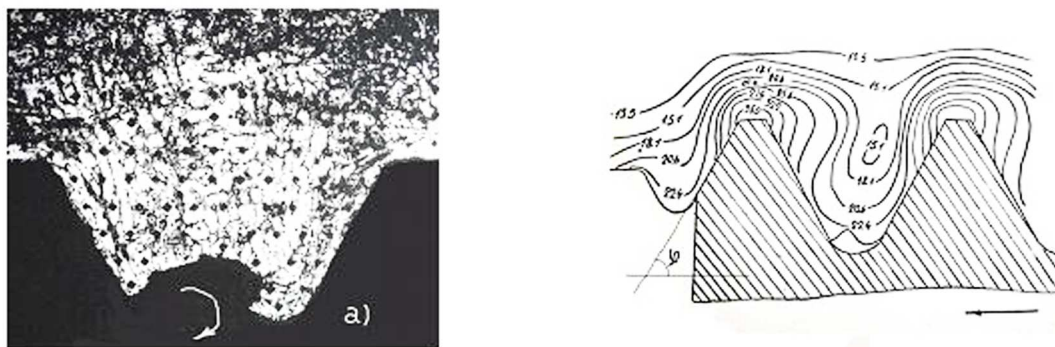


Рис. 8. Результаты замеров микротвердости: а) профиль витка с точками замеров; б) изосклеры распределения микротвердости по профилю

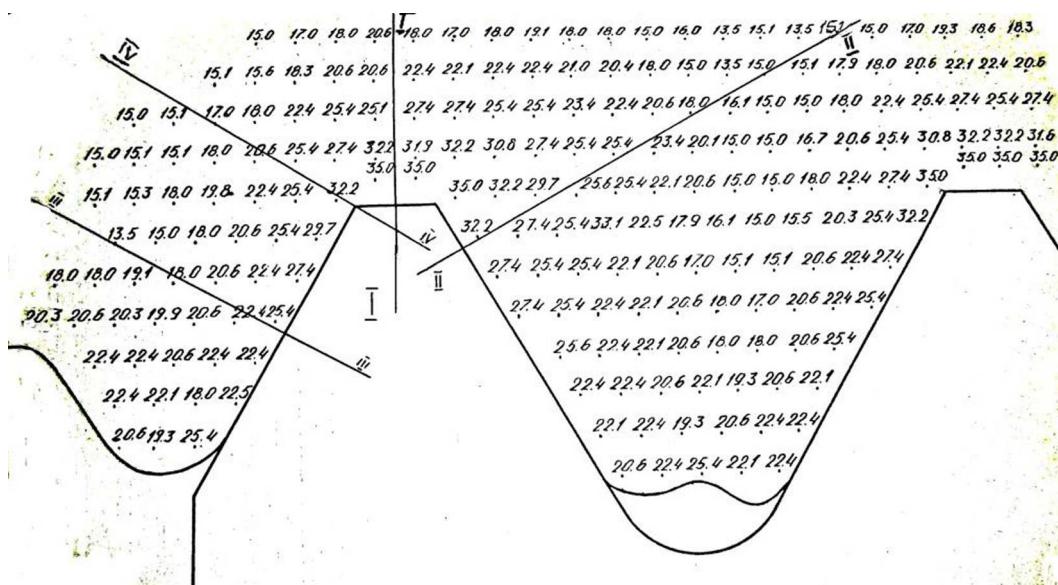


Рис. 9. Плотная сетка замеров и их характерные направления

Упрочнение резьбового профиля положительно сказывается на эксплуатационных характеристиках соединений: статической прочности, стопорящих свойствах, виброустойчивости. Наличие кратеров и асимметрии тоже не снижает этих показателей, однако изучение этих явлений необходимо для понимания сути происходящего процесса деформирования и построения адекватных математических моделей процесса формообразования, максимально приближенных к реальным условиям. Их изучение полезно также и для разработки технологических рекомендаций для производства крепежных деталей, выполняющих резьбообразовательную функцию, ориентированных на получение внутренних резьб высокого качества и высоких эксплуатационных свойств соединений.

Список литературы

1. Göthling A. Toleranzen und Festigkeit geformt Gewinde // Maschinenbau. 1968. 17. № 4. P. 171–174.
2. Ингер Х. Посадка резьбовых шпилек в цилиндрические отверстия деталей с самонакатыванием резьбы // Технология и оборудование механосборочного производства: Экспрес-информация. М.: ВИНТИ, 1975. № 26. С. 35–28.
3. Красильников Н. И., Иосилевич Г. Б., Гешштейн В. С., Буткин Н. С. Посадка шпилек в алюминиевые картеры двигателей путем самонакатывания резьбы // Автомобильная промышленность. 1971. № 4. С. 36–37.

4. Молохов И. Ф., Оконешников В.А. Ввертывание шпилек в гладкие цилиндрические отверстия // Вестник машиностроения. 1975. № 2. С. 48–50.
5. Данилова Л. Н. Влияние кинематики процесса свинчивания на качество гладко-резьбовых соединений // Природные и интеллектуальные ресурсы Сибири. «Сибресурс 2008»: материалы XII Междунар. науч.-практ. конф., 20–21 нояб. 2008 г. / редкол.: Ю. А. Антонов (отв. редактор). Кемерово: ГУ КузГТУ, 2008. С. 248–251.
6. Якушев А. И., Мустаев Р. Х., Мавлютов Р. Р. Повышение прочности и надежности резьбовых соединений. М.: Машиностроение, 1979. 215 с.
7. Юринец Р. В. Обеспечение качества гладко-резьбовых соединений // Машиностроение и техносфера XXI века: сб. тр. XIII Междунар. науч.-техн. конф. 11–16 сентября 2006 г. в Севастополе. В 5 т. Донецк: ДонНТУ. Т. 5. С. 340–343.
8. Семичевский Г. А., Березин С. Я. Технология сборки гладко-резьбовых соединений: монография. Чита: ЗабГПУ им. Н. Г. Чернышевского, 1998. 100 с.

References

1. Göthling A. Toleranzen und Festigkeit geformt Gewinde // Maschinenbau. 1968. 17. № 4. P. 171–174.
2. Inger Kh. Posadka rezbovykh shpilek v tsilindricheskiye otverstiya detaley s samonakatyvaniyem rezby // Tekhnologiya i oborudovaniye mekhanosborochного производства: Ekspres-informatsiya. М.: VINITI, 1975. № 26. S. 35–28.
3. Krasilnikov N. I., Iosilevich G. B., Gepshteyn V. S., Butkin N. S. Posadka shpilek v alyuminiyevye kartery dvigateley putem samonakatyvaniya rezby. // Avtomobilnaya promyshlennost. 1971. № 4. S. 36–37.
4. Molokhov I. F., Okoneshnikov V. A. Vvertyvaniye shpilek v gladkiye tsilindricheskiye otverstiya // Vestnik mashinostroyeniya. 1975. № 2. S. 48–50.
5. Danilova L. N. Vliyaniye kinematiki protsessa svinchivaniya na kachestvo gladko-rezbovykh soyedineniy. // Prirodnye i intellektualnye resursy Sibiri. «Sibresurs 2008»: Materialy XII Mezhdunar. nauch.-prakt. konf., 20–21 noyab. 2008 g. / redkol.: Yu. A. Antonov (otv. redaktor). Kemerovo: GU KuzGTU, 2008. S. 248–251.
6. Yakushev A. I., Mustayev R. Kh., Mavlyutov R. R. Povysheniye prochnosti i nadezhnosti rezbovykh soyedineniy. М.: Mashinostroyeniye, 1979. 215 s.
7. Yurinets R. V. Obespecheniye kachestva gladko-rezbovykh so-edineniy // Mashinostroyeniye i tekhnosfera XXI veka. Sb. trudov XIII Mezhdunar. nauch.-tekhn.konf. 11–16 sentyabrya 2006 g. v Sevastopole. V 5 t. Donetsk: DonNTU. T. 5. S. 340–343.
8. Semichevsky G. A., Berezin S. Ya. Tekhnologiya sborki gladko-rezbovykh soyedineniy: monografiya. Chita: ZabGPU im. N. G. Chernyshevskogo, 1998. 100 s.

Статья поступила в редакцию 20.04.2013

УДК 539.3
ББК В251

Михаил Сергеевич Воронин

младший научный сотрудник,
Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева
Сибирского отделения Российской академии наук
(Новосибирск, Россия), e-mail: mihause@academ.org

Лев Алексеевич Мерзиевский

доктор физико-математических наук, профессор,
Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева
Сибирского отделения Российской академии наук
(Новосибирск, Россия), e-mail: merzh@hydro.nsc.ru

Моделирование ударно-волнового деформирования политетрафторэтилена¹

Для описания поведения политетрафторэтилена под действием нагрузки построена модель упруговязкого тела максвелловского типа. Особенностью модели являются определяющие соотношения: время релаксации касательных напряжений и уравнение состояния среды при нешаровом тензоре деформации. Время релаксации строится с учетом того, что в полимерах возможен набор различных термо-флуктуационных процессов релаксации. При построении уравнения состояния уделено внимание сравнению результатов расчётов и доступных данных температуры ударно-сжатого материала. Решены задачи распространения, взаимодействия и отражения от свободной поверхности ударной волны и волны разгрузки.

Ключевые слова: политетрафторэтилен, фторопласт, тефлон, уравнение состояния, время релаксации, ударно-волновые процессы.

Mikhail Sergeevich Voronin

Junior Researcher,
Lavrent'yev Institute of Hydrodynamics,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Novosibirsk, Russia), e-mail: anchouse@ngs.ru

Lev Alekseevich Merzhievskiy

Doctor of Physics and Mathematics, Professor,
Lavrent'ev Institute of Hydrodynamics,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Novosibirsk, Russia), e-mail: merzh@hydro.nsc.ru

Modeling of Shock Deformed Polytetrafluoroethylene

A model of viscoelastic body of Maxwell's type is developed to describe behavior of loaded polytetrafluoroethylene. The characteristic feature of the model are the defining relations: relaxation time of shear stresses and equation of state (EoS) with non-spherical deformations tensor. Relaxation time function is developed taking into account the fact that there are a number of thermo-fluctuating relaxation processes in polymers. The results of EoS calculations are also compared with available data of shock temperature. The model is used for simulating of propagation, interaction and reflection from a free surface of shock and unloading waves.

Keywords: polytetrafluoroethylene, teflon, equation of state, relaxation time, shockwave processes.

Политетрафторэтилен (ПТФЭ, фторопласт, тефлон) по фазовому состоянию относится к классу кристаллических полимеров. В отличие от обычных кристаллических твердых тел кристаллические полимеры не являются полностью поликристаллами, а содержат как кристаллические, так и аморфные участки, а также области с промежуточными степенями упорядоченности. Если в полимере больше 40% кристаллической фазы, то его относят к кристаллическим. Обычно кристаллические полимеры обладают большей прочностью, меньшей текучестью, чем аморфные. В зависимости

¹Работа выполнялась при поддержке Интеграционного проекта СО РАН № 64 и гранта РФФИ № 12-01-00726-а.

от интенсивности приложенной нагрузки такие полимеры могут проявлять свойства, характерные как для аморфных, так и для кристаллических сред. Каждому из возможных состояний соответствует свой набор микро-, мезо- и макроструктурных механизмов необратимого деформирования. При этом последовательно активируются механизмы деформирования, связанные с гибкостью макромолекул и конформационными переходами, с перемещениями и перестройками надмолекулярных образований, а также с ростом кристаллитов (областей кристалличности) или их плавлением (фазовыми переходами). В квазистатических процессах переход из одного физического состояния в другое происходит при изменении температуры и сопровождается изменением микроскопических и макроскопических свойств.

В данной работе для описания поведения политетрафторэтилена $(CF_2)_n$ строится модель упруговязкого тела максвелловского типа. Развиваемый подход к построению моделей деформирования полимеров ранее применялся для описания свойств и поведения аморфных полимеров [1]. Принципиальной особенностью подхода является включение в определяющие соотношения времени релаксации касательных напряжений в форме непрерывной зависимости от параметров, характеризующих состояние среды. Аналитический вид зависимости выбирается на основе учета микро- и мезоструктурных механизмов необратимого деформирования. Для замыкания модели строится уравнение состояния среды, включающее зависимость энергии от второго инварианта тензора деформаций. Такой подход позволяет получить единообразное математическое описание всех физических состояний полимеров. Модели такого типа для поликристаллических тел так же дали хорошие результаты в описании ударно-волновых процессов [2].

В используемом далее одномерном случае система имеет вид [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho r^\nu)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u r^\nu)}{\partial r} &= 0, \quad \frac{\partial(\rho u r^\nu)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u^2 - \sigma_1) r^\nu]}{\partial r} + \nu r^{\nu-1} \sigma_2 = 0, \\ \frac{\partial[\rho(E + u^2/2) r^\nu]}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho u(E + u^2/2) - \sigma_1 u) r^\nu]}{\partial r} &= 0, \\ \frac{\partial h_2}{\partial t} + u \frac{\partial h_2}{\partial r} - \frac{\nu(3-\nu)u}{2} \frac{u}{r} &= -\frac{d_2}{\tau}, \quad \frac{\partial h_3}{\partial t} + u \frac{\partial h_3}{\partial r} - \frac{\nu(\nu-1)u}{2} \frac{u}{r} = -\frac{d_3}{\tau}, \\ E = E(\delta, D, S), \quad \sigma_i &= \rho \left(\frac{\partial E}{\partial h_i} \right)_S, \quad T = \left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_{\delta, D}, \quad \tau = \tau(\sigma_i, T), \\ \delta = \frac{\rho}{\rho_0} &= \exp\left(-\sum_{i=1}^3 h_i\right), \quad d_i = h_i - \frac{1}{3} \ln \delta, \quad D = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^3 d_i^2 \right). \end{aligned} \quad (1)$$

где ρ, u, E, S, T – плотность, скорость, удельная внутренняя энергия, энтропия и температура; σ_i – главные напряжения; h_i – логарифмы коэффициентов растяжения элемента среды вдоль главных осей; t, r – время и пространственная переменная; $E(\delta, D, S)$ – уравнение упругой энергии при нешаровом тензоре деформаций; $\tau(\sigma_i, T)$ – зависимость времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды, ν – показатель симметрии: $\nu = 0$ – плоская, $\nu = 1$ – цилиндрическая, $\nu = 2$ – сферическая; δ и D – первый и второй инварианты тензора деформаций. Уравнения записаны в системе координат, совпадающей с главными осями тензоров напряжения и деформаций (в данном случае они совпадают).

Для описания ударно-волновых и высокотемпературных процессов в широком диапазоне изменения термодинамических параметров в кристаллических и поликристаллических средах наибольшее распространение получили уравнения состояния на основе подхода Ми-Грюнайзена [4; 5]. Согласно этому полумпирическому подходу, какой-либо термодинамический потенциал (например, внутренняя или свободная энергия) представляется в виде суммы холодной (упругой) составляющей, соответствующей сжатию вещества при 0°K , и определяемые термическим возбуждением тепловые члены.

Хорошие результаты в описании экспериментальных данных и реальных процессов в поликристаллических телах, полученные с использованием данного подхода, стали основанием для его распространения и на аморфные среды. При этом возникает ряд дополнительных особенностей, связанных со строением полимерных сред.

Используя принципы, сформулированные в [5], и ограничившись диапазоном давлений до ~ 100 ГПа, представим свободную энергию в виде:

$$F(\delta, D, T) = F_x(\delta) + F_d(\delta, D) + F_t(\delta, T), \quad (2)$$

где F_x , F_d , F_t – упругая (холодная), девиаторная и тепловая составляющие соответственно. При наличии достаточного количества экспериментальных данных тепловую составляющую разделяют на вклады от атомов F_a и электронов F_e .

Функциональные зависимости для холодной и тепловой составляющих энергии выбирались с использованием имеющейся в литературе информации по этому вопросу [6–8]. Для девиаторного слагаемого выбрана линейная зависимость от второго инварианта тензора деформаций. В результате составляющие энергии (2) имеют вид:

$$\begin{aligned} F_x(\delta) &= V_0 \left(\frac{a\delta^{m-1}}{m-1} + \frac{b\delta^{n-1}}{n-1} \right) - F_{X0}, \\ F_d(\delta, D) &= 2c_{\perp}^2 \delta^{\xi_0} D, \\ F_t(\delta, T) &= F_a(\delta, T) + F_e(\delta, T) = R_{\mu} T \sum_{i=1}^3 N_i \ln(1 - e^{-x_i}) + TN_e \ln(1 - e^{-x_e}), \\ x_{i,e} &= \frac{\theta_{i,e}(\delta)}{T}, \quad \theta_{i,e} = \theta_{0i,0e} \delta^{\gamma_{0i,0e}}. \end{aligned} \quad (3)$$

где $V_0 = 1/\rho_0$; a, b, m, n – имеют смысл интерполяционных констант; константа F_{X0} выбирается из условия $F_X(1) = 0$; c_{\perp} – поперечная скорость звука; ξ_0 – интерполяционная константа; R_{μ} – универсальная газовая постоянная, делённая на молярную массу; θ_{0i} – характеристические температуры, определяемые по экспериментальным данным теплоемкости; γ_{0i} – интерполяционные константы, имеющие смысл аналогов коэффициента Грюнайзена, для соответствующих колебательных мод; N_i – интерполяционные константы, удовлетворяющие условию $\sum N_i = N$, где N – полное число колебательных мод; $N_e, \theta_{0e}, \gamma_{0e}$ – интерполяционные константы тепловой составляющей F_e , смысл которых подобен смыслу аналогичных констант в F_a .

Значения интерполяционных констант в зависимостях (3) выбирались из условия наилучшего описания всей совокупности доступных экспериментальных данных, большая часть которых содержится на интернет-сайте [10].

На рис. 1, рис. 2 сплошными линиями показаны ударная адиабата и изэнтропы разгрузки ПТФЭ, рассчитанные по построенному уравнению состояния, в сравнении с экспериментальными данными [10]. Экспериментальные данные изэнтропы разгрузки взяты из [11].

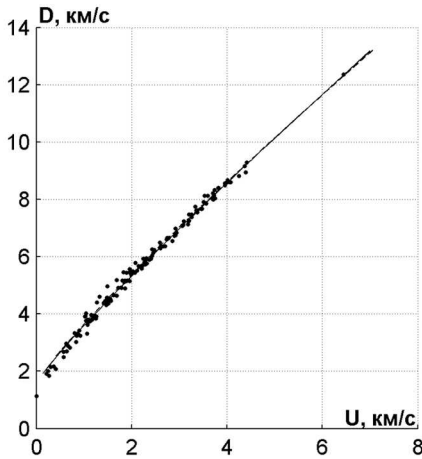


Рис. 1

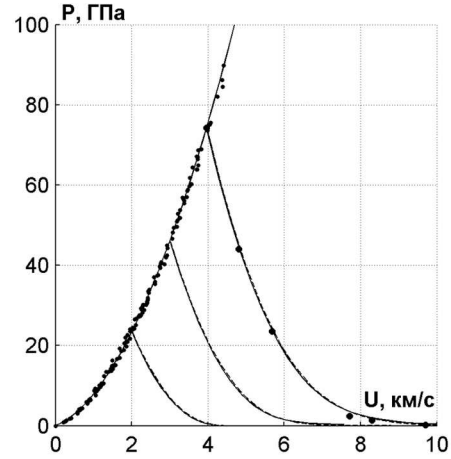


Рис. 2

Одним из наиболее сложных для описания параметров ударного сжатия является температура ударно сжатого вещества. На рис. 3 сплошной линией приведен расчёт по построенному уравнению состояния. В работе [9] проведены модельные оценки температуры за фронтом ударной волны ПТФЭ. Результаты этой оценки показаны штриховой линией на рис. 4. Точкой показаны экспериментальные данные, полученные [7].

На рис. 5 символами приведены экспериментальные данные [8] изобарной теплоемкости при 1 атм. Линиями показаны расчеты изохорной теплоёмкости по построенному уравнению состояния:

сплошная линия – теплоемкость вдоль ударной адиабаты (на вставке в более широком диапазоне температуры); штрих – теплоёмкость при атмосферном давлении; штрих-пунктир – теплоёмкость при $\delta = 1$.

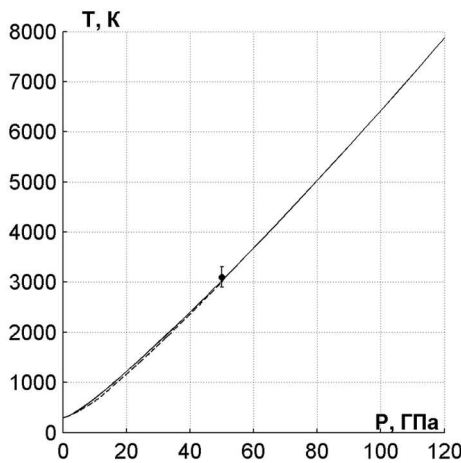


Рис. 3

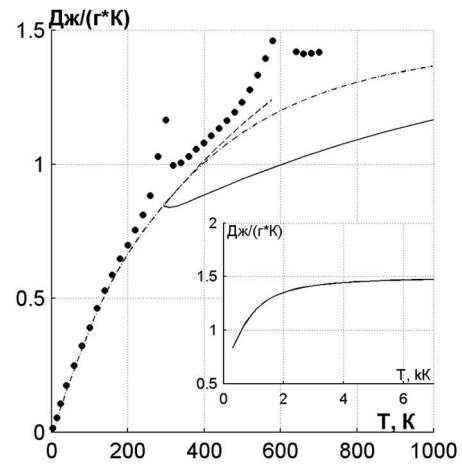


Рис. 4

Как всякий термофлуктуационный процесс, релаксация напряжений будет характеризоваться энергией активации U_i движения какого-либо типа кинетических единиц структуры полимера, а для соответствующего времени τ_i можно использовать формулу Больцмана-Аррениуса:

$$\tau_i = \tau_{0i} \exp(U_i/RT), \tag{4}$$

где τ_{0i} – характерное время релаксационного перехода одной кинетической единицы. Полное время релаксации можно представить в виде суммы слагаемых, соответствующих механизмам релаксации на разных структурных уровнях:

$$\tau = \sum_i \tau_i = \sum_i \tau_{0i} \exp(U_{0i}/RT). \tag{5}$$

При нагружении полимера возникающие напряжения изменяют величину энергии активации, понижая потенциальный барьер релаксационного перехода. Изменение температуры в процессе деформирования приводит к изменению свободного объема полимера. Учёт этих обстоятельств приводит к соотношению:

$$\begin{aligned} \tau(\hat{\sigma}, T) &= \sum_i \tau_{0i} \exp\left(\frac{U_{0i} - \nu_{Ai}(T) \cdot \hat{\sigma}}{RT}\right), \\ \nu_{Ai}(T) &= \nu_{A0i}(1 + \nu_{1i} \Delta T^{n_i}), \quad \Delta T = T - T_0 \\ \hat{\sigma} &= \sqrt{\frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2]}, \end{aligned} \tag{6}$$

где $\hat{\sigma}$ – интенсивность касательных напряжений; ν_{A0i} – эффективный активационный объём в недеформированном состоянии, трактуемый как объём активируемого структурного элемента или кинетической единицы [12]; ν_{1i} и n_i – интерполяционные константы. Для достаточно широкого диапазона напряжений и температур в (6) можно ограничиться четырьмя слагаемыми.

Значения величин энергии активации различных механизмов релаксации определяются косвенными экспериментальными методами (например, [13]). Для конкретизации других параметров зависимости была использована методика, разработанная и апробированная ранее для поликристаллических сред [14]. В её основе лежит решение задачи о деформировании тонкого стержня в рамках сформулированной модели, результатом которого является диаграмма деформирования данного материала. Полученное решение (диаграмма) зависит от искомым интерполяционных параметров в выражении (6) для времени релаксации. Сравнивая расчётные диаграммы или их элементы с экспериментальными (например, минимизируя функционал среднеквадратичных отклонений

характерных величин), можно отыскивать значения входящих в зависимость параметров. Главная из возникающих проблем заключается в малом количестве известных экспериментальных диаграмм полимеров, в том числе и ПТФЭ, полученных при высоких скоростях деформации, соответствующих условиям ударно-волнового нагружения.

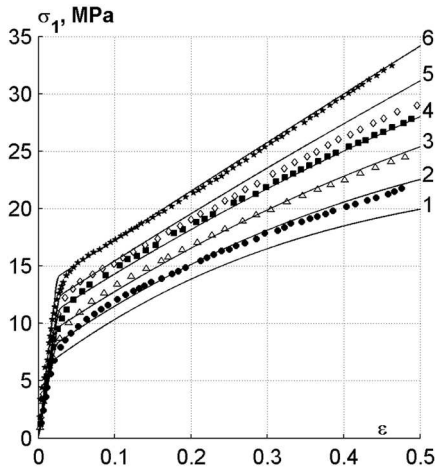


Рис. 5

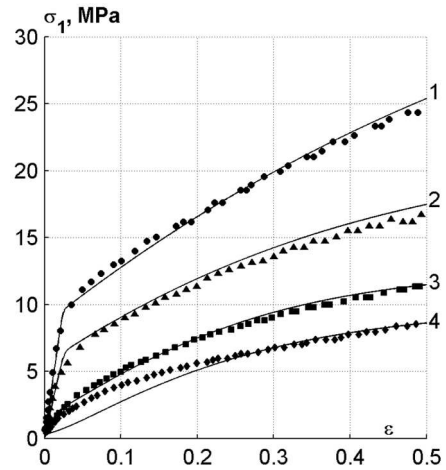


Рис. 6

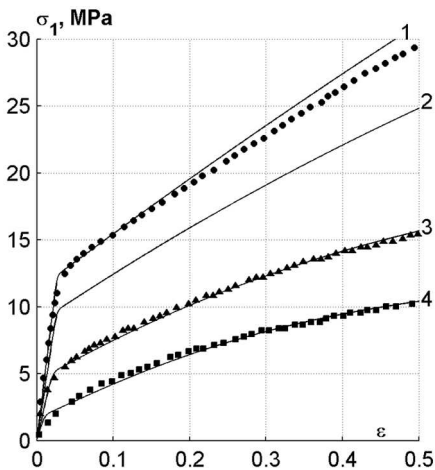


Рис. 7

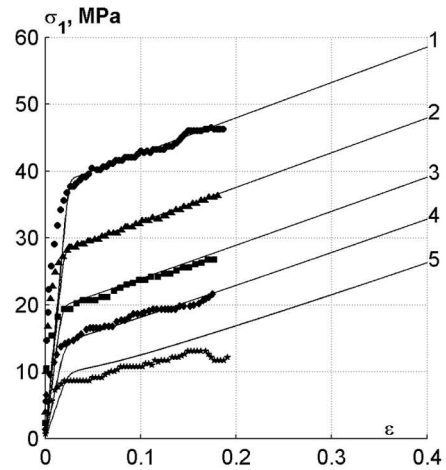


Рис. 8

На рис. 5–8 сплошными линиями приведены результаты расчётов диаграмм сжатия тефлона 7А в сравнении с экспериментальными данными [15].

На рис. 5 начальная температура задавалась равной $T_0 = 26 \text{ }^\circ\text{C}$, кривые соответствуют следующим скоростям деформации: 1 – 10^{-5} c^{-1} , 2 – 10^{-4} c^{-1} , 3 – 10^{-3} c^{-1} , 4 – 10^{-2} c^{-1} , 5 – 10^{-1} c^{-1} , 6 – 1 c^{-1} .

На рис. 6 все кривые получены при одной и той же скорости деформации 10^{-3} c^{-1} , но при разных начальных температурах: 1 – $26 \text{ }^\circ\text{C}$, 2 – $50 \text{ }^\circ\text{C}$; 3 – $100 \text{ }^\circ\text{C}$; 4 – $150 \text{ }^\circ\text{C}$.

На рис. 7–8 кривые получены при скорости деформации 10^{-1} c^{-1} и $3200 \pm 100 \text{ c}^{-1}$ и начальных температурах: 1 – $26 \text{ }^\circ\text{C}$, 2 – $50 \text{ }^\circ\text{C}$; 3 – $100 \text{ }^\circ\text{C}$; 4 – $150 \text{ }^\circ\text{C}$ и 1 – $15 \text{ }^\circ\text{C}$; 2 – $24 \text{ }^\circ\text{C}$, 3 – $50 \text{ }^\circ\text{C}$; 4 – $100 \text{ }^\circ\text{C}$, 5 – $150 \text{ }^\circ\text{C}$ соответственно.

В экспериментальных исследованиях ударно-волновых процессов ударная волна в исследуемом образце чаще всего создаётся с помощью удара пластины, разогнанной до высокой скорости. Для проверки применимости построенной модели в расчётах ударно-волновых процессов были решены задачи, воспроизводившие экспериментальные постановки [16; 17; 18] по изучению ударно-волновых процессов в тефлоне.

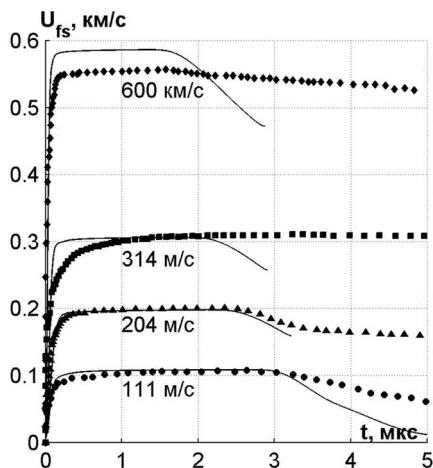


Рис. 9

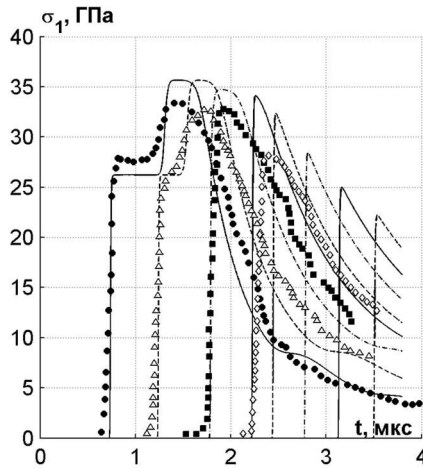


Рис. 10

В первом случае моделировался удар 2.5 мм тефлонового ударника (пластины) по 5 мм тефлоновой мишени. В экспериментах с помощью лазерного интерферометра записывалась зависимость массовой скорости от времени на свободной границе мишени. Экспериментальные профили ударных импульсов четырех различных амплитуд (точки) сравниваются с рассчитанными (сплошные линии) на рис. 9. Скорость ударника также нанесена рядом с соответствующими графиками. По всей видимости, волна разгрузки в экспериментах измерена неточно.

Во втором случае наблюдалось движение импульса сжатия в мишени из фторопласта. Мишень набиралась из отдельных пластин, между которыми находились 4 манганиновых датчика давления. Импульс напряжения генерировался при ударе двухслойной пластины из дюралюминия (4,8 мм) и титана (2 мм) по дюралюминиевому экрану толщиной 4 мм, за которым находилась мишень. Ударник подрывом ВВ разгонялся до скорости 3,5 км/с. После отражения ударной волны (далее УВ), распространявшейся по дюралюминию, от титана возникал импульс, который проходил в экран, а затем в мишень и догонял фронт УВ. На рис. 10 приводится сравнение серии экспериментальных (символы) и расчётных (линии) профилей, зарегистрированных на разных расстояниях от контактной границы экран-мишень.

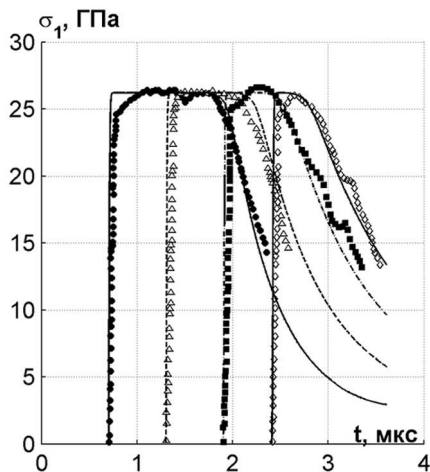


Рис. 11

В третьем случае проводились подобные эксперименты, но ударник состоял из одной дюралюминиевой пластины. На рис. 11 приводится сравнение расчетных (линии) и экспериментальных профилей.

Список литературы

1. Мержиевский Л. А., Воронин М. С. Моделирование ударно-волнового деформирования полиметилметакрилата // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48. № 2. С. 113–123.
2. Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д. Численное моделирование ударно-волновых процессов в металлах // Физика горения и взрыва. 1984. Т. 20. № 5. С. 114–122.
3. Годунов С.К. Элементы механики сплошной среды. М.: Наука, 1978.
4. Зельдвич Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматгиз, 1963.
5. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968.
6. Глушак Б. Л., Гударенко Л. Ф., Стяжкин Ю. М. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов с переменной теплоемкостью ядер и электронов // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Мат. моделирование физич. процессов. 1991. Вып. 2. С. 57–62.
7. Бордзиловский С. А., Караханов С. М., Бордзиловский Д. С. Применение оптического пирометра для измерения температуры ударного сжатия фторопласта // Физика горения и взрыва. 2010. Т. 46, № 1. С. 93–101.
8. Lau S. K., Suzuki H., Wunderlich B. The thermodynamic properties of polytetrafluoroethylene // J. of Polymer Sci.: Polymer Physics Edition. 1984. V. 22. № 5. P. 379–405.
9. Morris C. E., Fritz J. N., McQueen R. G. The equation of state of polytetrafluoroethylene to 80 GPa // J. Chem. Phys. 1984. V. 80. № 10 P. 5203–5218.
10. URL: <http://www.ficp.ac.ru/rusbank/> (дата обращения: 10.03.2013).
11. Бушман А. В. Исследование плексигласа и тефлона в волнах повторного ударного сжатия и изэнтропической разгрузки. Уравнение состояния полимеров при высоких плотностях энергии А. В. Бушман, М. В. Жерноклетов, И. В. Ломоносов, Ю. Н. Сутулов, В. Е. Фортов, К. В. Хищенко // Доклады Академии наук. 1993. Т. 329. № 5. С. 581–584.
12. Козлов Г. В., Сандитов Д. С. Ангармонические эффекты и физико-механические свойства полимеров. Новосибирск: Наука, 1994.
13. Берштейн В. А., Егоров В. М., Емельянов Ю. А. Взаимосвязь основных релаксационных переходов в полимерах // Высокомолекулярные соединения. 1985. Т. (А) XXVII, № 11 С. 2451–2456.
14. Мержиевский Л. А., Шамонин С. А. Построение зависимости времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды // ПМТФ. 1980. № 5. С. 170–179.
15. Rae P. J., Dattelbaum D. M. The properties of poly(tetrafluoroethylene) (PTFE) in compression // Polymer. 2004. V. 45. P. 7615–7625.
16. Bourne N. K., Gray III G. T. Dynamic response of binders; teflon, estaneTM and Kel-F-800TM // J. App. Phys. 2005. V. 98. P. 123503 (1–9).
17. Бордзиловский С. А., Караханов С. М. Распространение импульса напряжения по ударно-сжатому фторопласту // Физика горения и взрыва. 1992. № 3. С. 118–119.
18. Караханов С. М., Бордзиловский С. А. Динамическое поведение политетрафторэтилена в волнах сжатия и разгрузки // Физика горения и взрыва. 2000. Т. 36. № 5. С. 109–118.

References

1. Merzhiyevsky L. A., Voronin M. S. Modelirovaniye udarno-volnovogo deformirovaniya polimetilmetakrilata // Fizika goreniya i vzryva. 2012. T. 48. № 2. S. 113–123.
2. Merzhiyevsky L. A., Resnyansky A. D. Chislennoye modelirovaniye udarno-volnovykh protsessov v metallakh // Fizika goreniya i vzryva. 1984. T. 20. № 5. S. 114–122.
3. Godunov S.K. Elementy mekhaniki sploshnoy sredy. M.: Nauka, 1978.
4. Zeldvich Ya. B., Rayzer Yu. P. Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy. M.: Fizmatgiz, 1963.
5. Zharkov V. N., Kalinin V. A. Uravneniya sostoyaniya tverdykh tel pri vysokikh davleniyakh i temperaturakh. M.: Nauka, 1968.
6. Glushak B. L., Gudarenko L. F., Styazhkin Yu. M. Poluempiricheskoye uravneniye sostoyaniya metallov s peremennoy teployemkostyu yader i elektronov // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Mat. Modelirovaniye fizich. protsessov. 1991. Vyp. 2. S. 57–62.
7. Bordzilovsky S. A., Karakhanov S. M., Bordzilovsky D. S. Primeneniye opticheskogo pirometra dlya izmereniya temperatury udarnogo szhatiya ftoroplasta // Fizika goreniya i vzryva. 2010. T. 46, № 1. S. 93–101.
8. Lau S. K., Suzuki H., Wunderlich B. The thermodynamic properties of polytetrafluoroethylene // J. of Polymer Sci.: Polymer Physics Edition. 1984. V. 22. № 5. P. 379–405.
9. Morris C. E., Fritz J. N., McQueen R. G. The equation of state of polytetrafluoroethylene to 80 GPa // J. Chem. Phys. 1984. V. 80. № 10 P. 5203–5218.
10. URL: <http://www.ficp.ac.ru/rusbank/> (data obrashcheniya: 10.03.2013).
11. Bushman A. V. Issledovaniye pleksiglasa i teflona v volnakh povtornogo udarnogo szhatiya i izentropicheskoy razgruzki. Uravneniye sostoyaniya polimerov pri vysokikh plotnostyakh energii /A. V. Bushman, M. V. Zhernokletov, I. V. Lomonosov, Yu. N. Sutulov, V. Ye. Fortov, K. V. Khishchenko // Doklady Akademii nauk. 1993. T. 329. № 5 S. 581–584.
12. Kozlov G. V., Sanditov D. S. Angarmonicheskkiye efekty i fiziko-mekhanicheskkiye svoystva polimerov. Novosibirsk.: Nauka, 1994.
13. Bershteyn V. A., Yegorov V. M., Yemelyanov Yu. A. Vzaimosvyaz osnovnykh relaksatsionnykh perekhodov v polimerakh // Vysokomolekulyarnye soyedineniya. 1985. T. (A) XXVII, № 11 S. 2451–2456.
14. Merzhiyevsky L. A., Shamonin S. A. Postroyeniye zavisimosti vremeni relaksatsii kasatelynykh napryazheniy ot parametrov sostoyaniya sredy // PMTF. 1980. № 5. S. 170–179.
15. Rae P. J., Dattelbaum D. M. The properties of poly(tetrafluoroethylene) (PTFE) in compression // Polymer. 2004. V. 45. P. 7615–7625.
16. Bourne N. K., Gray III G. T. Dynamic response of binders; teflon, estane™ and Kel-F-800™ // J. App. Phys. 2005. V. 98. P. 123503 (1–9).
17. Bordzilovsky S. A., Karakhanov S. M. Rasprostraneniye impulsa napryazheniya po udarno-szhatomu ftoroplastu // Fizika goreniya i vzryva. 1992. № 3. S. 118–119.
18. Karakhanov S. M., Bordzilovsky S. A. Dinamicheskoye povedeniye politetraftoretilena v volnakh szhatiya i razgruzki // Fizika goreniya i vzryva. 2000. T. 36. № 5. S. 109–118.

Статья поступила в редакцию 15.03.2013

УДК 66.011
ББК Л1.7

Александр Викторович Галахов

кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник,
Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН
(Москва, Россия), e-mail: metal@zabspu.ru

Виктор Александрович Зеленский

кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник,
Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН
(Москва, Россия), e-mail: zelensky55@bk.ru

Лев Васильевич Коваленко

доктор технических наук, ведущий научный сотрудник,
Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН
(Москва, Россия), e-mail: metal@zabspu.ru

Сергей Фёдорович Забелин

доктор технических наук, член-корреспондент РАЕН, профессор,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: metal@zabspu.ru

Михаил Иванович Алымов

доктор технических наук, член-корреспондент РАН, профессор,
Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН
(Москва, Россия), e-mail: metal@zabspu.ru

Жидкофазный синтез оксинитрида алюминия¹

Проведен анализ технологий синтеза оксинитрида алюминия-AlON, применяемого для изготовления прозрачной броневой керамики. Показано, что наиболее эффективным является метод жидкофазного синтеза AlON, где процесс синтеза не совмещен со спеканием и отдельно синтезированное сырье расширяет технологические возможности производства. Экспериментально установлено, что еще более перспективным является метод, в котором синтез проводили по схеме, включающей приготовление обезвоженного геля, его термическую деструкцию с последующим азотированием в аммиачной среде, и в котором использовали неорганические исходные материалы в виде предварительно синтезированного порошкового сырья. Применение разработанной технологии позволяет использовать при изготовлении изделий всю гамму методов керамической технологии – формование и спекание без применения давления, а это позволяет получать изделия сложной формы, например, прозрачные тонкостенные оболочки, которые применяют в ракетной технике.

Ключевые слова: бронезащита, прозрачная керамика, синтез оксинитрида алюминия, неорганические исходные материалы, синтез порошкового сырья.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 13-08-00336а.

Aleksandr Viktorovich Galakhov

*Candidate of Engineering Science,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: metal@zabspu.ru*

Viktor Aleksandrovich Zelenskiy

*Candidate of Physics and Mathematics, Leading Researcher,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: zelensky55@bk.ru*

Lev Vasil'evich Kovalenko

*Doctor of Engineering Science, Leading Researcher,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), an e-mail: metal@zabspu.ru*

Sergey Fedorovich Zabelin

*Doctor of Engineering Science, Corresponding Member of the Russian Academy of Natural Sciences,
Professor, Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: metal@zabspu.ru*

Mikhail Ivanovich Alymov

*Doctor of Engineering Science,
Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, Professor,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: metal@zabspu.ru*

Liquid-Phase Synthesis of Aluminum Oxynitride

The analysis of technologies for the synthesis of aluminum oxynitride (AlON) used for the manufacture of transparent armor ceramics was performed. It is shown that the most effective method of liquid-phase synthesis of AlON, where the fusion process is not aligned with separately synthesized sintering, and raw material extends the technological capabilities of production. It was experimentally established that more promising is the method in which synthesis was carried out according to the scheme consisting of preparation of dehydrated gel, its thermal decomposition, followed by nitriding in ammonia medium, wherein inorganic material was used as a raw material powder synthesized beforehand. Application of the technology can be used in manufacture of the whole range of products made by ceramic technology methods - molding and sintering without pressure, and it allows obtaining some shaped articles, e.g. transparent thin-walled shell which is used in rocket engineering.

Keywords: armor, transparent ceramics, aluminum oxynitride synthesis, inorganic raw materials, powder materialsynthesis.

Наблюдаемый в настоящее время рост пробивной мощности стрелкового оружия и малокалиберной артиллерии заставляет разработчиков средств защиты срочно искать адекватные возможности совершенствования характеристик броневых материалов и защитных структур. Задача поиска новых легких защитных материалов и структур сегодня стоит как никогда остро. Особенно это касается прозрачных броневых материалов. В этом классе материалов наиболее перспективным является прозрачная поликристаллическая керамика, в частности, керамика на базе оксинитрида алюминия – общепринятая аббревиатура AlON. Этот материал обладает уникальным комплексом свойств, необходимым для применения в средствах бронезащиты и, кроме того, не требует для своего производства применения сверхзатратных технологий. Получать прозрачные изделия сложной формы из него можно, используя традиционные для технологии керамики процессы формования и спекания. За рубежом к разработке броневой защиты из AlON проявляется активный интерес, особенно фирмами, работающими на оборону. Материал запатентован в США, его разработкой и производством занимается американская фирма "Surmet"[1].

Оксинитрид алюминия представляет собой соединение алюминия кислорода и азота и описывается формулой $Al_{23}O_{27}N_5$. Это соединение было синтезировано сравнительно недавно – в 50-х гг.

прошлого века. В наше время интерес к нему многократно возрос. Обладая низкой кристаллической симметрией – кубическая сингония, – этот материал без значительных затрат позволяет получать прозрачную керамику по обычной керамической технологии. В нижеследующей таблице приведены свойства керамики AlON в сравнении с другими прозрачными керамическими материалами.

Таблица

Сравнительные свойства прозрачной керамики

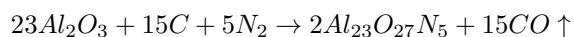
	Оксинитрид алюминия (ALON)	Фианит ($ZrO_2 + 15Y_2O_3$)	Плавленый Кварц	Алюмоиттриевый гранат $5Al_2O_3 * 3Y_2O_3$	Сапфир (Al_2O_3)	Алюомагнезиальная шпинель ($Al_2O_3 * MgO$)
Плотность, г/см ³	3,69	6,09	2,21	4,55	3,97	3,59
Модуль Юнга, ГПа	334	215	70	28.45	344	260
Прочность при изгибе, МПа	380	455	48	435	742	184
Ударная вязкость, МПа*м	2,4	1,8	0.8	-	1,2	1,7
Твердость по Кпоор	17,7	12,5	4,5	13,5	19,8	14,9

Видно, что среди представленных керамик при средней плотности AlON обладает достаточно высокой прочностью, сопоставимой с YAG (алюмоиттриевый гранат) и фианитом (стабилизированная двуокись циркония). А по самой важной для бронезащиты характеристике – ударная вязкость – AlON превосходит все приведенные прозрачные материалы (разумеется, включая кварцевое стекло – плавленый кварц).

Из-за превосходной оптической прозрачности, прочности и твердости, оптическая керамика ALON находит перспективу для применения во многих областях гражданской и военной техники. В гражданских областях большой интерес проявлен и уже ALON применяется как керамика, прозрачная для инфракрасного излучения в области волны миллиметрового диапазона, для окон скафандров. Кроме того, она рассматривается как конкурент полупроводниковым подложкам с высокой теплопроводностью из нитрида алюминия для электронных устройств большой мощности. Большое внимание уделяется использованию AlON в военной технике. Имеется два перспективных направления. Одно связано с производством прозрачных колпаков для боевых ракет, самонаводящихся по лазерному лучу. В данном случае из-за несравнимо высокой прочности, стойкости к термическому воздействию от трения в газовом потоке этому материалу не может составить конкуренцию ни одна прозрачная керамика, включая кварц и сапфир, вследствие дороговизны технологии их производства. Второе направление использования AlON в военной технике, занимающее доминирующее место, является использование этого материала в элементах прозрачной бронезащиты. В этом направлении наиболее интересны результаты баллистических испытаний пластин из разных прозрачных керамик, выполненных в армейских лабораториях в Абердине [1]. Для испытаний использовали образцы керамических пластин из трех прозрачных керамик: AlON, магнийалюминиевой шпинели ($Al_2O_3 * MgO$), сапфира (прозрачная керамика Al_2O_3) и традиционно применяемой для этой цели кварцевой керамики. Керамика ALON показала свойства на 10 % лучше, чем шпинель, и на 20 % лучше, чем броня из сапфира. А что касается кварцевой керамики, то опытные пластины AlON по характеристикам бронезащиты превосходили пластины из кварцевого стекла на 250 %.

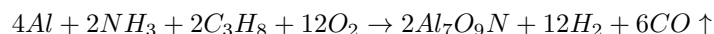
Анализ информации в рекламно-коммерческой и научной периодике показал, что возрастающий интерес к этому материалу проявляют исследовательские центры в США, Германии и Японии. В подавляющем большинстве работ по этой тематике основное внимание уделяется оптическим свойствам AlON и содержится мало сведений о технологии получения самого материала. Впервые соединение AlON было синтезировано и изучено в Японии [2; 3] в начале 50-х гг. прошлого века.

Соединение было получено путем высокотемпературного ($> 1800^\circ$) твердофазного взаимодействия между компонентами Al_2O_3 и AlN в атмосфере азота. Прозрачную керамику из этого материала получили американцы уже в конце 70 – начале 80-х гг. [4; 5] путем реакционного спекания тех же компонентов в азотной атмосфере при $1870^\circ C$. Основной негативной чертой этого процесса является использование очень высоких температур и, следовательно, высоких затрат на оборудование и технологию. В 1997 г. был предложен более дешевый метод получения порошков $AlON$ – карбо-термальный [6; 7]. В этом технологическом процессе к вышеуказанной смеси компонентов реакции добавляли углерод для «вскрытия» соединения Al_2O_3 при более низкой температуре по реакции



Применением такой технологии удалось несколько понизить ($1700^\circ C$) температуру синтеза. Этот метод в настоящее время является базовым при промышленном получении порошков $AlON$. Однако столь высокий уровень температуры синтеза, требующего для своей реализации дорогостоящего специализированного термического оборудования, существенно удорожает производство материала.

В последнее время развиваются новые технологические подходы, основанные на альтернативных методах синтеза. Например, в работе [8] синтезировали сферические порошки $AlON$ прямым нитрированием порошков металлического алюминия в пламени горелки в газовой среде из смеси азот- и углеродсодержащих газов по реакции



Этот метод синтеза обладает невысокой производительностью, к тому же неоднородность тепловых условий в пламени горелки не обеспечивает точную стехиометрию и необходимую чистоту получаемого сырья.

В то же время, по нашему мнению, недостаточно оценен путь применения жидкофазного синтеза $AlON$ из растворимых азотсодержащих соединений. Публикации по использованию такой технологии крайне редки и, как правило, ограничиваются применением этого метода в лабораторной практике. Например, в работе японских исследователей этот метод применен для синтеза оксинитрида алюминия при изучении взаимодействия этого соединения с оксидом европия [9]. Суть метода заключается в получении прекурсора в виде аморфного геля, содержащего атомы алюминия, кислорода и азота в пропорции, исключающей образование – формы Al_2O_3 при его дальнейшем обжиге в азотсодержащей среде. Для этого в исходном водном растворе проводят смешение кислород и азот содержащих соединений в необходимой пропорции. В работе [9] для этой цели использовали недорогие соединения азотнокислого алюминия кристаллогидрата и глицина (аминоуксусная кислота). После проведения реакции в растворе высушенный гель обжигали при температуре 1200° в атмосфере аммиака. Реализация такой технологической схемы позволяет понизить температуру синтеза $AlON$ с 1700° до $1200 - 1300^\circ$.

В своих исследованиях мы провели вариант жидкофазного синтеза оксинитрида алюминия с использованием органических исходных материалов. В качестве источника алюминия использовали этилат алюминия $C_6H_{15}AlO_3$ – поставка ALDRICH 97 %. Источником атомарного азота служила мочевиная $(NH_2)_2CO$ – квалификации ЧДА. Для частичного «вскрытия» образующегося в процессе синтеза оксида алюминия использовали сахарозу $C_{12}H_{22}O_{11}$ ГОСТ 5833-75. Чтобы исключить образование промежуточных низкотемпературных соединений алюминия с гидроксильной группой ($AlOH$, $AlOH$, $Al(OH)_3$), в качестве растворителя применяли этиловый спирт. Синтез проводили по схеме, применяемой в работе [9], которая включает приготовление обезвоженного геля, его термическую деструкцию с последующим азотированием в аммиачной среде. На рис. 1а представлена рентгенограмма оксинитрида алюминия, синтезированного в атмосфере аммиака. На рис. 1б показана рентгенограмма этих же порошков, но подвергнутых дополнительному 3-часовому обжигу в потоке азота при температуре $1600^\circ C$. Обжиг при $1600^\circ C$ полученных образцов оксинитрида алюминия проводили как тестовый.

Такая необходимость возникает, когда нет быстрой возможности достаточно точного определения содержания азота в синтезированном материале. Известно, что особенностью рентгенограммы оксинитрида алюминия является почти полная идентичность ее рефлексов картине, получаемой при съемке гамма оксида алюминия. В то же время известно, что при температуре свыше $1250^\circ C$ – γAl_2O_3 трансформируется в более стабильную форму – $\alpha - Al_2O_3$. Оксинитрид алюминия в азотной атмосфере стабилен от комнатной до температуры $1800^\circ C$. Неизменность рефлексов

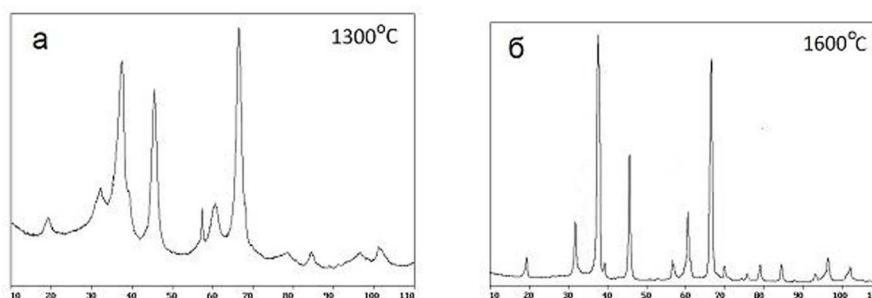


Рис. 1. Рентгенограммы образцов синтезированного оксинитрида алюминия, приготовленного из неорганических исходных: а – после синтеза в токе аммиака; б – после обжига в токе азота при 1600°, 3 часа

на рентгенограмме образцов, показавших фазу с рефlekсами оксинитрида алюминия при 1300 °С и далее обожженных при температуре 1600 °С, заведомо превосходящей температуру трансформации $\gamma - Al_2O_3$ в α -форму, с очевидностью указывает на принадлежность рентгенограммы оксинитриду алюминия.

Разумеется, практическая значимость результатов, полученных на органических исходных материалах, из-за высокой стоимости органических соединений алюминия не столь высока. Поэтому работы по синтезу во втором варианте мы синтезировали оксинитрид алюминия из дешевых неорганических солей по «классической» схеме, предложенной в работе [9]. В качестве исходных компонентов использовали неорганическую соль алюминия – $Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ и азотсодержащее соединение глицин (аминоуксусная кислота NH_2CH_2COOH). В этом варианте также получили $AlON$ без признаков посторонних соединений в пределах рентгенографической точности (нет посторонних линий на рентгенограммах). Рентгенограмма соединения представлена на рис. 2.

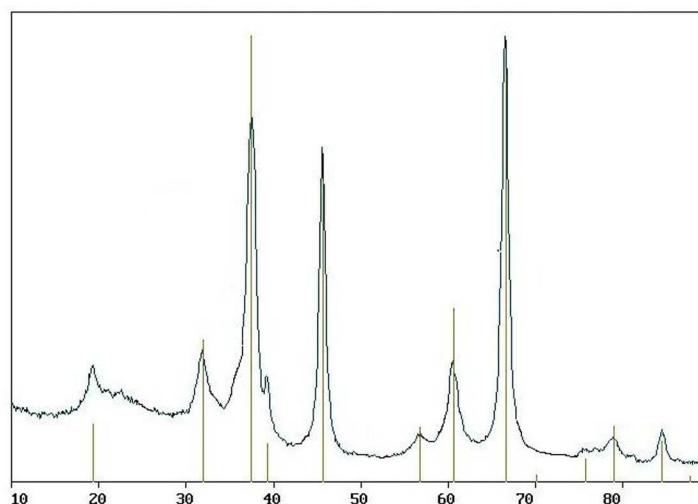


Рис. 2. Рентгенограмма оксинитрида алюминия, синтезированного по «классической» технологии [9]. Наложена штрих-рентгенограмма $Al_{23}O_{27}N_5$

В настоящей публикации приведены материалы по перспективному методу синтеза исходного сырья для производства прозрачной броневого керамики. В противовес классическому карботермальному [6; 7] методу получения прозрачного оксинитрида алюминия, где процесс синтеза совмещен со спеканием (реакционное спекание под давлением), использование отдельно синтезированного сырья расширяет технологические возможности производства. Применение синтезированного порошкового сырья позволяет использовать для получения изделий всю гамму традиционных методов керамической технологии – формование, спекание без применения давления. Это позволяет получать изделия сколь угодно сложной формы, в частности прозрачных тонкостенных оболочек [1], которые применяются в ракетной технике. Разумеется, синтез порошков лишь начальный этап

полномасштабного внедрения прозрачной керамики.

Список литературы

1. Joseph M. Wahl et al. Recent Advances in ALONTM Optical Ceramic, Surmet. URL:http://en.wikipedia.org/wiki/Aluminium_oxynitride#cite_note-r2-3.
2. Yamaguchi G. "Refractive Power of the Lower-Valent Aluminum Ion (Al^{+} or Al^{++}) in the Crystal," Bull. Chem. Soc. Jpn., 1950. 23. P. 89–90.
3. Yamaguchi G. and Yanagida H. "The Reducing Spinel: A New Spinel Formula $AlN - Al_2O_3$ Instead of the Previous One Al_3O_4 ," Bull. Chem. Soc. Jpn., 1959. 32. P. 1264–1265.
4. McCauley J. W. and Corbin N. D. "Phase-Relations and Reaction Sintering of Transparent Cubic Aluminum Oxynitride Spinel (AlON)," J. Am. Ceram.Soc., 1979, 62 [9–10]. P. 476–479.
5. McCauley J. W. and Corbin N. D. "High Temperature Reactions and Microstructures in the Aluminum Oxide-Aluminum Nitride System," NATO ASI Series E, Vol. 65 Nitrogen Ceramics. ed., F. L. Riley. ASI. Falmer. UK. 1983. P. 111–118.
6. Yawei L. Nan L. and Runzhang Y. "The Formation and Stability of g-Aluminium Oxynitride Spinel in the Carbothermal Reduction and Reaction Sintering Processes," J. Mater. Sci., 1997. 32 [4]. P. 979–982.
7. Yawei L., Nan L., and Runzhang Y., "Carbothermal Reduction Synthesis of Aluminium Oxynitride Spinel Powders at Low Temperatures," J. Mater. Sci. Lett., 1997, 16 [3]. P. 185–186.
8. Yasumasa Takao, Mutsuo Sando. Al-System Non-Oxide Spherical Powder Synthesis by liquefied Petroleum Gas Firing. J. Am.Ceram.Soc., 2005, 88 [2]. P. 450–452.
9. Shinichi Kikkawa, Naoya Hatta, and Takashi Takedaz. Preparation of Aluminum Oxynitride by Nitridation of a Precursor Derived from Aluminum-Glycine Gel and the Effects of the Presence of Europium. J. Am.Ceram.Soc., 2008. 91 [3]. P. 924–928.

References

1. Joseph M. Wahl et al. Recent Advances in ALONTM Optical Ceramic, Surmet URL:http://en.wikipedia.org/wiki/Aluminium_oxynitride#cite_note-r2-3.
2. Yamaguchi G. "Refractive Power of the Lower-Valent Aluminum Ion (Al^{+} or Al^{++}) in the Crystal," Bull. Chem. Soc. Jpn., 1950, 23. P. 89–90.
3. Yamaguchi G. and Yanagida H. "The Reducing Spinel: A New Spinel Formula $AlN - Al_2O_3$ Instead of the Previous One Al_3O_4 ," Bull. Chem. Soc. Jpn., 1959, 32. P. 1264–1265.
4. McCauley J. W. and Corbin N. D. "Phase-Relations and Reaction Sintering of Transparent Cubic Aluminum Oxynitride Spinel (AlON)," J. Am. Ceram.Soc., 1979, 62 [9–10]. P. 476–479.
5. McCauley J. W. and Corbin N. D. "High Temperature Reactions and Microstructures in the Aluminum Oxide-Aluminum Nitride System," NATO ASI Series E, Vol. 65 Nitrogen Ceramics. ed., F. L. Riley. ASI, Falmer, UK, 1983. P. 111–118.
6. Yawei L, Nan L. and Runzhang Y. "The Formation and Stability of g-Aluminium Oxynitride Spinel in the Carbothermal Reduction and Reaction Sintering Processes," J. Mater. Sci., 1997, 32 [4]. P. 979–982.
7. Yawei L., Nan L. and Runzhang Y. "Carbothermal Reduction Synthesis of Aluminium Oxynitride Spinel Powders at Low Temperatures," J. Mater. Sci. Lett., 1997, 16 [3]. P. 185–186.
8. Yasumasa Takao, Mutsuo Sando. Al-System Non-Oxide Spherical Powder Synthesis by liquefied Petroleum Gas Firing. J. Am.Ceram.Soc., 2005. 88 [2]. P. 450–452.

9. Shinichi Kikkawa, Naoya Hatta, and Takashi Takedaz. Preparation of Aluminum Oxynitride by Nitridation of a Precursor Derived from Aluminum–Glycine Gel and the Effects of the Presence of Europium. J. Am.Ceram.Soc., 2008, 91 [3]. P. 924–928.

Статья поступила в редакцию 19.03.2013

УДК 517.956
ББК В161.611

Ирина Анатольевна Ефимова
кандидат физико-математических наук, доцент,
Забайкальский институт предпринимательства
Сибирского университета потребительской кооперации
(Чита, Россия), e-mail: hol47@yandex.ru

**О решении первой краевой задачи на плоскости для уравнения Лапласа
в области, ограниченной параболой¹**

Рассмотрена первая краевая задача во внутренней части области, ограниченной параболой. Методом свёртывания разложений Фурье решение задачи выражено в виде ряда через решение классической задачи Дирихле в полуплоскости.

Ключевые слова: задача Дирихле в криволинейной области, уравнение Лапласа, метод свёртывания разложений Фурье.

Irina Anatol'evna Efimova
Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor,
Zabaikalsky Institute of Entrepreneurship of
Siberian University of Consumer Cooperation
(Chita, Russia), e-mail: hol47@yandex.ru

**On Solution of the First Boundary Value Problem on a Plane for Laplace's
Equation in the Area Bounded by Parabola**

The first boundary value problem in the inner part of the area limited by parabola is considered. Using a convolution method of Fourier expansions, the problem solution is expressed in the form of a series through the solution of the classical Dirichlet problem in the half-plane.

Keywords: Dirichlet problem in curvilinear area, Laplace's equation, a method of convolution of Fourier expansions.

Рассмотрим на плоскости с декартовыми координатами x, y для функции $u(x, y)$ первую краевую задачу в области $D(x > ky^2 - l^2)$, ограниченной параболой $L(x = ky^2 - l^2)$ (D – внутренняя часть, содержащая точку $(0, 0)$):

$$\partial_x^2 u + \partial_y^2 u = 0, \quad (x, y) \in D; \quad u|_{(x,y) \in L} = \psi(x, y), \quad (1)$$

где $\psi(x, y)$ – заданная непрерывная функция, $k = (2l)^{-2}$, $l > 0$, $\partial_x^n = \partial^n / \partial x^n$. В данном случае область D имеет криволинейную границу L , не совпадающую с координатными линиями, что вызывает существенные трудности при решении данной задачи.

С помощью аналитической функции $z = \zeta^2$ перейдём на вспомогательную плоскость $\zeta = \xi + i\eta$, где $z = x + iy$,

$$x = \xi^2 - \eta^2, \quad y = 2\xi\eta. \quad (2)$$

Координаты ξ, η являются параболическими координатами основной плоскости z или декартовыми координатами плоскости ζ . Обратное отображение имеет вид

$$\xi = \text{sign}(y) \sqrt{\frac{r+x}{2}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{r-x}{2}}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}. \quad (3)$$

¹Работа выполнена в рамках Государственного задания вузу Минобрнауки РФ (код проекта 1.3985.2011).

Функция $z = \zeta^2$ отображает полосу $G(\xi \in R, 0 < \eta < l)$ плоскости ζ на область D с разрезом $s(0 < x < \infty, y = 0) \in D$, при этом границы $\eta = l$ и $\eta = 0$ полосы G отображаются соответственно в параболу L и разрез s . В переменных ξ, η задача (1) для функции $u(\xi, \eta)$ примет вид

$$\partial_{\xi}^2 u + \partial_{\eta}^2 u = 0, \quad (\xi, \eta) \in G; \quad u|_{\eta=l} = \varphi(\xi), \quad (4)$$

$$u(\xi, 0) = u(-\xi, 0), \quad \partial_{\eta} u(\xi, 0) = -\partial_{\eta} u(-\xi, 0), \quad (5)$$

где $\varphi(\xi) = \psi(\xi^2 - l^2, 2\xi l)$ (2). Условия сопряжения (5) выражают непрерывность искомого решения $u(\xi, \eta)$ и его нормальной производной на разрезе s основной плоскости, т. е. этим разрезом можно пренебречь. На плоскости ζ границами области G являются прямые координатные линии, однако задача усложняется наличием дополнительных условий сопряжения (5).

Наряду с задачей (4), (5) рассмотрим классическую задачу Дирихле в полуплоскости $\eta < l$ с сохранением граничной функции $\varphi(\xi)$ (4) вида

$$\partial_{\xi}^2 f + \partial_{\eta}^2 f = 0, \quad \eta < l; \quad f|_{\eta=l} = \varphi(\xi). \quad (6)$$

Решение данной задачи строится по формуле Пуассона

$$f(\xi, \eta) = \frac{\eta - l}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varphi(p) dp}{(\xi - p)^2 + (\eta - l)^2}, \quad (7)$$

причем последний интеграл вычисляется в конечном виде для достаточно широкого класса граничных функций $\varphi(\xi)$, т.е. функцию $f(\xi, \eta)$ (7) можно считать известной функцией.

С помощью метода свёртывания разложений Фурье [1, 2] выразим решение задачи (4), (5) через решение $f(\xi, \eta)$ задачи Дирихле (6). Пусть граничная функция $\varphi(\xi)$ разлагается в интеграл Фурье, т. е.

$$\varphi(\xi) = \int_0^{\infty} [\varphi_1(\lambda) \sin \lambda \xi + \varphi_2(\lambda) \cos \lambda \xi] d\lambda, \quad (8)$$

где

$$\varphi_{(1/2)}(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi) \begin{pmatrix} \sin \lambda \xi \\ \cos \lambda \xi \end{pmatrix} d\xi, \quad (9)$$

при этом $\varphi(\xi) \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow \pm\infty$. Отсюда, применяя метод Фурье к задаче Дирихле (6), её решение найдём в виде разложения Фурье:

$$f(\xi, \eta) = \int_0^{\infty} e^{\lambda(\eta-l)} [\varphi_1(\lambda) \sin \lambda \xi + \varphi_2(\lambda) \cos \lambda \xi] d\lambda, \quad \eta \leq l. \quad (10)$$

Представим решение задачи (4), (5) в виде

$$u(\xi, \eta) = \int_0^{\infty} [a(\lambda) \operatorname{sh} \lambda \eta \sin \lambda \xi + b(\lambda) \operatorname{ch} \lambda \eta \cos \lambda \xi] d\lambda, \quad 0 \leq \eta \leq l, \quad (11)$$

где $a(\lambda), b(\lambda)$ – искомые параметры. Отсюда функция $u(\xi, \eta)$ удовлетворяет уравнению (4) и условиям сопряжения (5) (при условии сходимости и дифференцируемости интеграла (11)). Из граничного условия (4) с учётом разложения (8) находим

$$a(\lambda) = \frac{\varphi_1(\lambda)}{\operatorname{sh} \lambda l}, \quad b(\lambda) = \frac{\varphi_2(\lambda)}{\operatorname{ch} \lambda l}. \quad (12)$$

Отсюда решение задачи (4), (5) строится по формулам (11), (12). Полученное решение содержит двукратные квадратуры (внешнюю и внутреннюю в коэффициентах Фурье $\varphi_i(\lambda)$ (9)) от сильно осциллирующих тригонометрических функций, что затрудняет практическое использование полученного решения.

Выразим полученное решение (11) непосредственно через функцию $f(\xi, \eta)$ (7) без разложений Фурье. Из равенств (12) следует

$$a = \frac{2e^{-\lambda l} \varphi_1}{1 - e^{-2\lambda l}} = 2\varphi_1 \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda l(2n+1)}; \quad b = \frac{2e^{-\lambda l} \varphi_2}{1 + e^{-2\lambda l}} = 2\varphi_2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n e^{-\lambda l(2n+1)}.$$

Здесь дроби разложены в геометрические прогрессии со знаменателями

$$q_i = (-1)^{i+1} e^{-2\lambda l}, \quad |q_i| < 1.$$

Отсюда с учётом разложения (10) функция $u(\xi, \eta)$ (11) приводится к виду:

$$u(\xi, \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n [f((-1)^n \xi, \eta - 2nl) + f((-1)^{n+1} \xi, -\eta - 2nl)]. \quad (13)$$

Полученный ряд сходится достаточно быстро, как знакопеременный ряд, при этом учитываем, что функция $f(\xi, \eta)$ (7) при $\eta \rightarrow -\infty$ монотонно стремится к нулю.

Таким образом, решение исходной задачи (1) непосредственно выражается через решение $f(\xi, \eta)$ задачи Дирихле (6) в полуплоскости $\eta < l$ по формуле (13) без квадратур и без разложений Фурье, где переменные $\xi = \xi(x, y)$, $\eta = \eta(x, y)$ имеют вид (3).

Список литературы

1. Холодовский С. Е. Метод свертывания разложений Фурье. Случай обобщенных условий сопряжения типа трещины (завесы) в кусочно-неоднородных средах // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45. № 6. С. 855–859.
2. Холодовский С. Е. Метод свертывания разложений Фурье. Случай трещины (завесы) в неоднородном пространстве // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45. № 8. С. 1204–1208.

References

1. Kholodovsky S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furye. Sluchay obobshchennykh uslovy sopryazheniya tipa treshchiny (zavesy) v kusochno-neodnorodnykh sredakh // Differentsialnye uravneniya. 2009. T. 45. № 6. S. 855–859.
2. Kholodovsky S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furye. Sluchay treshchiny (zavesy) v v neodnorodnom prostranstve // Differentsialnye uravneniya. 2009. T. 45. № 8. S. 1204–1208.

Статья поступила в редакцию 15.03.2013

УДК 519.834, 519.837.3
ББК В 22.18

Анатолий Анатольевич Забелин
кандидат физико-математических наук,
Читинский институт
Байкальского государственного университета экономики и права,
(Чита, Россия), e-mail: anatanza@mail.ru

Об одной динамической модели арбитража

В статье приводится исследование неантагонистической многошаговой модели арбитража, где предложение арбитра является равномерно распределённой случайной величиной.

Ключевые слова: арбитраж, неантагонистическая игра, многошаговая игра.

Anatoliy Anatol'evich Zabelin
Candidate of Physics and Mathematics,
Chita Institute of Baikal State University of Economics and Law,
(Chita, Russia), e-mail: anatanza@mail.ru

On a Dynamic Arbitration Model

The article is devoted to non-antagonistic multistage arbitration game, where an arbiter's offer is a random variable uniformly distributed on $[0; 1]$.

Keywords: arbitration game, non-antagonistic game, multistage game.

Рассмотрим неантагонистическую модель арбитража. Два игрока делят некоторый ресурс, максимальная величина которого равна единице. Выдвижением предложений о дележе ресурса занимается арбитр. Он наблюдает случайную величину α , равномерно распределённую на отрезке $[0; 1]$, и, получив наблюдение a , объявляет его игрокам. У каждого игрока две стратегии – принять это предложение или отвергнуть его. Игра многошаговая, n – количество периодов игры, k – количество периодов, оставшихся до конца игры. Положим также, что с течением времени ресурс дисконтируется с коэффициентом дисконтирования $\delta \in [0; 1]$. Пусть u_i^k – выигрыш игрока с номером i в партии с индексом k при оптимальной игре обоих игроков. Предложение арбитра обозначим a^k .

Определим выигрыш игроков в партии с индексом k . Если оба игрока принимают предложение арбитра, то первый игрок получает долю ресурса a^k , а второй игрок – долю ресурса, равную $1 - a^k$, и игра заканчивается. Положим, что в случае, когда кто-либо из игроков не согласен с предложением арбитра, спор разрешается в пользу несогласной стороны и игра также завершается. Отсюда следует, что в ситуации, когда только один из игроков не принял предложения арбитра, игрок, не согласный с предложением, получает долю ресурса, равную $\max(a^k, 1 - a^k)$ (соответственно, игрок, согласившийся с предложением, получает долю, равную $\min(a^k, 1 - a^k)$). Если же оба игрока не согласны с предложением арбитра, игра переходит в следующий период, индекс k уменьшается на единицу, выигрыши игроков дисконтируются и они равны соответственно δu_1^{k-1} и δu_2^{k-1} .

Получаем биматричную игру с матрицами выигрыша (первая строка и первый столбец соответствуют принятию игроками предложения арбитра)

$$\begin{pmatrix} a^k & \min(a^k, 1 - a^k) \\ \max(a^k, 1 - a^k) & \delta u_1^{k-1} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 - a^k & \max(a^k, 1 - a^k) \\ \min(a^k, 1 - a^k) & \delta u_2^{k-1} \end{pmatrix}.$$

Граничное условие: $u_1^0 = u_2^0 = 0$.

Пусть x и y – вероятности выбора стратегии «принять предложение арбитра» первым и вторым игроком соответственно.

Рассмотрим случай $n = 1$.

Если предложение арбитра $a^1 \in [0; 0.5]$, то матрицы выигрышей имеют вид

$$\begin{pmatrix} a^1 & a^1 \\ 1 - a^1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 - a^1 & 1 - a^1 \\ a^1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Решение для данного случая, найденное по алгоритму, приведённому в [1, с. 251–256], даёт два типа ситуаций равновесия по Нэшу. Первый – ситуация $(x = 0; y = 1)$, при которой пара выигрышей $(h_1(x, y); h_2(x, y)) = (1 - a^1; a^1)$. Второй – множество ситуаций в смешанных стратегиях $(x = 1; y)$, где $y \in \left[0; \frac{a^1}{1 - a^1}\right]$. Здесь выигрыши $(h_1(x, y); h_2(x, y)) = (a^1; 1 - a^1)$.

Если же $a^1 \in (0.5; 1]$, то матрицы выигрышей:

$$\begin{pmatrix} a^1 & 1 - a^1 \\ a^1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 - a^1 & a^1 \\ 1 - a^1 & 0 \end{pmatrix}.$$

В данном случае также два типа ситуаций равновесия. Первый тип – ситуация $(x = 1; y = 0)$, при которой выигрыши $(h_1(x, y); h_2(x, y)) = (1 - a^1; a^1)$. Второй – множество ситуаций в смешанных стратегиях $(x; y = 1)$, где $x \in \left[0; \frac{1 - a^1}{a^1}\right]$. Здесь выигрыши $(h_1(x, y); h_2(x, y)) = (a^1; 1 - a^1)$.

Ситуации равновесия не единственны и дают неравноценные выигрыши, поэтому в качестве решений игры они выступать не могут. Найдём арбитражное решение по Нэшу (см. [2, с. 142–146]).

Для каждого конкретного $a \in [0; 1]$ множество пар выигрышей $(h_1; h_2)$, оптимальных по Парето, имеет вид $h_1 + h_2 = 1$, точка статус-кво $(\min(a^1, 1 - a^1); \min(a^1, 1 - a^1))$, отсюда арбитражное решение задается соотношением $(h_1; h_2) = (0.5; 0.5)$. Пару таких выигрышей можно получить, выбирая при $a \leq 0.5$ стратегии $(x = 0.5; y = 1)$, а при $a > 0.5$ пару стратегий $(x = 1; y = 0.5)$, причём указанные пары стратегий единственны. В итоге,

$$u_1^1 = \int_0^1 0.5 da^1 = 0.5, \quad u_2^1 = \int_0^1 0.5 da^1 = 0.5.$$

Итак, решение игры при $n = 1$ получено с помощью арбитражной схемы Нэша.

Решим игру для произвольного n , предварительно положив, что $u_1^{k-1} = u_2^{k-1} = u^{k-1}$, где $k \in \overline{1, n}$ – индекс партии игры. Положим, что $u^{k-1} \leq 0.5$.

Пусть $a^k \in [0; 0.5]$. Матрицы выигрыша в партии с индексом k :

$$\begin{pmatrix} a^k & a^k \\ 1 - a^k & \delta u^{k-1} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 - a^k & 1 - a^k \\ a^k & \delta u^{k-1} \end{pmatrix}.$$

Если $a^k \in [0; \delta u^{k-1}]$, то имеется единственная ситуация равновесия по Нэшу $(x = 0; y = 0)$, и выигрыши игроков одинаковы и равны δu^{k-1} .

Если $a^k \in (\delta u^{k-1}; 0.5]$, то имеется два неравноценных, оптимальных по Нэшу и Парето класса ситуаций. Первый – ситуация $(x = 0; y = 1)$, которой соответствуют выигрыши $(1 - a^k, a^k)$, второй – множество ситуаций $(x = 1; y \in [0; t])$, где $t = \frac{\delta u^{k-1} - a^k}{\delta u^{k-1} - (1 - a^k)} \in (0; 1)$ и которым соответствуют выигрыши $(a^k, 1 - a^k)$.

Если же $a^k \in (0.5; 1)$, то матрицы выигрыша:

$$\begin{pmatrix} a^k & 1 - a^k \\ a^k & \delta u^{k-1} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 - a^k & a^k \\ 1 - a^k & \delta u^{k-1} \end{pmatrix}.$$

При $a^k \in [1 - \delta u^{k-1}; 1]$ имеется единственная ситуация равновесия по Нэшу $(x = 0; y = 0)$, выигрыши игроков равны δu^{k-1} .

Если $a^k \in (0.5; 1 - \delta u^{k-1})$, то имеется два неравноценных, оптимальных по Нэшу и Парето класса ситуаций. Первый – ситуация $(x = 1; y = 0)$, которой соответствуют выигрыши $(1 - a^k, a^k)$, второй – множество ситуаций $(x \in [0; t]; y = 1)$, где $t = \frac{\delta u^{k-1} - (1 - a^k)}{\delta u^{k-1} - a^k} \in (0; 1)$ и которым соответствуют выигрыши $(a^k, 1 - a^k)$.

Отсюда следует, что при $|a^k - 0.5| \geq 0.5 - \delta u^{k-1}$ решение можно найти без использования схемы Нэша, а если $|a^k - 0.5| < 0.5 - \delta u^{k-1}$, то приходится рассматривать делёж.

Рассуждая аналогично первому случаю, получаем арбитражное решение $(h_1; h_2) = (0.5; 0.5)$, которое реализуется теми же наборами стратегий, что и указанные ранее.

В итоге получаем:

$$u_1^k = u_2^k = \int_0^{\delta u^{k-1}} \delta u^{k-1} da^k + \int_{\delta u^{k-1}}^{1-\delta u^{k-1}} 0.5 da^k + \int_{1-\delta u^{k-1}}^1 \delta u^{k-1} da^k = \delta u^{k-1} + \frac{(1 - 2\delta u^{k-1})^2}{2}.$$

Равенство выигрышей, совместно с базой $u_1^1 = u_2^1$, подтверждает индукцию по всем $k \in \overline{1, n}$.

В качестве дополнения к сказанному выше, в проведённом исследовании была найдена асимптотика выигрышей

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_i^n = \frac{1 + \delta - \sqrt{1 + 2\delta - 3\delta^2}}{4\delta^2}$$

и среднее время игры (в периодах)

$$E_n \tau = 1 + \sum_{t=1}^{n-1} \prod_{r=1}^t \{2\delta u^{n-r}\} = 1 + 2\delta u^{n-1} E_{n-1} \tau,$$

причем $\lim_{n \rightarrow \infty} E_n \tau = \frac{2\delta}{\sqrt{1 + 2\delta - 3\delta^2} - (1 - \delta)}.$

Список литературы

1. Дюбин Г. Н., Суздаль В. Г. Введение в прикладную теорию игр. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1981. 336 с.
2. Петросян Л. А., Зенкевич Н. А., Семёна Е.А. Теория игр: учеб. пособие для ун-тов. М.: Высшая школа; Университет, 1998. 304 с.

References

1. Dyubin G. N., Suzdal V. G. Vvedeniye v prikladnuyu teoriyu igr. M.: Nauka, Glavnaya redaktsiya fiziko-matematicheskoy literatury, 1981. 336 s.
2. Petrosyan L. A., Zenkevich G. A., Syomina Ye. A. Teoriya igr: ucheb. posobiye dlya un-tov. M.: Vysshaya shkola; Universitet, 1998. 304 s.

Статья поступила в редакцию 15.05.2013

УДК 66.01
ББК Л1.7

Виктор Александрович Зеленский
кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник,

Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН
(Москва, Россия), e-mail: zelensky55@bk.ru

Ирина Владимировна Трегубова

старший научный сотрудник,

Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН
(Москва, Россия), e-mail: tregubova.01@bk.ru

Алексей Борисович Анкудинов

старший научный сотрудник,

Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН
(Москва, Россия), e-mail: zelensky55@bk.ru

Сергей Фёдорович Забелин

доктор технических наук,

член-корреспондент РАН, профессор,

Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: metal@zabspu.ru

Получение пористого материала из порошков серебра¹

Предложена новая технология получения пористого материала из порошков серебра. Технология, сочетающая принципы коллоидной химии и порошковой металлургии, позволяет синтезировать нанопорошки серебра с частицами преимущественно пластинчатой формы и небольшими областями скопления частиц округлой формы. Метод заключается в синтезе прекурсоров на основе серебра с использованием органических соединений и их последующим низкотемпературным (175 °С) восстановлением в водородно-азотной атмосфере. Методами прессования с порообразующим элементом (пищевой сахар) и последующим спеканием получено серебро с открытой пористой структурой с максимально достигнутым значением пористости 73 %. Установлено, что технология шликерного литья с применением парафина в качестве связующего обеспечивает получение гомогенной пористой структуры материала.

Ключевые слова: пористые металлические материалы, синтез прекурсоров серебра, восстановление нанопорошка серебра, открытая пористая структура материала.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-08-00124-а).

Viktor Aleksandrovich Zelenskiy

*Candidate of Physics and Mathematics, Leading Researcher,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: zelensky55@bk.ru*

Irina Vladimirovna Tregubova

*Senior Researcher,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: tregubova.01@bk.ru*

Aleksey Borisovich Ankudinov

*Senior Researcher,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: zelensky55@bk.ru*

Sergey Fedorovich Zabelin

*Doctor of Engineering Science,
Corresponding Member of the Russian Academy of Natural Sciences,
Professor Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: metal@zabspu.ru*

Production of Porous Material from Silver Powders

A new technology of porous material production from silver powders is offered. Technology combining the principles of colloid chemistry and powder metallurgy allows us to synthesize nanopowders of silver with the particles of mainly platelet shape and small areas of confluence of round shape particles. The method involves synthesis of precursors on the basis of silver with the use of organic compounds and their low temperature (175 °C) postreduction in a hydrogen-nitrogen atmosphere. Compacting methods with a pore forming element (food sugar) and follow-up sintering allowed us to get open porous structure of silver with the maximum porosity value up to 73 %. The study found that slip casting technology with the use of paraffin as a connecting element provides production of a homogeneous porous structure of the material.

Keywords: porous metal materials, synthesis of silver precursors, reduction of silver nanopowder, open porous structure of the material.

Введение. Металлические материалы с открытой пористой структурой находят широкое техническое применение благодаря их развитой поверхности и низкой плотности. Материалы с закрытой пористостью применяются как конструкционные, с открытой – незаменимы как функциональные материалы при изготовлении фильтров, теплообменников, катализаторов. Существуют различные технологии создания материалов с открытой пористой структурой. Одним из методов создания металлических пористых структур является метод порошковой металлургии, когда производится совместное прессование порошков металла и порообразующих добавок. На последующих стадиях технологического процесса порообразующие добавки подвергаются либо вымыванию растворителем, либо выгоранию при термической обработке, а пористая структура конечного изделия обеспечивается за счет спекания металлического порошка, который превращается в перегородки пористого материала. В качестве порообразователя могут применяться кристаллы солей, в частности используют NaCl. Однако NaCl может приводить к нежелательной коррозии. Часто кристаллы обычного пищевого сахара оказываются хорошим материалом для создания пористой структуры.

Серебро как металл обладает мощным антибактериальным действием, его применяют для очистки воды, и этот вопрос очень важен, особенно в наше время, когда качество воды не всегда на высоком уровне. Применение пористого серебра для обеззараживания является актуальным в условиях, когда недоступны гарантированно качественные источники воды в сельской местности. Известно, что металлические материалы, созданные с использованием наночастиц и нанопорошков могут обладать уникальными свойствами, обусловленными присутствием мелких частиц в материале [1]. В то же время размеры, форма и структура металлических нанопорошков, определяют

свойства изделий, получаемых методами порошковой металлургии [2]. В настоящей работе предложена технология получения нанопорошка серебра и использование его для получения материала с открытой пористостью методами порошковой металлургии. В качестве порообразователя использовался белый рафинированный сахар

Получение нанопорошка серебра. Для получения нанопорошков серебра разработан ряд методик, в которых в большинстве случаев синтез проводится в водных средах с получением устойчивых золей. Широко известны методы синтеза серебряных нанопорошков, в том числе полиол процесс, сольвотермический метод, восстановительные процессы в которых осуществляют с применением в качестве восстанавливающего агента глюкозы, аммиака, танина, глицерина. В представленных методах применяются растворы низких концентраций, что существенным образом ограничивает объемы производимых порошков. Важной научно-технической задачей является повышение производительности процессов синтеза нанопорошков серебра. В работе использовали растворы реагентов повышенной концентрации. Предлагаемый метод заключается в синтезе наноразмерных прекурсоров на основе серебра путем проведения химических реакций в растворах, содержащих органические соединения, с получением устойчивых осадков соединений серебра и их последующим низкотемпературным восстановлением. Таким образом, технология получения нанопорошка серебра включает две стадии. На первой стадии получают порошковые прекурсоры. Вторая стадия заключается в восстановлении полученных прекурсоров в водородо-азотной атмосфере.

За основу для получения порошковых прекурсоров серебра взят цитратный метод Туркевича [3]. В цитратном методе получения наночастиц восстановителем ионов серебра и стабилизатором роста частиц служит цитрат-анион, получаемый при растворении в воде трехзамещенной натриевой соли лимонной кислоты $Na_3C_6H_5O_7$. При нагревании раствора и окислении цитрат-аниона образуются ацетондикарбоновая и итаковая кислоты. Эти кислоты адсорбируются на поверхности восстанавливаемых частиц и контролируют их рост [4]. В настоящей работе было уменьшено время кипячения растворов до 1–2 мин по сравнению с методом Туркевича, когда кипячение производится десятками минут. В условиях высоких концентраций при длительном кипячении образуются крупные порошки восстановленного серебра. При малом времени кипячения не происходило полное восстановление серебра, а получались прекурсоры, требующие дополнительной обработки для получения металлического порошка. Ниже приводится описание разработанной технологии получения наноразмерного порошка серебра. Готовится 0,156 М раствор нитрата серебра $AgNO_3$ (х. ч.); 0,025 М раствор цитрата натрия $Na_3C_6H_5O_7$ (ч. д. а.). Раствор нитрата серебра нагревают до кипения в стеклянном стакане, в кипящий раствор порционно добавляют цитрат натрия (порционное введение обеспечивает параллельное протекание процессов нуклеации и роста частиц [5]). При этом реакционный раствор постоянно перемешивается. Раствор кипятят еще 1–2 мин, продолжая перемешивать. В результате наблюдается выпадение в осадок мелкого порошка серого цвета. Затем стакан с раствором снимается с нагревательной плитки и остывает на воздухе. После этого осадок отфильтровывают на воронке Бюхнера и просушивают на воздухе. Исследования состава прекурсора методом рентгенофазового анализа (проводили на рентгеновском дифрактометре типа ДРОН-3,0 в СиКа-излучении) показывают, что образовавшийся порошок в основном состоит из органического соединения $C_{65}Ag_3O_7$ (рис. 1).

Вторая стадия процесса, заключается в восстановлении полученного прекурсора и проводится в трубчатой печи в водородо-азотной атмосфере (40 % H_2 в газовой смеси) в кварцевой реторте [6]. Термический режим: скорость нагрева 7 градусов в минуту, выдержка 30 мин при 175 °С. В результате процесса получен порошок серебра черного цвета. Порошок исследовали методами электронной микроскопии и рентгенофазового анализа. Рентгенограмма полученного порошка серебра приведена на рис. 2. Средний размер кристаллитов порошка серебра рассчитывали по уширению рентгеновских пиков по формуле Селякова-Шерера – он имеет размер около 250 нм.

Электронная микроскопия показала, что синтезированный нанопорошок состоит в основном из частиц пластинчатой формы (рис. 3); также в массиве порошка есть зоны, в которых наблюдаются скопления частиц округлой формы со средним размером частиц около 80 нм (рис. 4).

Получение образцов серебра с открытой пористой структурой. Синтезированный наноструктурированный порошок серебра использовался для изготовления образцов с пористой структурой. В качестве порообразующего материала использовали пищевой сахар с размером кристаллами около 1 мм. Смешение порошков серебра и сахара производилось исходя из пропорции 30 % об. Ag + 70 % об. сахара (в пересчете на массовые проценты – 74 % Ag + 26 % сахара). Такая пропорция выдерживалась во всех экспериментах. Теоретическая плотность состава – 4,29

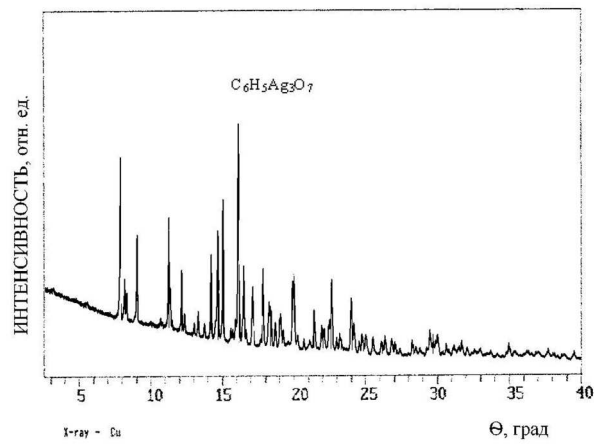


Рис. 1. Рентгенограмма прекурсора

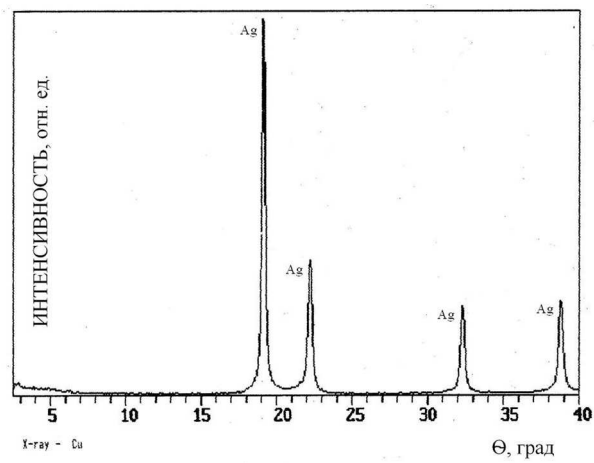


Рис. 2. Рентгенограмма порошка серебра

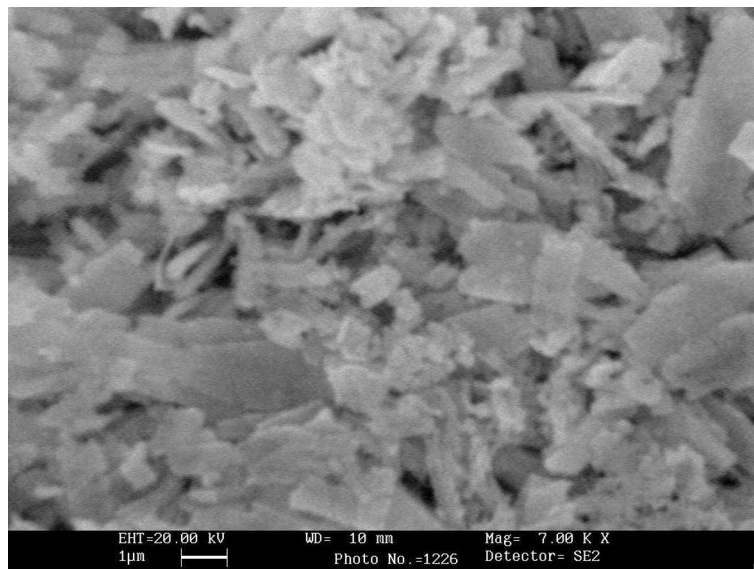


Рис. 3. Частицы порошка серебра пластинчатой формы

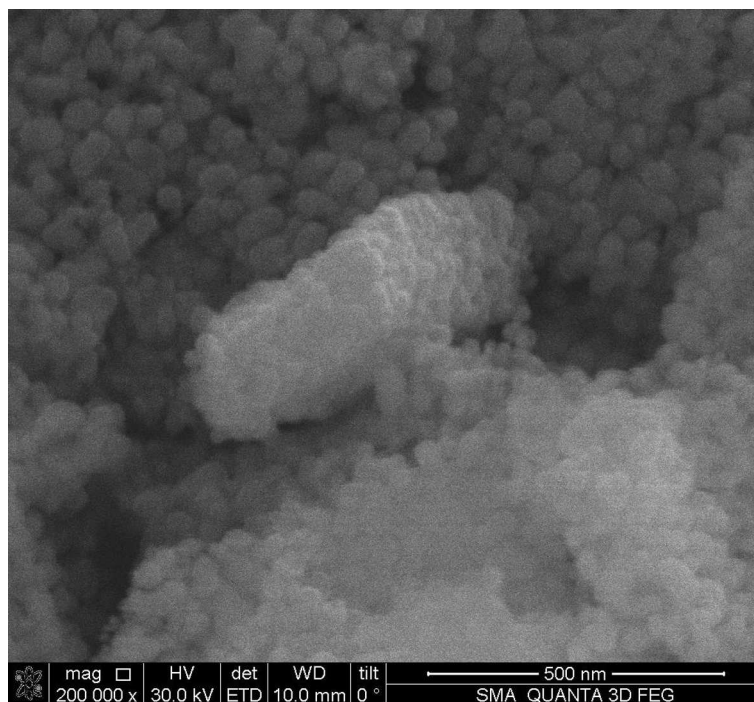


Рис. 4. Скопления частиц серебра округлой формы

г/см³. Смешение шихты производили в турбулентном смесителе С 2.0. Шихта без связующего приготавливалась перемешиванием порошков серебра и сахара в стеклянной емкости объемом 50 мл, смешение происходило без добавления шаров в течение 80 мин. Последнее было сделано, чтобы не происходило измельчение кристаллов сахара от ударов шарами.

Применяли разные варианты прессования шихт – без связующего и со связующим, в качестве которого использовали дистиллированную воду и парафин. Дистиллированную воду вводили в шихты непосредственно перед прессованием. Во втором случае шихту замешивали в предварительно растопленный парафин. При этом доля парафина составляла 5 % от массы шихты. Подготовленные шихты прессовали в разъемной матрице с внутренним диаметром 13,6 мм, на засыпку брали около 10 г шихты. Для уменьшения трения боковые стенки матрицы смазывали стеаратом цинка. Прессовали на ручном гидравлическом прессе НР 15, давление прессования составляло 600 МПа, реализовывалась схема одноосного прессования. Интересно отметить некоторые особенности прессования. В частности, при прессовании образца без связующего получилась довольно прочная прессовка, осыпания не наблюдается и с ней можно работать без предосторожностей. Плотность прессовки составила 4,05 г/см³, что составляет 94,4 % от теоретической плотности равной 4,29 г/см³. Столь высокое значение плотности объясняется особенностями поведения сахара при прессовании. Будучи хрупким материалом, имеющим невысокую прочность, сахар при прессовании разрушался при давлении гораздо ниже 600 МПа и заполнял почти все пустоты в прессовке.

Удаление сахара из образцов, спрессованных из шихты без связующего и образцов с добавлением воды, производилось по единой методике. Образец укладывали на подставку в 100-мл стакан и заливали дистиллированной водой. Стакан ставили на электроплитку, нагревали до 90 °С и выдерживали 5 ч, после чего меняли воду и повторяли цикл в течение 1 ч. После этого образец вынимали и оставляли на воздухе сохнуть в течение суток. Спекание выполняли в печи Nabetherm на воздухе по режиму: нагрев за 1 ч до 850 °С; выдержка при 850 °С в течение 3 ч; далее охлаждение с печью. Спекание на воздухе не приводит к окислению, напротив, серебро имеет свойство восстанавливаться из оксида до чистого металла при температуре выше 300 °С.

В случае применения в качестве связующего парафина применялась технология, широко используемая при изготовлении керамических изделий методом шликерного литья. Спрессованные образцы укладывались в керамический короб, засыпались толстым слоем оксида алюминия. После чего короб помещался в печь, где за одну установку производилась отгонка связующего, выжигание порообразователя и спекание образца. Некоторые характеристики спеченных образцов пористого

серебра представлены в таблице.

Таблица

Характеристики образцов пористого серебра

Связующее	Пористость, %	Примечание
Без связующего	73	Распухание по высоте 3,9 %; по диаметру 3,3 %
Вода (4 капли на образец)	72	Распухание по высоте 7,2 %; по диаметру 0,7 %
Парафин	68	Изотропная линейная усадка 3,8 %

Заслуживает внимания факт распухания образцов, спрессованных без связующего и с водой в качестве связующего. Причем в первом случае распухание практически изотропно, тогда как во втором наблюдается распухание в основном по высоте. Характерная структура образца пористого серебра, спрессованного без связующего, представлена на рис. 5. Однако наблюдается некоторая макронеоднородность образца. Морфология пор в разных местах образца может немного отличаться. Это объясняется тем, что частицы порошка серебра и порообразователя значительно отличаются друг от друга по размеру и плотности. Неоднородность формируется на стадии засыпки шихты в прессформу и наследуется материалом при последующих операциях изготовления образца – удалении порообразователя и спекании. Применение воды в качестве связующего, которая добавляется в шихту непосредственно перед прессованием, улучшает картину, но макронеоднородность все-таки остается, хотя и в меньшей степени. К тому же вода начинает частично растворять сахар и процесс прессования по этой причине необходимо проводить как можно быстрее.

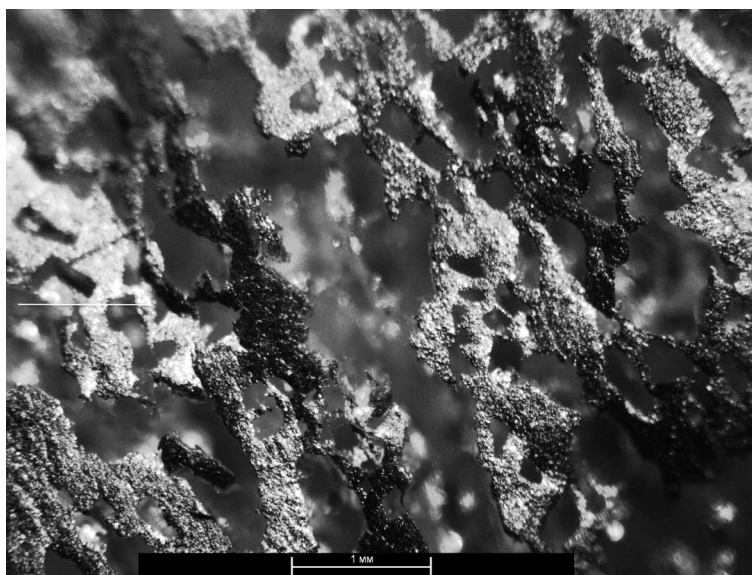


Рис. 5. Пористое серебро (прессование без связующего)

Кардинально улучшить ситуацию и достичь однородности морфологии пор по объему образца удастся при использовании в качестве связующего парафина. В данном случае частицы порообразователя однородно плакируются частицами порошка серебра, что и обеспечивает гомогенную пористую структуру материала, получаемого по технологии шликерного литья (рис. 6).

Выводы. Предложен новый метод синтеза нанопорошка серебра, включающий получение прекурсора серебра с использованием органических соединений и последующим восстановлением в водородно-азотной среде при 175 °С. В результате синтезирован наноструктурированный порошок серебра с частицами преимущественно пластинчатой формы, при этом имеются области скопления частиц округлой формы со средним размером ~ 80 нм.

Методами прессования с порообразующим элементом, в качестве которого использовали пищевой сахар, и последующим спеканием получено серебро с открытой пористой структурой. Максимальное достигнутое значение пористости в образцах составляет 73 %.

Установлено, что технология шликерного литья с применением парафина в качестве связующего обеспечивает получение гомогенной пористой структуры материала.

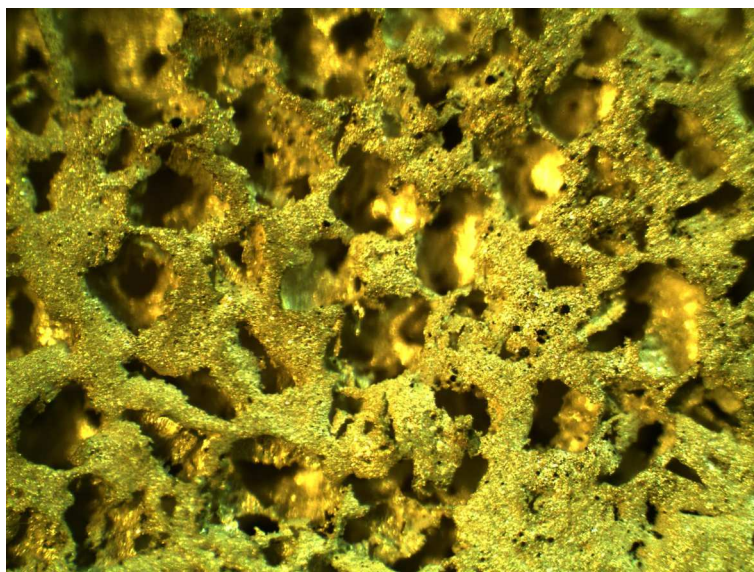


Рис. 6. Пористое серебро (связующее – парафин)

Список литературы

1. Калашников И. Е., Болотова Л. К., Чернышова Т. А. Трибологические характеристики литых алюмоматричных композиционных материалов, модифицированных наноразмерными тугоплавкими порошками // Российские нанотехнологии. 2011. Т. 6. № 1–2. С. 135–142.
2. Лякишев Н. П., Алымов М. И. Получение и физико-механические свойства объемных нанокристаллических материалов. М.: ЭЛИЗ. 2007. 148 с.
3. Turkevich J. Colloidal gold. Part I. Historical and preparative aspects morphology and structure // Gold Bull. 1985. V. 18. P. 86–91.
4. Крутяков Ю. А., Кудринский А. А. Синтез и свойства наночастиц серебра: достижения и перспективы // Успехи химии. 2008. Т. 77. № 3. С. 243–245.
5. Cynthia Jemima Swarnavalli G., Joseph V. e.a. A Simple Approach to the Synthesis of Hexagonal-Shaped Silver Nanoplates // Hindawi Publishing Corporation, Journal of Nanomaterials. Volume 2011. Article ID 825637. 5 pages. doi:10.1155/2011/825637.
6. Алымов М. И., Анкудинов А. Б., Трегубова И. В., Заблоцкий А. А. Синтез нанопорошков на основе вольфрама // Физика и химия обработки материалов. 2005. № 6. С. 81–82.

References

1. Kalachnikov I. Ye., Bolotova L. K., Tchernychova T. A. Tribologiticheskie kharakteristiki litykh alioumomatritchnykh kompozitsionnykh materialov, modifitsirovannykh nanorazmernymi tougoplavkimi porochkami // Rossiiskie nanotekhnologii. 2011. T. 6. № 1–2. S. 135–142.
2. Liakichev N. P., Alymov M. I. Poloutchenie i fiziko-mekhaniticheskie svoistva obemnykh nanokristalliticheskikh materialov. M.: ELIZ. 2007.148S.
3. Turkevich J. Colloidal gold. Part I. Historical and preparative aspects morphology and structure // Gold Bull. 1985. V. 18. P. 86–91.
4. Kroutiakov Iou. A., Koudrinski A. A. Sintez i svoistva nanotchastits serebra: dostijenia i perspektivy // Ouspekhi khimii. 2008. T. 77. № 3. S. 243–245.

5. Cynthia Jemima Swarnavalli G., Josseph V. e. a. A Simple Approach to the Synthesis of Hexagonal-Shaped Silver Nanoplates // Hindawi Publishing Corporation, Journal of Nanomaterials. Volume 2011. Article ID 825637. 5 pages. doi:10.1155/2011/825637.

6. Alymov M. I., Ankoudinov A. B., Tregoubova I. V., Zablotski A. A. Sintez nanoporochkov na osnove vol'frama // Fizika i khimia obrabotki materialov. 2005. № 6. S. 81–82.

Статья поступила в редакцию 24.04.2013

УДК 66.011
ББК Л1.7

Игорь Евгеньевич Калашников

доктор технических наук,
Институт металлургии и материаловедения
им. А. А. Байкова Российской академии наук
(Москва, Россия), e-mail: kalash2605@mail.ru

Владимир Викторович Ковалевский

доктор геолого-минералогических наук,
Институт геологии Карельского научного центра
Российской академии наук (Петрозаводск, Россия), e-mail: kovalevs@krc.karelia.ru

Татьяна Александровна Чернышова

доктор технических наук, профессор,
Институт металлургии и материаловедения
им. А. А. Байкова Российской академии наук
(Москва, Россия), e-mail: chern@imet.ac.ru

Людмила Константиновна Болотова

научный сотрудник, Институт металлургии и материаловедения
им. А. А. Байкова Российской академии наук
(Москва, Россия), e-mail: l.bolotova@mail.ru

Композиционные материалы, упрочнённые модифицированными шунгитовыми породами и керамическими микрочастицами¹

Проведены исследования по выбору и совершенствованию технологии модифицирования и введения перспективных наполнителей для жидкофазного совмещения компонентов композиционных материалов (КМ). Представлены результаты исследований получения КМ функционального назначения на основе разработанной технологии армирования алюмоматричных КМ наномодифицированными шунгитовыми породами и керамическими микрочастицами. Методами рентгенофазового анализа, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, комбинированного рассеяния наноструктурированной шунгитовой породы оценено влияние модифицированных шунгитов на структуру и эксплуатационные характеристики КМ, выполняющих роль опор в процессах трения. Установлено, что при жидкофазном совмещении компонентов комплексное использование дискретных керамических частиц карбида кремния и углерода в виде частиц графита, нанотрубок или фуллеренов, полученных при модифицирующей обработке шунгитовых пород, позволило в 2–4 раза увеличить износостойкость и на 30–40 % снизить коэффициенты трения разработанных КМ для применения их в трибоузлах различных технических приложений.

Ключевые слова: композиционные материалы, алюминиевые сплавы, шунгитовые породы, модифицирование, износостойкость, коэффициент трения.

¹Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №11-08-00258-а и НШ-854.2012.3).

Igor Evgen'evich Kalashnikov

Doctor of Engineering Science,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: kalash2605@mail.ru

Vladimir Viktorovich Kovalevskiy

Doctor of Geology and Mineralogy,
Institute of Geology, Karelian Scientific Center,
Russian Academy of Sciences
(Petrozavodsk, Russia), e-mail: kovalevs@krc.karelia.ru

Tatyana Aleksandrovna Chernyshova

Doctor of Engineering Science, Professor,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: chern@imet.ac.ru

Lyudmila Konstantinovna Bolotova

Research Assistant,
Baykov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences
(Moscow, Russia), e-mail: l.bolotova@mal.ru

Composite Materials Reinforced with Modified Shungite Rocks and Ceramic Microparticles

The research on the selection and improvement of technology of modification and introduction of advanced fillers for a liquid phase of combining the components of composite materials (CM) was conducted. The paper presents the results of investigations of obtaining functional purpose CM on the basis of the developed technology of reinforcement of aluminomatrix CM by nanomodified shungite rock and ceramic particles. By methods of x-ray phase analysis, scanning electron microscopy, combined scattering of shungite rock nanostructure, the effect of modified shungites on the structure and operational characteristics of the CM performing the role of pillars in the processes of friction was estimated. The study has found that in the liquid-phase combination of components, integrated use of discrete ceramic particles of silicon carbide and carbon in the form of graphite particles, carbon nanotubes or fullerenes obtained by the modifying processing of shungite rocks results in 2–4 times wear resistance increase and 30–40 % reduction of friction coefficients in the developed composite materials, for their further use in various technical tribology applications.

Keywords: composite materials, aluminium alloys, shungite rock, modification, wear resistance, coefficient of friction.

Введение. В настоящее время успехи синтеза и дальнейшего практического применения дисперсно наполненных металломатричных композиционных материалов (КМ) в значительной степени определяются достижениями материаловедов в области создания и разработки новых перспективных упрочняющих наполнителей и модификаторов структуры [1; 4]. Введение в металломатричные КМ углерода, в том числе и в виде частиц графита, нанотрубок или фуллеренов [6; 7], оказывает влияние на структуру и функциональные свойства материалов (возрастает износостойкость, повышаются антифрикционные свойства КМ). Однако обычные методы для производства значительных объёмов углеродных нанотрубок требуют энергоёмких процессов и экстремальных условий синтеза, что затрудняет их внедрение в промышленных масштабах. Кроме того, в полной мере не изучены вопросы, касающиеся их потенциальной токсичности для людей и окружающей среды.

Таким образом, чтобы в полной мере воспользоваться преимуществами нанотрубчатых материалов, исследователи стремятся найти равнозначную замену синтезированным углеродным нанотрубкам. Одним из естественных материалов, содержащим нанотрубки, состоящие из гидроалюмосиликатов, является имоголит (*imogolite*). Этот гидроалюмосиликат – материал с общей формулой

$[Al_2O_3 \cdot SiO_2 \cdot 2H_2O]$ был найден в продуктах выветривания почвы, образовавшейся из вулканического пепла, в южной части острова Кюсю, Япония. Имголит, обладая уникальными физико-химическими свойствами, как ожидается, имеет потенциал применения в нанотехнологиях при производстве катализаторов, мембран и адсорбентов [8]. Другим, природным материалом, являющимся доступным сырьём для получения наноразмерных модифицирующих добавок при синтезе алюмоматричных КМ, является шунгит (Карелия, Россия) [3].

Перспективы использования наноструктурированных шунгитовых пород в промышленных наукоёмких технологиях определяются возможностью получения относительно дешёвых продуктов в достаточных промышленных объёмах; следовательно, необходимо снижать многофакторность задачи за счёт использования более совершенных методов модифицирования исходного сырья и его очистки. На сегодняшний момент в реализации этой задачи существует серьёзная проблема, обусловленная неоднородностью вещественно-структурных характеристик исходного природного сырья даже в пределах одного месторождения. Это наблюдалось в исследованиях при использовании породы, добываемой ООО НПК «Карбон-шунгит» различных месторождений [2].

Поскольку наноструктурирование обусловлено и сопровождается образованием новых компонент – нановолокнистых карбидов кремния, наноразмерных полых углеродных частиц и волокон (гиперфуллереновых структур), а также наночастиц карбидов металлов, инкапсулированных в углеродные оболочки, проведено дальнейшее исследование модифицированной шунгитовой породы, содержащей микро- и наноразмерные частицы.

Методы исследования модифицированной шунгитовой породы. Для исследования модифицированной шунгитовой породы использовались рентгенофазовый анализ – РФА (*ARL X'TRA* с *CCD* детектором), сканирующая электронная микроскопия – СЭМ (*VEGA 11 LSH, TESCAN* с энергодисперсионным анализатором *INCA Energy, OXFORD Instruments*), просвечивающая электронная микроскопия с микродифракцией – ПЭМ (*ЭМ-125*), и комбинационное рассеяние – КР (*Nicolet Almega XR, Ar 532 nm laser*).

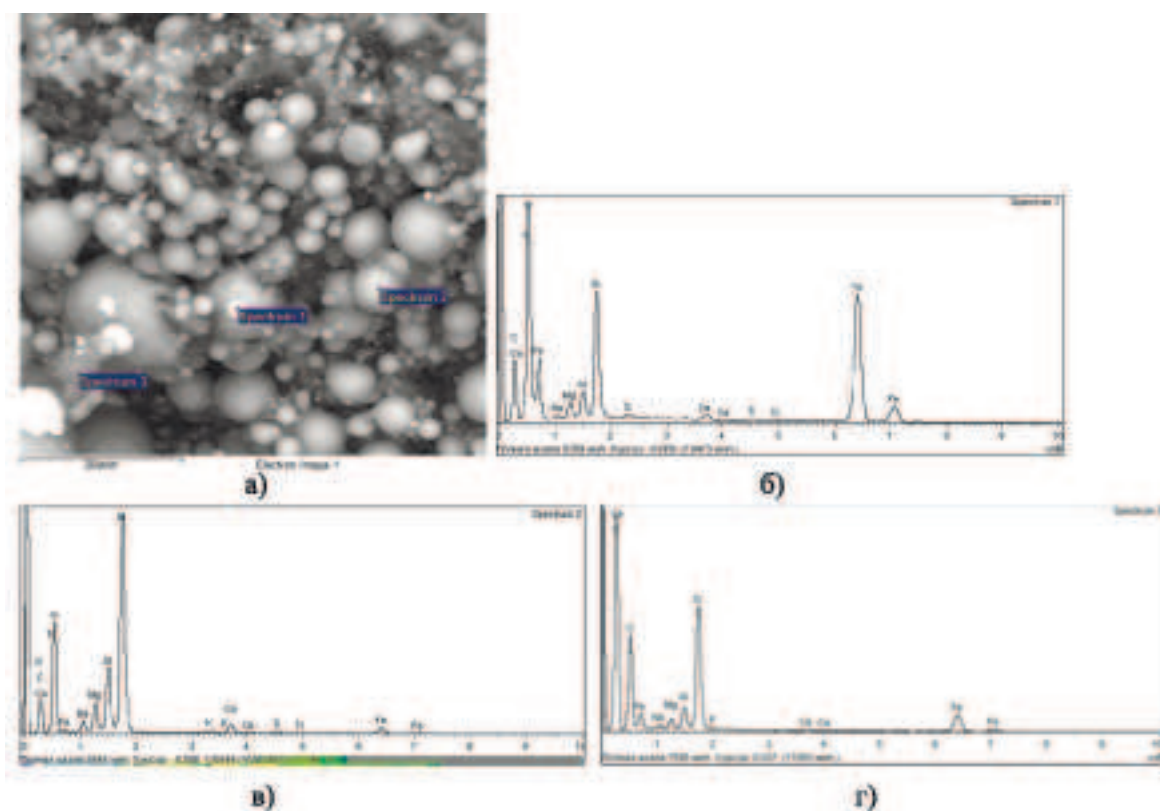


Рис. 1. Сканирующее электронномикроскопическое изображение во вторичных электронах модифицированной шунгитовой породы, типичные спектры, полученные с различных компонент образца и соответствующие им элементные составы

Номер спектра	Химический элемент											
	C	O	Na	Mg	Al	Si	P	S	K	Ca	Ti	Fe
1	28,7	34,8	0,40	0,98	1,32	6,14	-	0,16	-	0,37	0,20	26,95
2	31,2	39,2	1,46	2,53	5,06	16,72	-	-	0,25	1,01	0,36	2,16
3	61,8	27,4	0,30	0,46	0,95	5,06	0,07	-	-	0,16	-	3,85

Модифицированная шунгитовая порода по снимкам растровой электронной микроскопии характеризуется визуально наличием нескольких компонент. В качестве первой компоненты можно выделить более светлые по контрасту области с более высокой отражающей и рассеивающей способностью электронов и имеющие более высокую средневзвешенную атомную плотность. По результатам энергодисперсионного анализа эти области содержат повышенную концентрацию железа (рис. 1а, 1б). Второй компонентой модифицированной шунгитовой породы являются сферы размерами от 50 нм до 10 мкм, состоящие из стекла сложной структурно-элементной композиции, которая близка по составу к слюдам, присутствовавшим в исходной шунгитовой породе (рис. 1а, 1в). К третьей компоненте можно отнести бесформенные образования по границам сфер с повышенным содержанием углерода (рис. 1а, 1г).

При использовании просвечивающей электронной микроскопии при больших увеличениях выявляются прозрачные сферические частицы с однородным контрастом размерами менее 100 нм. Микродифракционные картины от этих частиц не содержат кристаллических максимумов, что свидетельствует об их аморфном (стеклообразном) состоянии. Также эти стеклянные наносферы наблюдаются в совокупности с фуллероидным углеродом – полыми углеродными сферическими частицами, содержащими в ряде случаев металлы – чёрные, непрозрачные частицы в углеродной массе. Модифицированная шунгитовая порода, используемая в качестве наполнителя и модификатора алюмоматричных композиционных материалов, представляет собой сложную углерод-минеральную композицию. Для оценки содержания гиперфуллереновых структур и волокнистых карбидов кремния в модифицированной породе использовалась дериватография и рентгенофазовый анализ. Содержание углерода определялось с помощью дериватографии по термогравиметрическим кривым окисления углерода (рис. 2) и составило 35,6 вес. % от массы взятого образца.

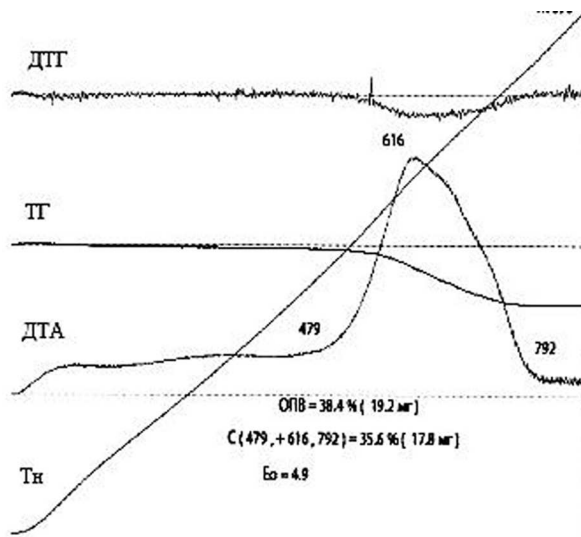


Рис. 2. Дериватограмма модифицированной шунгитовой породы

На рис. 2: Тн – изменение температуры; ДТА – разница температуры между эталонным и опытным (с образцом) тиглями (от 479 до 792 °С наблюдается окисление углерода с повышением температуры опытного тигля); ТГ – термогравиметрическая кривая – абсолютное изменение веса опытного тигля; ДТГ – дифференциальная термогравиметрическая кривая (относительное изменение веса между опытным и эталонным тиглями при конкретной температуре).

Для определения фазового состава модифицированной шунгитовой породы использовался рентгенофазовый анализ – РФА (ARL X'TRA с CCD детектором). На рис. 3 хорошо различим

углерод – относительно широкий пик в районе 26° ; карбид кремния – основной пик $\sim 36^\circ$; силициды железа $\sim 45^\circ$; а также кварц, кристобалит и др. Расчёт содержания аморфной составляющей и корректировка содержания кристаллических фаз производились по методике, предлагаемой с программным обеспечением *Siroquant* на дифрактометре *ARL X'TRA*. В образец, содержащий аморфную фазу, добавлялся эталон – оксид цинка (ZnO) в количестве 10 % от веса образца. Полученная смесь тщательно перемешивалась и снималась в стандартном режиме на дифрактометре. Взятое количество эталона являлось репером, по которому рассчитывалось процентное содержание всех фаз (табл. 1).

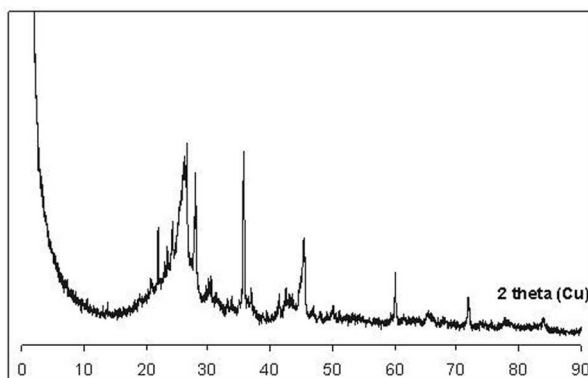


Рис. 3. Рентгенодифракционный спектр модифицированной шунгитовой породы

Таблица 1

Фазовый состав модифицированной шунгитовой породы

Фаза	Процентное содержание
Некристаллический C*	36
Кварц	3,5
Кристобалит	2
Карбид кремния (SiC)	29
Силицид железа (Fe_3Si)	23,5
Пироксен **	6

* Углерод определён по данным дериватографии

** В качестве модельной фазы задавался (Mg-Fe-Ca) пироксен, как наиболее близкий по положению и интенсивности дифракционных максимумов.

Спектры комбинационного рассеяния шунгитовых пород снимались на спектрометре *Nicolet Almega XR* с использованием Ar лазера с длиной волны 532 nm. Получены полные спектры комбинационного рассеяния углерода в модифицированной шунгитовой породе и, для сравнения, углерода той же породы в исходном состоянии. На кривых хорошо выделяются спектры двух порядков: первого – в области $900\text{--}2000\text{ см}^{-1}$, и второго – $2300\text{--}3500\text{ см}^{-1}$. С помощью прилагаемого программного обеспечения OMNIC 8.2.403 от *Thermo Fisher Scientific Inc.* проведён анализ спектра углерода первого порядка для исходной и модифицированной шунгитовой породы. Спектры первого порядка углерода в исходном состоянии содержат 5 пиков (табл. 2). Согласно литературным данным, первый и третий пики отмечаются только в слабо упорядоченных материалах и могут быть связаны с наличием разупорядоченных областей, имеющих только ближний порядок с изменяющейся координацией атомов углерода от sp^2 гибридизации (графитоподобной) до sp^3 (алмазоподобной). Вторым (D-линия, „Disorder“) и пятый пики характерны для некристаллических углеродов и связаны с наличием краевых и внутрислоевых дефектов графеновых слоёв. Четвертый пик (G-линия, „Graphite“) определяется внутрислоевыми продольными движениями связанных пар sp^2 углеродных атомов. При этом из отношения максимальных ($I_{\text{пик}}$) или интегральных ($I_{\text{интерг}}$) интенсивностей G и D пиков (табл. 3) можно оценить размеры упорядоченных областей в плоскости графеновых слоёв по формуле: $L_a \sim 4.4\text{ нм} \times I(G)/I(D)$.

Данные по комбинационному рассеянию подтверждают результаты электронномикроскопических исследований, в частности, полученные ранее размеры упорядоченных областей в плоскости графенового слоя для углерода исходной шунгитовой породы (табл. 2). Углеродная компонента модифицированной породы фактически не содержит аморфного углерода (1 и 3 пики отсутствуют), при этом размеры упорядоченных областей увеличиваются до 20 нм, что согласуется с образованием полых углеродных структур размерами порядка 100 нм.

Таблица 2

Параметры комбинационного спектра углерода первого порядка для исходной и модифицированной шунгитовой породы

Шунгитовая порода	Параметры пиков	Пики комбинационного рассеяния					La (нм)
		1	2 (D)	3	4 (G)	5	
Исходная	Положение, см ⁻¹	1203	1342	1497	1579	1608	3,1
	Высота ($I_{\text{пик}}$)	4,6	114,9	3,6	80,4	28	
	Полуширина	197	60	72	43	28	
	Площадь ($I_{\text{интерг}}$)	1417	10784	408	5418	1250	
Модифицированная	Положение, см ⁻¹	1192	1346	1469	1577	1618	20,5
	Высота ($I_{\text{пик}}$)	0,02	33,3	0	154,8	6,9	
	Полуширина	198	39,9	46,2	27,7	11,3	
	Площадь ($I_{\text{интерг}}$)	5,7	2081	0	6477	123	

* Размеры упорядоченных областей в плоскости графенового слоя вычислены по отношению пиковых интенсивностей.

Таким образом, проведённые исследования свидетельствуют о чрезвычайно сложном составе и строении исходных и модифицированных шунгитовых пород не только как наполнителей и модификаторов в целом, но также и отдельных их составляющих. Требуются дальнейшие уточнения результатов по рентгеновскому фазовому анализу, поскольку на данный момент не учтены некристаллические составляющие помимо углерода (в районе 30 и 36 град. размытые максимумы, а также ряд мелких неидентифицированных кристаллических пиков).

Также требуют уточнения результаты по сферическим частицам. С одной стороны, сферические наночастицы представлены некристаллическим веществом – стеклом (по данным электронной микродифракции, не дают кристаллических рефлексов), а макрочастицы не просвечиваются электронным пучком – и с них невозможно получить никакой информации. С другой стороны, XRD спектры содержат максимумы кристаллической фазы (которая условно интерпретирована как пироксен и имеет близкий по микроанализу элементный состав). Возможно, сферические макрочастицы имеют сложное строение – аморфную оболочку (быстрое охлаждение на воздухе) и закристаллизованную центральную часть (более медленное охлаждение, способствующее кристаллизации). В отличие от них наноразмерные частицы могут охладиться быстро и полностью имеют стеклообразное состояние.

Изготовление и исследование полиармированных КМ. Исследовано применение природных шунгитов в наноструктурированном состоянии для изготовления полиармированных КМ. В качестве исходной использовалась порода, добываемая ООО НПК «Карбон-шунгит» (ТУ 88-003-90).

Исследовали влияние добавок модифицированной шунгитовой породы (МШП) и дискретного керамического наполнителя SiC на состав, структуру и триботехнические свойства алюмоматричных дисперсно упрочнённых КМ. Для изготовления полиармированных КМ предложен способ введения МШП в алюминиевые расплавы методом механического замешивания с использованием носителей – металлических порошков Al, Ti, Ni. Схема способа закрепления различных наноразмерных объектов на порошке носителе (в данном случае порошок Ti) показана на рис. 4. Здесь же показаны данные МРСА металлических порошков при использовании их в качестве носителей для введения в расплавы наномодифицированной шунгитовой породы. Наличие углерода и кремния (основных составляющих шунгитовых пород) указывает на возможность внедрять и закреплять модифицированную шунгитовую породу в объёме металлического порошка для дальнейшего введения в алюминиевые расплавы методом механического замешивания.

Для уменьшения доли матрицы в поверхности трения и улучшения износостойкости изготовлены полиармированные КМ с наполнителями в виде дискретных частиц SiC (40 мкм) в количестве 5 масс. %, исходной или модифицированной шунгитовой породы (2 масс. %). В качестве матриц



Рис. 4. Схема способа закрепления наноразмерных объектов на различных порошках носителях для последующего введения в расплав и данные МРСА после механического легирования в планетарной шаровой мельнице

№	Носитель	C	Si	Ti	Ni	Al
1	Ti+МШП	10,49	2,08	87,43	-	
2	Al+(Ti+МШП)	8,14	1,30	67,74	-	22,82
3	Ni+МШП	17,79	3,31	-	78,90	-
4	Al+(Ni+МШП)	9,43	2,63	-	68,14	19,80

использовали алюминий А99 и сплав АК12М2МгН. В табл. 3 представлены составы образцов и дана оценка процесса введения шунгитовых наполнителей.

Таблица 3

Составы исследуемых образцов и оценка введения шунгитовых пород в расплавы

№ обр	Матрица		Вариант обработки	Наполнители		Оценка введения
	A99	AK12M2MgH		SiC, масс.%	Шунгит, масс.%	
1	+					
2	+			5		+
3	+		МШП	5	2, МШП	+
4		+				
5		+	МШП	5	2, МШП	+
6	+		Исх. ШП		2, Исх. ШП	-
7		+	Исх. ШП		2, Исх. ШП	-

* Исходная и модифицированная шунгитовая порода введена в расплав на порошке носителе Al

Образцы из матричного сплава и КМ испытывали в условиях сухого трения скольжения на установках *CETR UMT Multi – Specimen Test System* и МТУ-01 (ТУ 4271-001-29034600-2004) по схеме осевого нагружения: втулка (контртело) из стали 45 (HRC>45) против шайбы (КМ) с коэффициентом перекрытия 1. Определяли интенсивность изнашивания и коэффициенты трения изготовленных образцов КМ, матричных сплавов и контртела согласно [5]. Осевую нагрузку изменяли в пределах 18–60 Н (от 0,2 до 0,7 МПа); скорость вращения втулки и длительность испытаний при каждой нагрузке составляли 540 об/мин (0,37 м/с) и 10 мин соответственно. Испытания проведены на воздухе при температуре 20 ± 1 °С и влажности 60 ± 4 %. Момент трения фиксировали с помощью датчика, соответствующего данной схеме нагружения.

Из полученных данных следует (рис. 5), что армирование алюминия дискретными частицами SiC увеличивает его диапазон трибонагружения до 60 Н (образец №2), а дополнительное введение в структуру 2 масс. Процент модифицированной шунгитовой породы (образец № 3) позволяет в исследованном диапазоне трибонагружения уменьшить интенсивность изнашивания на 30–40 % и практически исключить износ контртела. Ещё более значимые результаты достигнуты при полиармировании промышленного алюминиевого сплава АК12М2МгН. Так, интенсивность изнашивания полиармированного КМ (образец № 5) во всем диапазоне нагрузок уменьшена в 4 раза по сравнению

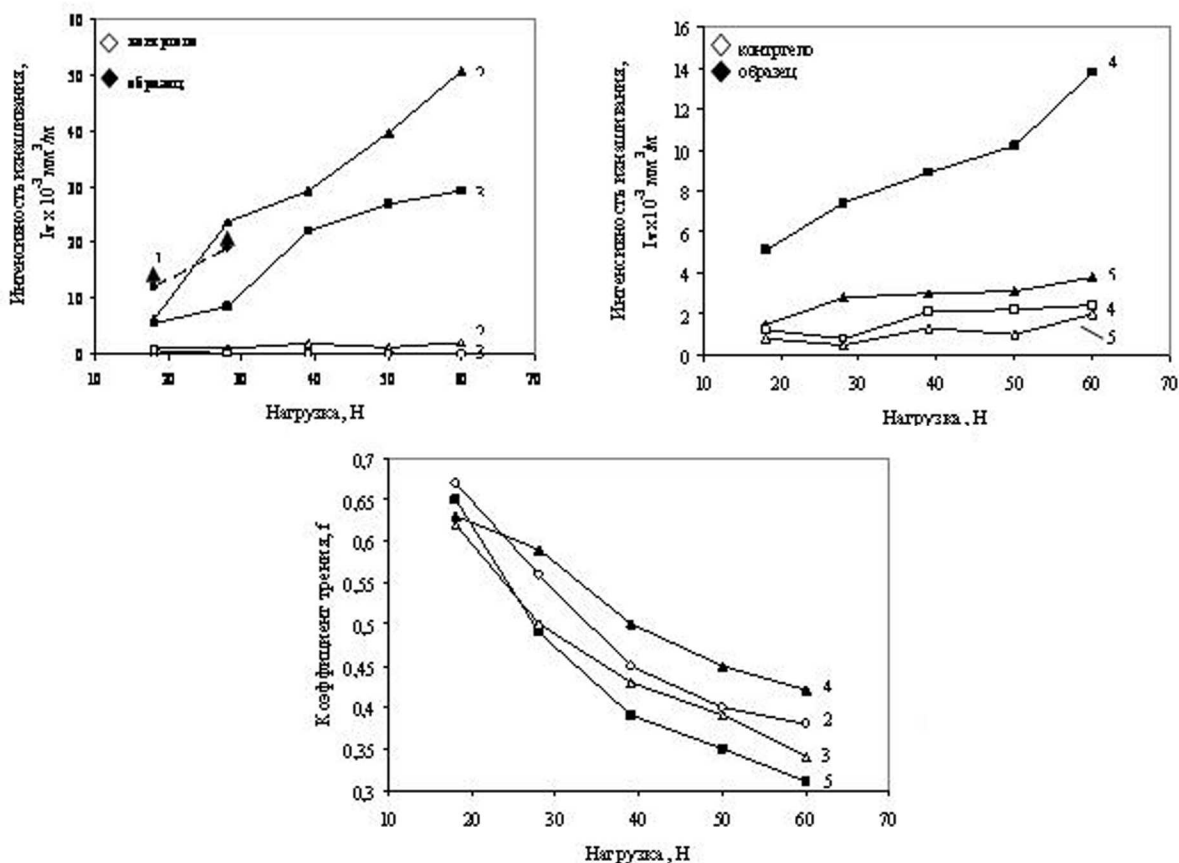


Рис. 5. Интенсивность изнашивания (а, б) и коэффициенты трения (в) в зависимости от нагрузки. Состав образцов: 1 – А99, 2 – А99 + 5 масс. % SiC; 3 – А99 + 5 масс. % SiC + 2 масс. % МШП; 4 – АК12М2МгН; 5 – АК12М2МгН + 5 масс. % SiC + 2 масс. % МШП. Стрелкой показан интервал нагрузок, при которых образец из сплава А99 характеризовался нестабильными моментами трения вследствие задира

с матричным сплавом, в 8 раз по сравнению с КМ на основе сплава А99, армированного 5 масс. % SiC и 2 масс. % модифицированной шунгитовой породы.

Износ контртела при испытаниях полиармированного сплава АК12М2МгН в среднем был в 1,5 раза ниже, чем при испытании матричного сплава, и характеризовался стабильными значениями во всем интервале трибонагружения. Защитное воздействие твердых керамических частиц SiC микронных размеров и шунгитовых наполнителей объясняется уменьшением доли матричной фазы на поверхности трения, что препятствует износу КМ. Кроме того, шунгитовые наполнители, выполняя роль сухой смазки, уменьшают коэффициенты трения, что особенно заметно при возрастании нагрузки.

Следует отметить, что представленные данные получены на образцах синтезированных КМ, полученных при отборе проб малого объема композиционного расплава непосредственно сразу после перемешивания. После кристаллизации расплава образцы подвергались отбраковке по критериям наличия армирующих компонентов, пористости и усадочных раковин (визуальный и оптический контроль). Данные значения интенсивности изнашивания и коэффициентов трения служат ориентиром перспективности КМ данного класса, к которым необходимо стремиться без отбраковки несовершенных образцов при осуществлении технологического процесса, который должен осуществляться в производственных условиях, т. е. при переливе всего объема композиционного расплава в изложницу для получения отливки-полуфабриката или изделия для последующей механической обработки.

Заключение. Таким образом, при жидкофазном совмещении компонентов комплексное использование дискретных керамических частиц карбида кремния и углерода в виде частиц графита,

нанотрубок или фуллеренов, полученных при модифицирующей обработке шунгитовых пород, позволяет значительно увеличить износостойкость и снизить коэффициенты трения разрабатываемых КМ для применения их в трибоузлах различных технических приложений. Однако требуется дальнейшее совершенствование метода модифицирующей обработки исходной шунгитовой породы и технологии получения объёмных КМ. Обеспечение равномерной дисперсии МШП и наполнителей микронного размера остаётся главной задачей при получении разрабатываемых КМ.

Авторы благодарят ООО «Шунгитон» за предоставление наноструктурированной шунгитовой породы.

Список литературы

1. Калашников И. Е. Исследование структуры и свойств алюмоматричных композиционных материалов, модифицированных наноразмерными частицами // Заготовительные производства в машиностроении. 2011. № 8. С. 27–36.
2. Калашников И. Е. Композиционные материалы с наполнителями из шунгитовых пород / И. Е. Калашников, В. В. Ковалевский, Т. А. Чернышова, Л. К. Болотова // Металлы. 2010. №6. С. 85–95.
3. Зырянов В. В., Ковалевский В. В., Петров С. А., Матвиенко А. А. Наноразмерные материалы из шунгитовых пород // Неорганические материалы. 2012. Т. 48. № 11. С. 1234–1242.
4. Трегубова И. В., Алымов М. И., Анкудинов А. Б., Зеленский В. А., Тихомиров С. А. О закономерностях и условиях синтеза металлических нанопорошков. Цветные металлы. 2011. № 5. С. 47–52.
5. Чичинадзе А. В. Трение, износ и смазка (трибология и триботехника) / А. В. Чичинадзе, Э. М. Берлинер, Э. Д. Браун [и др.]. М.: Машиностроение, 2003. 469 с.
6. Bakshi S. R. Carbon nanotube reinforced metal matrix composites – a review / S. R. Bakshi, D. Lahiri, A. Agarwal // International Materials Reviews. 2010. Vol. 55. № 1. P. 41–64.
7. Esawi A. M. K. The influence of carbon nanotube (CNT) morphology and diameter on the processing and properties of CNT-reinforced aluminium composites / A. M. K. Esawi, K. Morsi, A. Sayed, M. Taher, S. Lanka // Composites: Part A. Vol. 42. 2011. P. 234–243.
8. Yah W. O., Yamamoto K., Jiravanichanun N., Otsuka H., Takahara A. Imogolite: Multifaceted Green Materials // Materials. 2010. №3. P. 1709–1745.

References

1. Kalashnikov I. Ye. Issledovaniye struktury i svoystv alyumomatrichnykh kompozitsionnykh materialov, modifitsirovannykh nanorazmernymi chastitsami // Zagotovitelnye proizvodstva v mashinostroyenii. 2011. № 8. S. 27–36.
2. Kalashnikov I. E. Kompozitsionnye materialy s napolnitelyami iz shungitovykh porod / I. Ye. Kalashnikov, V. V. Kovalevsky, T. A. Chernyshova, L.K. Bolotova // Metally. 2010. №6. S. 85–95.
3. Zyryanov V. V., Kovalevsky V. V., Petrov S. A., Matviyenko A. A. Nanorazmernye materialy iz shungitovykh porod // Neorganicheskiye materialy. 2012. T. 48, № 11, S. 1234–1242.
4. Tregubova I. V., Alymov M. I., Ankudinov A. B., Zelensky V. A., Tikhomirov S. A. O zakonornostyakh i usloviyakh sinteza metallicheskih nanoporoshkov. Tsvetnye metally. 2011. № 5. S. 47–52.
5. Chichinadze A. V. Treniye, iznos i smazka (tribologiya i tribotekhnika) / A. V. Chichinadze, E. M. Berliner, E. D. Brakn [i dr.]. M.: Mashinostroyeniye, 2003. 469 s.

6. Bakshi, S. R. Carbon nanotube reinforced metal matrix composites — a review / S. R. Bakshi, D. Lahiri, A. Agarwal // International Materials Reviews. 2010. Vol. 55. № 1. P. 41–64.
7. Esawi A. M. K. The influence of carbon nanotube (CNT) morphology and diameter on the processing and properties of CNT-reinforced aluminium composites / A. M. K. Esawi, K. Morsi , A. Sayed , M. Taher , S. Lanka // Composites: Part A. Vol. 42. 2011. P. 234–243.
8. Yah W. O., Yamamoto K., Jiravanichanun N., Otsuka H., Takahara A. Imogolite: Multifaceted Green Materials // Materials. 2010. №3. P. 1709–1745.

Статья поступила в редакцию 25.04.2013

УДК 539.219.3
ББК В375.6

Анна Николаевна Корчагина

аспирант,

*Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева Сибирского отделения
Российской академии наук (Новосибирск, Россия), e-mail: anchouse@ngs.ru*

Лев Алексеевич Мерзиевский,

доктор физико-математических наук, профессор,

*Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева Сибирского отделения
Российской академии наук (Новосибирск, Россия), e-mail: merzh@hydro.nsc.ru*

Численное моделирование диффузионных процессов в фрактальных средах¹

Для моделирования аномальной диффузии используется аппарат производных дробного порядка. Рассмотрены различные определения дробных производных, проведено сравнение численных решений ряда задач диффузии различными численными методами. Указаны наиболее перспективные определения и методы численного решения.

Ключевые слова: аномальная диффузия, дробные производные, фрактальная среда.

Anna Nikolaevna Korchagina

Postgraduate Student,

*Laurent'ev Institute of Hydrodynamics,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Novosibirsk, Russia), e-mail: anchouse@ngs.ru*

Lev Alekseevich Merzhievskiy

*Doctor of Physics and Mathematics, Professor,
Laurent'yev Institute of Hydrodynamics,*

*Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
(Novosibirsk, Russia), e-mail: merzh@hydro.nsc.ru*

Numerical Modeling of Diffusive Processes in Fractal Media

Derivatives of a fractional order are used for modeling of anomalous diffusion. Various definitions of fractional derivatives are considered, comparison of numerical solutions of a number of problems of diffusion by various numerical methods is carried out. The most perspective definitions and methods of the numerical decision are specified.

Keywords: anomalous diffusion, fractional derivatives, fractal media.

Введение. Классическое описание процессов диффузии базируется на законах Фика. Следствием из второго закона является классическое дифференциальное уравнение диффузии. В последние годы сформировался повышенный интерес к исследованию диффузионных процессов, не подчиняющихся законам Фика и не описывающихся классическим уравнением. Явления переноса, не укладывающиеся в классические представления, наблюдаются, например, в турбулентных потоках, в аморфных полупроводниках, высокоэнергетической плазме, пористых средах. Эти явления получили название «аномальная диффузия». Довольно полное представление о состоянии развития исследований аномальной диффузии применительно к различным задачам физики дано, например, в [1; 2]. Одним из проявлений «аномальности» является диффузия в гетерогенных, в частности во фрактальных, средах.

Для описания таких процессов используется модифицированный закон Фика [3], что требует привлечения математического аппарата дробного интегро-дифференциального исчисления [4]. В классическое уравнение диффузии вводятся производные дробного порядка как по пространству, так и по времени. Возникают начально-краевые задачи для дифференциальных уравнений с дробными производными. Развиваются аналитические методы решения задач, однако наибольшее распространение получили численные методы [5–10]. Это связано, в первую очередь, с тем, что аналитические решения удается получить только в редких частных случаях.

¹Работа выполнялась при поддержке Интеграционного проекта СО РАН № 64 и гранта РФФИ № 12-01-00726-а.

Одна из проблем, возникающих при использовании дробных производных, заключается в том, что не существует их однозначного определения. Численные методы решения задач для уравнений с дробными производными привязаны к виду выбранной производной, поэтому возникает необходимость анализа и сравнения результатов, полученных при использовании разных определений и численных методов. Такое сравнение проводилось в [6] на примере задачи о распространении теплового импульса.

В данной работе рассмотрены определения дробных производных Римана-Лиувилля, Капуто и Грюнвальда-Летникова и соответствующие численные методы. Проведено сравнение численных решений ряда задач, полученных различными методами для разных типов дробных производных. Анализ результатов позволил выделить определения и методы, наиболее перспективные с точки зрения адекватности описания реальных процессов диффузии во фрактальных средах.

Определения дробных производных. Существует ряд различных подходов к определению понятия производной дробного порядка, отражающих особенности становления дробного исчисления. Наиболее широким и часто используемым является определение Римана-Лиувилля, основанное на обобщении уравнения Абеля [4]:

$$D_x^\alpha u(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x \frac{u(\xi) d\xi}{(x-\xi)^{\alpha-m+1}}, \quad x > a, \quad 0 \leq m-1 < \alpha \leq m. \quad (1)$$

Здесь использованы стандартные обозначения оператора дифференцирования и Г-функции.

Упрощением данного определения является определение Капуто, которое применимо для достаточно гладких функций, таких что операция дифференцирования может быть внесена под знак интеграла:

$$D_x^\alpha u(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^x (x-\xi)^{m-\alpha-1} u^{(m)}(\xi) d\xi, \quad x > a, \quad 0 \leq m-1 < \alpha \leq m. \quad (2)$$

Операция дробного дифференцирования Римана-Лиувилля обратна операции дробного интегрирования. Дробная производная в форме Капуто этим свойством не обладает. Развивая идею Лиувилля, А. Грюнвальд и независимо – А. В. Летников ввели понятие дробной производной, как предела разностных отношений. Согласно определению Грюнвальда-Летникова, правая дробная производная определяется выражением

$$\frac{\partial^\alpha u(x)}{\partial x^\alpha} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta_h^\alpha u(x)}{h^\alpha}, \quad \Delta_h^\alpha u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k^\alpha u(x - (k-1)h). \quad (3)$$

Биномиальные коэффициенты имеют вид

$$\omega_k^\alpha = (-1)^k \binom{\alpha}{k} = (-1)^k \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\alpha-k+1)} = \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(k+1)}. \quad (4)$$

Если $u(x)$ непрерывна, а du/dx интегрируема на отрезке $[a, x]$, то производные Римана-Лиувилля, Капуто и Грюнвальда-Летникова существуют и совпадают.

Мы не будем останавливаться на других определениях производной дробного порядка, поскольку в данной работе они не используются. Анализ применимости и адекватности различных определений и соответствующих им методов численного решения был проведен в [6].

Уравнение диффузии с дробными производными. Для вывода уравнения диффузии с дробными производными используется соответствующий вариант модифицированного закона Фика [3], тогда оно принимает вид (здесь $K_0 = const$):

$$\begin{aligned} D_t^\gamma u(x, t) &= K_0 D_x^\alpha u(x, t), \\ D_x^\alpha &= \frac{1}{2}(1+\beta) \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} + \frac{1}{2}(1-\beta) \frac{\partial^\alpha}{\partial (-x)^\alpha}, \\ 0 < \gamma &\leq 2, 1 \leq \alpha \leq 2, -1 \leq \beta \leq 1. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь α – дробный порядок дифференцирования по пространству; β – «коэффициент скошенности», который характеризует направление переноса вещества при $\alpha \rightarrow 1$; γ – дробный порядок

дифференцирования по времени. Дробная производная по пространству возникает в случае фрактальности среды, параметр дифференцирования зависит от хаусдорфовой размерности фрактала. Дробная производная по времени возникает при учёте нелокальности по времени, которая связана с прилипанием диффундирующих атомов к стенкам пор [7]. При $\alpha = 2$ получаем уравнение классической диффузии. Случай $1 < \alpha < 2$ отвечает «быстрой» диффузии (super-diffusion), когда частицы распространяются быстрее, чем предсказывает классическая модель. И случай $\alpha = 1$ – это классический перенос. Для коэффициента α рассматриваются следующие области значений:

- $0 < \gamma < 1$ – «медленная» диффузия (slow diffusion, sub-diffusion);
- $1 < \gamma < 2$ – «быстрая» диффузия (fast diffusion, hyper-diffusion);
- $\gamma = 1$ – обычная, классическая диффузия.

В режиме субдиффузии скорость роста среднеквадратичного смещения частиц монотонно убывает со временем, тогда как в режиме супердиффузии скорость со временем возрастает [8]. При $\gamma \rightarrow 1$ рассматриваемое уравнение переходит в классическое уравнение диффузии с экспоненциальным затуханием решения на бесконечности. При $\gamma \rightarrow 2$ получаем волновое уравнение. Как варианты, могут рассматриваться уравнения, в которых только одна из производных заменяется на дробную.

Методы численного решения. Методы численной аппроксимации дробных производных напрямую связаны с их определениями. Детальный анализ применимости разных методов аппроксимации и существующих разностных схем решения уравнений с дробными производными осуществлен в [6; 9; 10]. Поясним основные идеи использованных методов на некоторых примерах. Для упрощения анализа результатов по разным методам рассмотрим случай, когда в уравнения вводится дробная производная только по времени. Представим уравнение теплопроводности в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^{\gamma-1} u(x, t)}{\partial t^{\gamma-1}} \right) = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \tag{6}$$

$1 < \gamma < 2$. Этому уравнению сопоставим следующий разностный аналог:

$$\frac{\gamma^{-1} L u_i^{n+1} - \gamma^{-1} L u_i^n}{\tau} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{h^2}, \tag{7}$$

где $\gamma^{-1} L$ – численная аппроксимация оператора дробной производной порядка $\gamma - 1$. Воспользуемся определением производной дробного порядка в смысле Римана-Лиувилля. Представим оператор $\gamma^{-1} L$ в виде конечной суммы интегралов по отрезкам $t_k \leq t \leq t_{k+1}$, расположенным между узлами расчётной сетки:

$$\gamma^{-1} L u_i^n = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \frac{d}{dt_n} \left[\sum_{k=0}^{n-2} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{u(\xi) d\xi}{(t_n - \xi)^{\gamma-1}} + \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{u(\xi) d\xi}{(t_n - \xi)^{\gamma-1}} \right], \quad t_k = k\tau \tag{8}$$

Функция $u(\xi)$ на отрезках $t_k \leq t \leq t_{k+1}$ аппроксимируется линейно:

$$u(\xi) = A_i^k \xi + B_i^k. \tag{9}$$

Тогда, вычисляя аналитически интегралы в скобках, получаем выражение для оператора $\gamma^{-1} L$:

$$\gamma^{-1} L \begin{pmatrix} u_i^0 \\ u_i^1 \\ u_i^2 \\ u_i^3 \\ \dots \\ u_i^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \theta_1 & \lambda_0 & 0 & 0 & \dots \\ \theta_2 & \lambda_1 & \lambda_0 & 0 & \dots \\ \theta_3 & \lambda_2 & \lambda_1 & \lambda_0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \theta_n & \lambda_{n-1} & \lambda_{n-2} & \dots & \lambda_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i^0 \\ u_i^1 \\ u_i^2 \\ u_i^3 \\ \dots \\ u_i^n \end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$\theta_0 = \frac{1}{\tau^{\gamma-1} \Gamma(2-\gamma)}, \quad \theta_k = \theta_0 \left(k^{1-\gamma} - \frac{k^{2-\gamma} - (k-1)^{2-\gamma}}{2-\gamma} \right), \quad k = 1, 2, \dots, T.$$

$$\lambda_0 = \frac{1}{\tau^{\gamma-1}(2-\gamma)\Gamma(2-\gamma)}, \quad \lambda_k = \lambda_0 [(k+1)^{2-\gamma} - 2k^{2-\gamma} + (k-1)^{2-\gamma}], \quad k = 1, 2, \dots, T.$$

Выделим из левой части уравнения слагаемое, относящееся к слою $n+1$:

$$\frac{u_i^{n+1}}{\tau^{\gamma-1}(2-\gamma)\Gamma(2-\gamma)} + \frac{\gamma^{-1}\tilde{L}u_i^{n+1} - \gamma^{-1}Lu_i^n}{\tau} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{h^2}, \quad (11)$$

где $\gamma^{-1}\tilde{L}$ – то же самое, что и $\gamma^{-1}L$, но с коэффициентом λ_0 . Теперь уравнение можно представить в виде:

$$Au_{i+1}^{n+1} - Cu_i^{n+1} + Bu_{i-1}^{n+1} + D = 0, \quad A = B = \frac{1}{h^2},$$

$$C = \frac{2}{h^2} + \lambda_0, \quad D = \frac{\gamma^{-1}Lu_i^n - \gamma^{-1}\tilde{L}u_i^{n+1}}{\tau} \quad (12)$$

и решить методом трехточечной прогонки:

$$u_i^n = u_{i+1}^n a_{i+1} + b_{i+1}, \quad a_{i+1} = \frac{A}{C - Ba_i}, \quad b_{i+1} = \frac{D + Bb_i}{C - Ba_i}. \quad (13)$$

Коэффициенты a_1 , b_1 и u_N находятся из краевых условий. Порядок аппроксимации данной схемы: $O(\tau + h^2)$.

Для производной Капуто оператор $\gamma^{-1}L$ представим в следующем виде:

$$\gamma^{-1}Lu_i^n = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \sum_{k=0}^{n-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} (t_n - \xi)^{1-\gamma} \frac{du(\xi)}{d\xi} d\xi, \quad t_k = k\tau. \quad (14)$$

Как и раньше, аппроксимируем искомую функцию линейной на каждом из отрезков $t_k \leq t \leq t_{k+1}$ и вычислим соответствующие интегралы. После преобразований, оператор приводится к тому же виду, что и в случае производной Римана-Лиувилля с коэффициентами θ_k :

$$\theta_k^{Caputo} = \lambda_0 ((k-1)^{2-\gamma} - k^{2-\gamma}), \quad k = 1, 2, \dots, T. \quad (15)$$

Для построения численной схемы в случае производной Грюнвальда-Летникова возьмем от обеих частей уравнения теплопроводности дробную производную порядка $2-\gamma$:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = D_t^{2-\gamma} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (16)$$

Полученное уравнение аппроксимируем конечно-разностным с использованием определения производной Грюнвальда-Летникова:

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\tau^2} = \frac{1}{\tau^{2-\gamma}h^2} \sum_{k=0}^n \omega_k^{2-\gamma} (u_{i+1}^{n-1} - 2u_i^{n-1} + u_{i-1}^{n-1}), \quad (17)$$

порядок аппроксимации которой также $O(\tau + h^2)$. Схема является условно устойчивой, достаточное условие устойчивости: $\frac{\tau^\gamma}{h^2} \leq \frac{1}{2^{2-\gamma}}$ [8]. Кроме перечисленных авторами рассматривались и другие варианты определений дробных производных и их численные аппроксимации.

При постановке краевых задач количество необходимых граничных условий определяется тем, что в определениях дробных производных для данных значений параметра γ присутствует классическая вторая производная; следовательно, необходимо задавать значение функции и её первой производной.

Результаты решения задач. Приведём результаты решения по описанным методикам двух модельных задач. Решение в безразмерных величинах проводилось на отрезке $0 \leq x \leq 2\pi$.

Задача 1. Диффузия с правой границей области. Начально-краевые условия:

$$u(x, 0) = 0.02; \quad \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{(x,0)} = 0; \quad u(0, t) = 0.02; \quad u(2\pi, t) = 2. \quad (18)$$

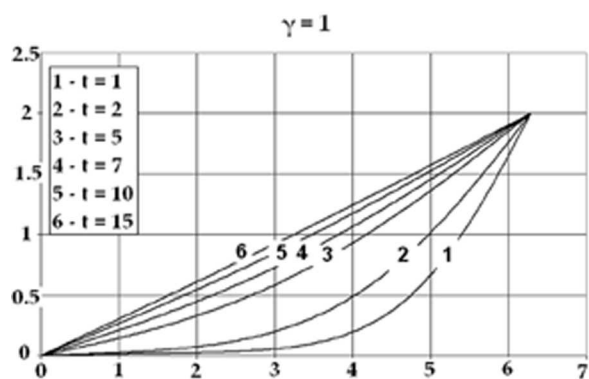


Рис. 1

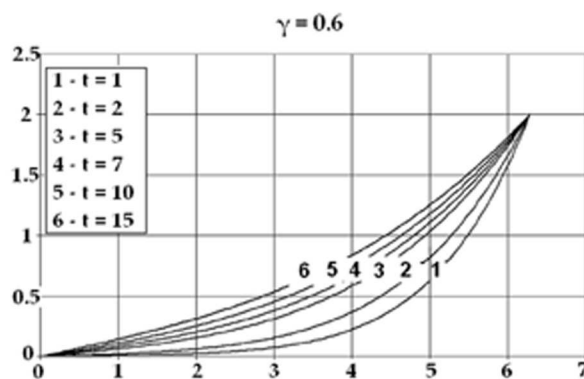


Рис. 2

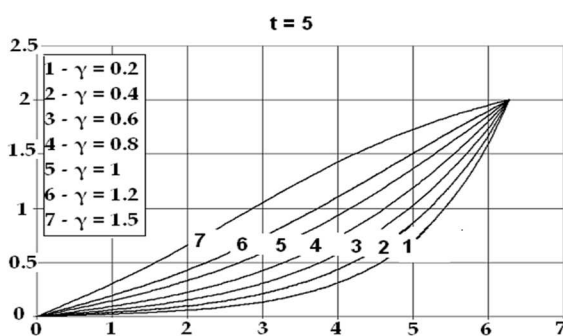


Рис. 3

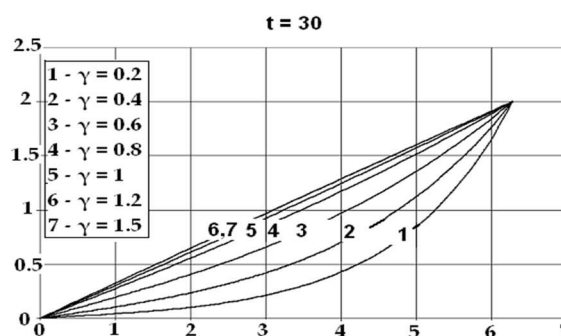


Рис. 4

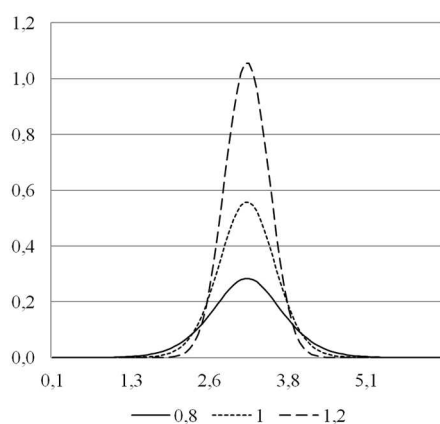


Рис. 5

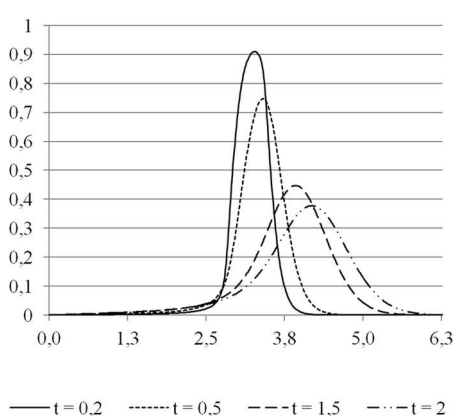


Рис. 6.

Результаты решения задачи для двух значений параметра γ приведены на рис. 1, где $\gamma = 1$ (классическое уравнение), и рис. 2, где $\gamma = 0.6$. Влияние на решение величины γ прослеживается на рис. 3 и 4, где приведены рассчитанные значения функции $u(x)$ для различных значений γ в фиксированные моменты времени.

Задача 2. Эволюция примеси из локальной области. Начально-краевые условия:

$$u(x, 0) = \delta(x - \pi); \frac{\partial u}{\partial t} = 0; u(0, t) = u(2\pi, t) = 0. \quad (19)$$

Результаты решения для линейного уравнения диффузии с дробной производной по времени при $\gamma = 0.8; 1; 1.2$ на фиксированный момент времени показаны на рис. 5. Решение этой же задачи в случае дробной производной по пространству при $a = 1, 15$ на разные моменты времени приведены на рис. 6.

Обсуждение результатов, выводы. На основе полученных решений уравнений с дробны-

ми производными по времени либо пространству проанализирована зависимость поведения решений от параметров порядка дифференцирования и кососимметричности. При $\gamma < 1$ скорость протекания процесса вначале больше скорости классической диффузии, но с течением времени наблюдается замедление, характерное для субдиффузии. При $\gamma > 1$ скорость процесса выше, чем в классическом случае, и процесс с течением времени ускоряется. В этом случае проявляются «волновые» свойства решения.

Решения уравнений с дробной производной по пространству показывают, что зависимость скорости диффузии от порядка дробной производной, оказывающейся большей, чем предсказывает классическая модель. При приближении параметра дифференцирования к 1 наблюдается явно выраженный процесс переноса (рис. 6).

Сравнение результатов, полученных при использовании разных определений дробных производных (Римана-Лиувилля, Капуто, Грюнвальда-Летникова) и соответствующих разностных аппроксимаций, показало, что получаемые для рассмотренных задач данные практически совпадают. Это означает, что для решения данного класса конкретных краевых задач эти методы равноценны и дают решения, достаточно близкие к полученным в некоторых случаях аналитическим.

Для всех случаев уравнений с дробными производными получаемые решения обладают всеми качественными свойствами решений «родительских» уравнений.

Список литературы

1. Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // Phys. Rep. 2000. V. 339 P. 1.–77.
2. Учайкин В. В. Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы // УФН 2003. Т. 173, № 8. С. 847–876.
3. Paradisi P., Cesari R., Mainardi F., Tampieri F. The fractional Fick's law for non-local transport processes // Physica A. 2001. Т. 293 P. 130–142.
4. Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск: Наука и техника, 1987.
5. Gorenflo R. Fractional calculus: some numerical methods // Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics, eds. A. Carpinteri and F. Mainardi. Springer Verlag, Wien, 1997. №. 378. P. 277–290.
6. Мерзиевский Л. А., Корчагина А. Н. Сравнение методов численного решения задач для уравнения теплопроводности дробного порядка // X Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование». Саров, 2008. С. 85–86.
7. Головизнин В. М., Киселёв В. П., Короткин И. А. Численные методы решения уравнения дробной диффузии в одномерном случае. М., 2002 (Препринт / ИБРАЭ РАН: ИБРАЭ-2002-01).
8. Лукашук С. Ю., Костригин И. В. Численное решение диффузионно-волновых уравнений дробного порядка на кластерных системах // Труды VI Всероссийской конференции молодых ученых по мат. моделированию и информ. технологиям. Кемерово, 2005. С. 19.
9. Мерзиевский Л. А., Корчагина А. Н. Моделирование распространения теплового импульса во фрактальной среде // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны. Труды международной конференции «XI Харитоновские тематические научные чтения». Саров, 2009. С. 250–254.
10. Таукенова Ф. И., Шхануков-Лафишев М. Х. Разностные методы решения краевых задач для дифференциальных уравнений дробного порядка // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. Т. 46. №. 10. С. 1871–1881.

References

1. Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // Phys. Rep. 2000. V. 339 P. 1.–77.

2. Uchayykin V. V. Avtomodelnaya anomalija diffuziya i ustoychivye zakony // UFN 2003. T. 173. № 8. S. 847–876.
3. Paradisi P., Cesari R., Mainardi F., Tampieri F. The fractional Fick's law for non-local transport processes // Physica A. 2001. T. 293 P. 130–142.
4. Samko S. G., Kilbas A. A., Marichev O. I. Integraly i proizvodnye drobnogo poryadka i nekotorye ikh prilozheniya. Minsk: Nauka i tekhnika, 1987.
5. Gorenflo R. Fractional calculus: some numerical methods // Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics, eds. A. Carpinteri and F. Mainardi. Springer Verlag, Wien, 1997. №. 378. P. 277–290.
6. Merzhiyevsky L. A., Korchagina A. N. Sravneniye metodov chislennogo resheniya zadach dlya uravneniya teploprovodnosti drobnogo poryadka // X Mezhdunarodny seminar «Supervychisleniya i matematicheskoye modelirovaniye». Saratov, 2008. S. 85–86.
7. Golovizin V. M., Kiselyov V. P., Korotkin I. A. Chislennyye metody uravneniya drobnoy diffuzii v odnomernom sluchaye. M., 2002 (pereprint /IBR AE RAN. IBRAE-2002-01)
8. Lukashchuk S. Yu. Kostrigin I. V. Chislennoye resheniye diffuzno-volnovykh uravneny drobnogo poryadka na klasternykh sistemakh // Trudy VI Vserossyskaya konferentsiya molodykh uchenykh po mat. modelirovaniyu i inform. tekhnologiyam. Kemerovo, 2005. S. 19.
9. Merzhiyevsky L. A., Korchagina A. N. Modelirovaniye raspredeleniya teplovogo impulsa vo fraktalnoy srede // Ekstremalnye sostoyaniya veshchestva. Detonatsiya. Udarnye volny. Trudy mezhdunarodnoy konferentsii «XI Kharitonovskiye tematicheskiye nauchnye chteniya». Sarov, 2009. S. 250–254.
10. Taukenova F. I., Shkhanukov-Lafishev M. Kh. Raznostnye metody resheniya krayevykh zadach dlya differentsialnykh uravneny drobnogo poryadka // Zhurnal vychislitelnoy matematiki i matematicheskoy fiziki. 2006. T. 46. № 10. S. 1871–1881.

Статья поступила в редакцию 25.04.2013

УДК 535.31
ББК 22.3

Павел Юрьевич Лукьянов

кандидат технических наук, ведущий программист,
Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: lgc255@mail.ru

Александр Александрович Гурулёв

кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник,
Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: lgc255@mail.ru

Алексей Олегович Орлов

младший научный сотрудник,
Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: Orlov_A_O@mail.ru

Сергей Васильевич Цыренжапов

младший научный сотрудник,
Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: lgc255@mail.ru

Измерительные приборы для исследования параметров воды меромиктических водоёмов¹

В работе приведено описание разработанных авторами измерительных приборов для исследования физико-химических параметров воды меромиктических водоёмов в натуральных условиях, а также для отбора химико-биологических проб воды из тонких слоёв с разрешением по глубине до 5 см. Также обсуждаются наиболее интересные результаты исследований оз. Доронинское Забайкальского края, полученные с использованием разработанных приборов в летний и зимний периоды.

Ключевые слова: меромиктический водоём, хемоклин, погружной зонд.

Pavel Yur'evich Luk'yanov

Candidate of Engineering Science, Leading Programmer,
Institute of Natural Resources, Ecology and Cryology, Siberian Branch,
Russian Academy of Sciences (Chita, Russia), e-mail: lgc255@mail.ru

Aleksandr Aleksandrovich Gurulev

Candidate of Physics and Mathematics Science, Senior Researcher,
Institute of Natural Resources,
Ecology and Cryology, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Chita, Russia), e-mail: lgc255@mail.ru

Aleksey Olegovich Orlov

Junior Researcher,
Institute of Natural Resources, Ecology and Cryology, Siberian Branch,
Russian Academy of Sciences (Chita, Russia), e-mail: Orlov_A_O@mail.ru

Sergey Vasil'evich Tsyrenzhapov

Junior Researcher,
Institute of Natural Resources, Ecology and Cryology, Siberian Branch,
Russian Academy of Sciences (Chita, Russia), e-mail: lgc255@mail.ru

Measuring Devices for Water Parameters Investigation of Meromictic Water Bodies

The description of measurement devices developed by the authors for investigation of physical and chemical parameters of meromictic water bodies in natural conditions, as well as for the chemical and biological sampling from the thin layers of water with depth resolution up to 5 cm is given in this paper. The most interesting results obtained with the use of the

¹Работа выполнена при поддержке Интеграционного проекта СО РАН №56.

developed devices at Lake Doroninskoe (Trans-Baikal territory) during the summer and winter periods are discussed here.

Keywords: meromictic water body, chemocline, immersion probe.

Введение. Меромиктические водоёмы являются уникальными природными объектами, для которых характерны особые гидрологические и физико-химические условия, что также предопределяет своеобразную биоту таких водоёмов. В частности, для меромиктических водоёмов характерно образование слоистых структур как в водной толще, так и в донных отложениях. Толщины таких слоёв в некоторых случаях могут варьироваться от сантиметров (водные слои) до долей миллиметров (донные отложения) [1; 3; 4]. Также некоторые меромиктические водоёмы (в частности, озеро Доронинское Улетовского района Забайкальского края) отличаются малым запасом устойчивости по отношению к перемешиванию слоёв [5], что необходимо учитывать при отборах проб и исследованиях аппаратурными физическими и химическими методами.

Указанные особенности меромиктических водоёмов не позволяют использовать стандартные аппаратурные физико-химические методы, заимствованные из океанологии, без соответствующей адаптации [2]. Кроме того, по спектру поглощения видимого света можно косвенно судить об особенностях бактериального фотосинтеза, а также о наличии тех или иных видов бактерий в исследуемой воде [6].

Для исследования гидрологических и физико-химических условий меромиктических водоёмов, на примере озера Доронинское, а также для забора биологических проб из интересующих слоёв нами были разработаны следующие аппаратурные комплексы: комплекс ПС-3 – для исследования изменений характеристик придонного слоя воды по акватории водоёма с целью выявления зон, вода в которых по каким-либо причинам имеет отличающиеся от средних по водоёму характеристики; и комплекс ХВ-7 – для измерения 7 характеристик подлёдной воды в натуральных условиях при помощи погружаемого в воду зонда специальной конструкции, а также для отбора проб воды с различных глубин в целях дальнейших исследований в лабораторных условиях.

Описание установок. Комплекс ПС-3 был создан на основе надувной резиновой лодки (использование плавучих средств большей размерности исключалось по условиям измерений). На штативе специальной конструкции закреплялись источники электропитания и электронное оборудование, соединённое тросом и гибким кабелем с придонным зондом и донными сачами (рис. 1).



Рис. 1. Фото измерительной установки ПС-3, установленной на лодку

Измерялись следующие характеристики: глубина от поверхности, температура придонного слоя и удельное электрическое сопротивление воды на переменном токе частотой 1000 Гц. Также определялись географические координаты в точке измерений при помощи системы GPS. Оператором проводилась фотофиксация показаний измерительных приборов с периодом в 1–10 секунд, что соответствует пространственному разрешению комплекса до 1 метра.

Комплекс ХВ-7 состоит из блока с электронным оборудованием и погружаемого зонда с электродами и датчиками специальной конструкции (рис. 2).

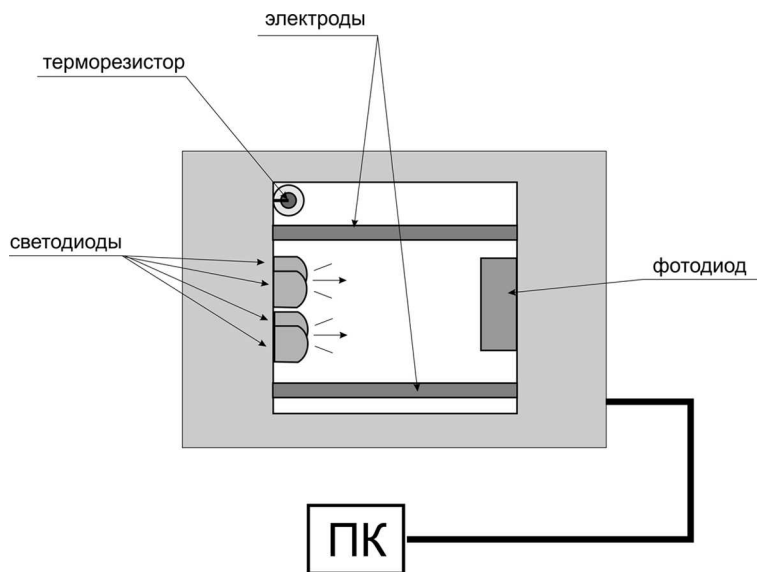


Рис. 2. Схема погружного зонда установки ХВ-7

Комплекс ХВ-7 производит измерение следующих характеристик воды в натуральных условиях с разрешением по глубине до 2,5 см: температура воды; удельная электрическая проводимость воды на переменном токе частотой 1000 Гц; естественная освещённость на поверхности и на глубине; коэффициент поглощения видимого света в красной, жёлтой, зеленой и синей частях спектра. Предусмотрен вывод результатов измерений на цифровой прибор (в ручном режиме измерений) и на систему сбора данных Agilent (в полуавтоматическом режиме). Также по результатам измерений расчётным путем могут быть определены коэффициенты поглощения воды для синтезированного белого света и коэффициенты относительной прозрачности воды в красной, жёлтой, зеленой и синей частях спектра.

Учитывая, что удельная проводимость воды определяется главным образом двумя факторами – её солёностью и температурой, по полученным ХВ-7 данным возможно косвенно определить солёность воды, а также её плотность.

Погружаемый зонд ХВ-7 подсоединен к блоку с электронным оборудованием посредством кабеля с двойной герметизацией. Герметизация электронных компонентов зонда осуществлена путем заливки битумной мастики марки МБП. Также на мачте зонда может закрепляться заборная трубка вакуумного отборника проб воды, позволяющая проводить отбор проб из интересующих слоёв с разрешением по глубине до 5 см для химических и биологических исследований в лабораторных условиях.

Обсуждение полученных результатов. При помощи комплекса ПС-3 было выявлено, в частности, что в летнее время по сочетанию своих физико-химических свойств вода оз. Доронинское образует два четко выраженных кластера на диаграмме «температура – электрическое сопротивление» (рис. 3), что связано с особенностями гидрологического режима этого водоёма.

Кластер с более высокими значениями температуры соответствует верхним слоям водоёма, а низкими – глубинным слоям. Такой вид диаграммы «сопротивление – температура» свидетельствует о наличии в озере двух относительно обособленных друг от друга зон, между которыми практически отсутствует массообмен.

При помощи прибора ХВ-7 в зимний период 2013 г. было обнаружено, в частности, существование в оз. Доронинское на глубине около 3 м тонкого (5–10 см) мигрирующего слоя воды с особыми оптическими, физическими и химико-биологическими свойствами (рис. 4).

Как видно из данного графика, прозрачность воды в тонком слое на глубине 3 м в синтезированном белом свете на 10–15 % ниже, чем вышележащих слоёв. Также выявлены спектральные особенности поглощения света в слоях воды. В области хемоклина наблюдается увеличение относительной прозрачности в красном свете на 2–3 %, сохраняющееся и на больших глубинах.

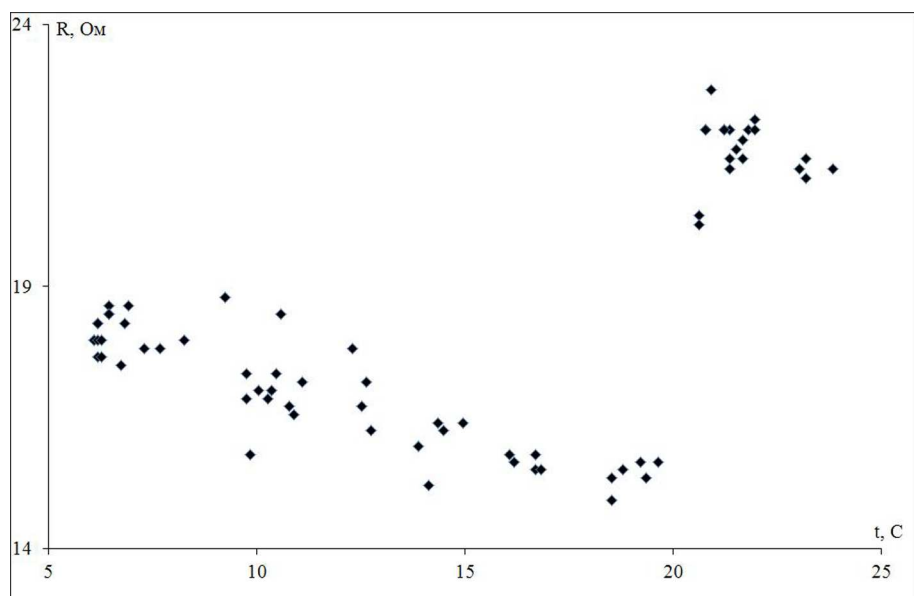


Рис. 3. Зависимость сопротивления воды от температуры для оз. Доронинское. 17 августа 2012 год

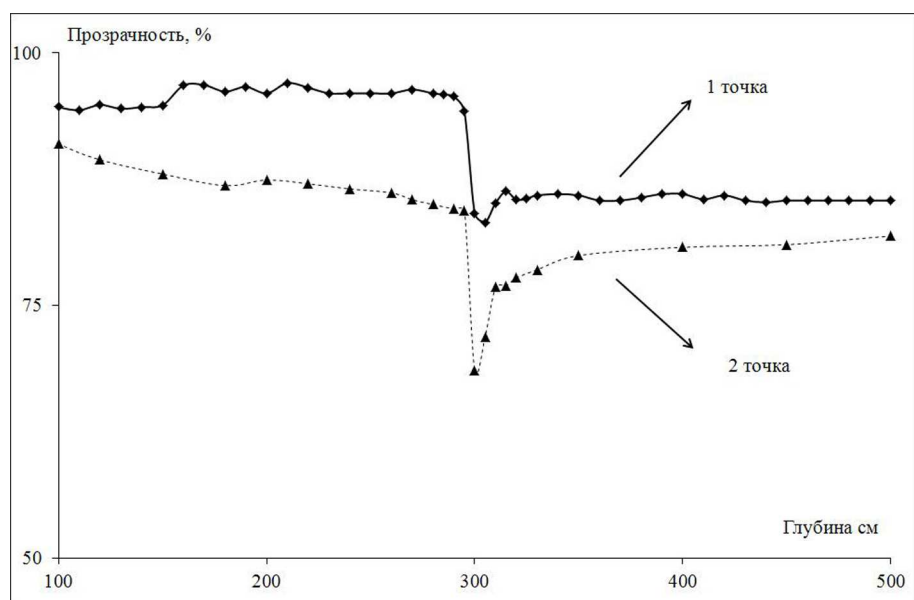


Рис. 4. Прозрачность воды в зависимости от глубины в синтезированном белом свете на двух участках

Таким образом, разработанные приборы хорошо зарекомендовали себя при исследованиях гидрологического режима, физико-химических и биологических особенностей оз. Доронинское и могут быть использованы для аналогичных исследований других меромиктических водоёмов.

Список литературы

1. Рогозин Д. Ю. Тонкослойное вертикальное распределение пурпурных серных бактерий в зонах хемоклина меромиктических озер Шира и Шунет (Хакасия) / Д. Ю. Рогозин, Н. В. Пименов, Д. Б. Косолапов, Ю. В. Чаньковская, А. Г. Дегерменджи // Доклады Академии наук. 2005. Т. 400. № 3. С. 426–429.
2. Rogozin D. Y., Degermendzhi A. G. Hydraulically-operated thin-layer sampler for sampling heterogeneous water columns // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Биология. 2008. Т. 1. № 2. С. 111–117.
3. Tonolla M., Peduzzi S., Hahn D., Peduzzi R. Spatio-temporal distribution of

phototrophic sulfur bacteria in the chemocline of meromictic Lake Cadagno (Switzerland) // 2003. FEMS. Microbiol. Ecol. 43: 89–98.

4. Overmann J. Mahoney Lake: a case study of the ecological significance of phototrophic sulphur bacteria // Adv. Microb. Ecol. 1997. V. 15. P. 251–288.

5. Борзенко С. В., Замана Л. В. Восстановленные формы серы в рапе содового озера Доронинское (Восточное Забайкалье) // Геохимия. 2011. № 3. С. 268–276.

6. Joseph W Lengeler; G Drews; Hans Gunter Schlegel Biology of the prokaryotes. Stuttgart. New York: Thieme. Malden. MA: Distributed in the USA by Blackwell Science. 1999. 955 p.

References

1. Rogozin D. Yu. Tonkosloynoye vertikalnoye raspredeleniye purpurnykh sernykh bakteriy v zonakh khemoklina meromikticheskikh ozer Shira i Shunet (Khakasiya) / D. Yu. Rogozin, N. V. Pimenov, D. B. Kosolapov, Yu. V. Chankovskaya, A. G. Degermendzhi // Doklady Akademii nauk. 2005. T. 400. № 3. S. 426–429.

2. Rogozin D. Y., Degermendzhi A. G. Hydraulically-operated thin-layer sampler for sampling heterogeneous water columns // Zhurnal Sibirskogo federalnogo universiteta. Seriya: Biologiya. 2008. T. 1. № 2. S. 111–117.

3. Tonolla M., Peduzzi S., Hahn D., Peduzzi R. Spatio-temporal distribution of phototrophic sulfur bacteria in the chemocline of meromictic Lake Cadagno (Switzerland) // 2003. FEMS. Microbiol. Ecol. 43: 89–98.

4. Overmann J. Mahoney Lake: a case study of the ecological significance of phototrophic sulphur bacteria // Adv. Microb. Ecol. 1997. V. 15. P. 251–288.

5. Borzenko S. V., Zamana L. V. Vosstanovlennyye formy sery v rape sodovogo ozera Doroninskoye (Vostochnoye Zabaykalye) // Geokhimiya. 2011. № 3. S. 268–276.

6. Joseph W Lengeler; G Drews; Hans Gunter Schlegel Biology of the prokaryotes. Stuttgart. New York: Thieme. Malden. MA: Distributed in the USA by Blackwell Science. 1999. 955 p.

Статья поступила в редакцию 18.04.2013

УДК 537.7
ББК В. 22

Марина Юрьевна Малакеева
старший преподаватель,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: seilor25@mail.ru

Валерий Ефимович Архинчев
доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник,
Институт физического материаловедения СО РАН
(Улан-Удэ, Россия), e-mail: varkhin@mail.ru

Протекание холловского тока и вычисление эффективной проводимости многофазных сред в режиме КЭХ¹

Рассмотрено протекание тока в условиях квантового эффекта Холла в неоднородных многофазных средах. Описан общий метод исследования неоднородных двумерных сред на основе линейных преобразований поворота, предложенный Дыхне. Получены соотношения дуальности эффективной проводимости и вычислена эффективная проводимость многофазных сред в режиме КЭХ.

Ключевые слова: квантовый эффект Холла, эффективная проводимость, многофазные среды, преобразования Дыхне.

Marina Yur'evna Malakeeva
Senior Lecturer,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: seilor25@mail.ru

Valeriy Efimovich Arkhincheev
Doctor of Physics and Mathematics, Leading Researcher,
Institute of Physical Material Science, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Ulan-Ude, Russia), e-mail: varkhin@mail.ru

Percolation of Hall Current and Calculation of Effective Conductivity of Multiphase Media in the Quantum Hall Effect Regime

The current percolation has been considered in inhomogeneous multiphase media under Quantum Hall Effect conditions. A general method for studying two-dimensional heterogeneous media on the basis of linear transformations of rotation developed by Dykhne has been described. Duality relations for the effective conductivity of multiphase media have been obtained and calculation of effective Hall conductivity has been performed.

Keywords: Quantum Hall Effect regime, effective conductivity, multiphase media, Dykhne transformations.

Настоящая работа продолжает исследования протекания тока в условиях квантового эффекта Холла (КЭХ). Ранее в работах [5; 10] методами ТФКП был исследован вопрос о протекании холловского тока в двухфазной среде. Было показано, что ненулевое значение эффективной холловской проводимости обусловлено протеканием холловского тока через сингулярные точки. В связи с разработкой квантовых интерферометров актуальными являются задачи протекания тока в средах с границами, к которым относятся многофазные системы. В режиме КЭХ свойства протекания тока существенно определяются именно свойствами межфазных границ и их топологией.

Целью настоящей работы является изучение протекания холловского тока в неоднородной многофазной среде. С помощью преобразований Дыхне будут получены соотношения дуальности эффективной проводимости многофазных сред. Далее на основе установленных соотношений будут получены точные выражения для проводимости в условиях квантового эффекта Холла.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Программы ОФН РАН (проект 20.4)

1. Симметрия двумерной системы относительно преобразований поворота (метод линейных преобразований Дыхне). Опишем кратко метод, предложенный в работах [2; 3]. Двухмерная проводящая среда описывается уравнениями постоянного тока и законом Ома:

$$\operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad \operatorname{rot} \vec{e} = 0, \quad \vec{j} = \sigma \vec{e}. \quad (1)$$

Как впервые было установлено в работах Дыхне [3], эти уравнения инвариантны относительно уравнений поворота:

$$\vec{j}' = b[\vec{n}, \vec{e}'], \quad \vec{e}' = d[\vec{n}, \vec{j}']. \quad (2)$$

Здесь b, d — постоянные коэффициенты уравнений поворота; \vec{n} — нормаль к плоскости. В силу линейности указанных преобразований сохраняется закон Ома и в новой штрихованной системе. При этом проводимость штрихованной системы равна:

$$\sigma' = \frac{b}{d\sigma}. \quad (3)$$

В магнитном поле \vec{B} , направленном перпендикулярно к плоскости, закон Ома имеет тензорный вид: $\vec{j} = \hat{\sigma} \vec{e}$, здесь $\hat{\sigma}$ — тензор проводимости в магнитном поле с компонентами σ_{xx} и σ_{xy} . Соответственно, в случае магнитного поля используются обобщенные линейные преобразования поворота [3,4]:

$$\vec{j}' = a\vec{j}' + b[\vec{n}, \vec{e}'], \quad \vec{e}' = c\vec{e}' + d[\vec{n}, \vec{j}']. \quad (4)$$

В штрихованной системе закон Ома также имеет тензорный вид: $\vec{j}' = \hat{\sigma}' \vec{e}'$. При этом компоненты тензора новой штрихованной системы связаны с компонентами тензора исходной системы следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \sigma'_{xx} &= \frac{\sigma_{xx}(ac + bd)}{(\sigma_{xx}d)^2 + (\sigma_{xy}d + a)^2}; \\ \sigma'_{xy} &= \frac{\sigma_{xx}^2 cd + (c\sigma_{xy} - b)(d\sigma_{xy} - a)}{(\sigma_{xx}d)^2 + (\sigma_{xy}d + a)^2}. \end{aligned} \quad (5)$$

2. Эффективная холловская проводимость многофазных сред. Применим преобразования Дыхне для многофазных холловских сред. Для металлических сред этот метод не работает, но для холловских сред из-за особенностей протекания тока этим методом можно получить решения и точные выражения для эффективной холловской проводимости.

Рассмотрим многофазный случай. Пусть имеются 4 фазы в режиме КЭХ с различными проводимостями $\sigma_{xy}^{(i)}$ (в дальнейшем будем обозначать холловские проводимости просто как σ_i) и случайным расположением фаз. Предположим также, что концентрации чётных и нечётных фаз равны между собой:

$$X_1 = X_3, \quad X_2 = X_4 \quad (6)$$

и произвольны по величине:

$$2(X_1 + X_2) = 1. \quad (7)$$

Для удобства представим концентрации 1 и 2 фаз в виде:

$$X_1 = \frac{1}{4} + \delta, \quad X_2 = \frac{1}{4} - \delta. \quad (8)$$

Двух и трёхфазные среды являются частными случаями рассматриваемой задачи. Следуя общему методу, установим возможные симметрии перестановок и соответствующие соотношения дуальности. Переставим чётные и нечётные фазы местами:

$$\sigma'_1 = \sigma_2, \quad \sigma'_2 = \sigma_1, \quad \sigma'_3 = \sigma_4, \quad \sigma'_4 = \sigma_3, \quad (1 \leftrightarrow 2, 3 \leftrightarrow 4). \quad (9)$$

В соответствии с условиями (9) и формулой (5) это преобразование задается коэффициентами

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{\sigma_1 \sigma_2 (\sigma_3 + \sigma_4) - \sigma_3 \sigma_4 (\sigma_1 + \sigma_2)}{\sigma_1 \sigma_2 - \sigma_3 \sigma_4}, \\ a_1 &= c_1, \\ d_1 &= \frac{\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_3 - \sigma_4}{\sigma_1 \sigma_2 - \sigma_3 \sigma_4}. \end{aligned} \quad (10)$$

Отметим, что такое преобразование при произвольных значениях проводимостей возможно только для сред в режиме КЭХ. При обычном металлическом характере проводимости в трёхфазном случае возникает дополнительное условие на проводимость третьей фазы: $\sigma_3 = \sqrt{\sigma_1\sigma_2}$, а в четырёхфазном случае такое преобразование вообще отсутствует.

При произвольных концентрациях фаз штрихованная система оказывается дуальной по отношению к исходной: $\sigma'_e(\delta) = \sigma_e(-\delta)$. Следовательно, получим следующее соотношение дуальности для эффективных проводимостей четырёхфазных неоднородных сред в режиме КЭХ:

$$d_1\sigma_e(-\delta)\sigma_e(\delta) + b_1 = a_1(\sigma_e(-\delta) + \sigma_e(\delta)). \quad (11)$$

Помимо указанной симметрии в данной задаче есть ещё одна возможность при перестановке чётных и нечётных фаз: $\sigma'_1 = \sigma_4, \sigma'_2 = \sigma_3, \sigma'_3 = \sigma_2, \sigma'_4 = \sigma_1, (1 \leftrightarrow 4, 2 \leftrightarrow 3)$. В этом случае коэффициенты a, b, d принимают значения:

$$a_2 = -c_2, \quad b_2 = \frac{\sigma_1\sigma_4(\sigma_2 + \sigma_3) - \sigma_2\sigma_3(\sigma_1 + \sigma_4)}{\sigma_1\sigma_4 - \sigma_2\sigma_3},$$

$$d_2 = \frac{\sigma_1 + \sigma_4 - \sigma_2 - \sigma_3}{\sigma_1\sigma_4 - \sigma_2\sigma_3}, \quad (12)$$

и получается ещё одно соотношение дуальности, аналогичное (11), но со своими коэффициентами a_2, b_2, d_2 .

В рассматриваемой системе также есть дополнительная симметрия – перестановка чётных и нечётных фаз между собой:

$$\sigma'_1 = \sigma_3, \quad \sigma'_2 = \sigma_4, \quad \sigma'_3 = \sigma_1, \quad \sigma'_4 = \sigma_2, \quad (1 \leftrightarrow 3, 2 \leftrightarrow 4). \quad (13)$$

В этом случае штрихованная система оказывается макроскопически эквивалентной исходной: $\sigma'_e(\delta) = \sigma_e(\delta)$ и эффективная холловская проводимость определяется уравнением:

$$d_3\sigma_e(\delta)^2 + b_3 - 2a_3\sigma_e(\delta) = 0. \quad (14)$$

Здесь коэффициенты a_3, b_3, d_3 находятся из условий (13). Таким образом, эффективная проводимость четырёхфазной среды в режиме КЭХ равна:

$$\sigma_{xy}^e(\pm\delta) = \frac{\sigma_1\sigma_3 - \sigma_2\sigma_4}{(\sigma_1 + \sigma_3 - \sigma_2 - \sigma_4)} \pm$$

$$\pm \sqrt{\left(\frac{\sigma_1\sigma_3 - \sigma_2\sigma_4}{\sigma_1 + \sigma_3 - \sigma_2 - \sigma_4}\right)^2 - \frac{\sigma_2\sigma_4(\sigma_1 + \sigma_3) - \sigma_1\sigma_3(\sigma_2 + \sigma_4)}{\sigma_1 + \sigma_3 - \sigma_2 - \sigma_4}}. \quad (15)$$

Переход к средам с меньшим количеством фаз осуществляется достаточно легко: трёхфазная среда соответствует пределу $\sigma_2 = \sigma_4$, а двухфазная: $-\sigma_1 = \sigma_3, \sigma_2 = \sigma_4$. Интересно заметить, что плато холловской проводимости в широком интервале не зависит от концентрации фаз. Другим интересным обстоятельством является то, что высота плато зависит от проводимостей всех четырёх фаз вплоть до малых концентраций.

Такие неожиданные результаты связаны с необычным характером протекания тока в условиях КЭХ. Как известно, холловский ток всегда перпендикулярен электрическому полю:

$$j = \sigma_{xy}[n, e]. \quad (16)$$

Тогда из уравнения $div j = 0$ с учетом потенциальности электрического поля $rot e = 0$ получим

$$\vec{e} \times \nabla \sigma_{xy} = 0. \quad (17)$$

Следовательно, линии тока не могут пересекать линии постоянных значений величины σ_{xy} , т. е. холловский ток не может протекать из одной фазы в другую и «замораживается» в каждой из фаз. Это и объясняет постоянство плато σ_{xy} в широком интервале концентраций [6; 7; 8]. Отметим также, что, согласно нашим результатам, значение холловской проводимости на пороге протекания существенно зависит от того, по бесконечному кластеру из каких фаз произошёл выход на

пороговое значение σ_{xy} . Для образования бесконечного кластера достаточно двух фаз, поэтому в четырёхфазной системе возможны шесть независимых способов образования бесконечного кластера из различных фаз (число сочетаний равно 6). Это соответствует нашим результатам.

В настоящее время в связи с интенсивным исследованием квантовых явлений и разработкой квантовых интерферометров теоретическое исследование механизма распределения краевых токов в условиях КЭХ является актуальным и представляет существенный интерес. На наш взгляд, полученные результаты могут быть использованы для создания и усовершенствования квантовых интерферометров.

Список литературы

1. Балагуров Б. Я. Соотношения взаимности в двумерной теории протекания // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1982. Т. 82. С. 1333–1340.
2. Дыхне А. М. Проводимость двумерной двухфазной системы // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1970. Т. 59. № 1. С. 110–115.
3. Дыхне А. М. Проводимость двумерной двухфазной системы // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1970. Т. 59. № 1. С. 641–648.
4. Емец Ю. П. Преобразование симметрии двумерной двухкомпонентной электропроводной системы // ЖЭТФ. 1982. Т. 96. С. 701–711.
5. Малакеева М. Ю., Архинчев В. Е. Вычисление распределений локальных токов и полей в слоистых средах в условиях квантового эффекта Холла // Учёные записки ЗабГГПУ. 2011. № 3(38). С. 108–115.
6. Arkhincheev V. E. Exact Relations and Galvan magnetic Properties of the Inhomogeneous Two-Dimensional Medium // Physica status solidi (b). 1990. V. 161. P. 815–821.
7. Arkhincheev V. E. Effective conductivity of three-phase no dissipative randomly-inhomogeneous media // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 1999. V. 89. P. 1166–1167.
8. Arkhincheev V. E. and. Batyiev E. G. To the theory of the. Quantum Hall Effect in inhomogeneous medium// Solid State Communications 1989. V.12. P.1059–1060.
9. Arkhincheev V. E. Quantum Hall Effect in Inhomogeneous Media: Effective Characteristics and Local Current Distribution//Journal of Experimental and Theoretical Physics. Vol. 91. №. 2. 2000. P. 407–415.
10. Malakeeva M. U., Arkhincheev V. E. Current percolation in medium with boundaries under Quantum Hall Effect conditions// Advances in Condensed Matter Physics Volume. 2012. 6 pages.

References

1. Balagurov B. Ya. Sootnosheniya vzaimnosti v dvumernoy teorii protekaniya // Zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki. 1982. T. 82. S. 1333–1340.
2. Dykhne A. M. Profodimost dvukhmernoy dvukhfaznoy sistemy // Zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki. 1970. T. 59. № 1. S. 110–115.
3. Dykhne A. M. Provodimost dvumernoy dvukhfaznoy sistemy // Zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki. 1970. T. 59. № 1. S. 641–648.
4. Yemets Yu. P. Preobrazovaniye simmetrii dvukhmernoy dvukhkomponentnoy elektroprovodnoy sistemy // ZhETF. 1982. T. 92. S. 701–711.
5. Malakeyeva M. Yu., Arkhincheyev V. Ye. Vychisleniye raspredeleny lokalnykh tokov i poley v sloistyx v usloviyakh kvantovogo effekta Kholla // Uchyonye zapiski ZabGGPU. 2011. № 3(38). S. 108–115.
6. Arkhincheev V. E. Exact Relations and Galvan magnetic Properties of the Inhomogeneous Two-Dimensional Medium // Physica status solidi (b). 1990. V. 161. P. 815–821.

7. Arkhincheev V. E. Effective conductivity of three-phase no dissipative randomly-inhomogeneous media // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 1999. V. 89. P. 1166–1167.

8. Arkhincheev V. E. and. Batyiev E. G. To the theory of the. Quantum Hall Effect in inhomogeneous medium// Solid State Communications 1989. V.12. P.1059–1060.

9. Arkhincheev V. E. Quantum Hall Effect in Inhomogeneous Media: Effective Characteristics and Local Current Distribution//Journal of Experimental and Theoretical Physics. Vol. 91. № 2. 2000. P. 407–415.

10. Malakeeva M. U., Arkhincheev V. E. Current percolation in medium with boundaries under Quantum Hall Effect conditions// Advances in Condensed Matter Physics Volume. 2012. 6 pages.

Статья поступила в редакцию 15.05.2013

УДК 519.7
ББК В 22.18

Александр Эммануилович Менчер
кандидат физико-математических наук, доцент,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия) e-mail: aementcher@mail.ru

Комбинированная арбитражная процедура с квадратичной функцией выигрыша¹

Рассматривается бескоалиционная игра с нулевой суммой. Игроки, работник и работодатель, ведут переговоры об установлении заработной платы. В конфликтной ситуации игроки апеллируют к арбитру. Предложения арбитра моделируются дискретной случайной величиной. В работе применены две арбитражные схемы с квадратичной функцией выигрыша. Найдено равновесие по Нэшу в игре в смешанных стратегиях.

Ключевые слова: арбитражная процедура, равновесие, смешанные стратегии.

Aleksandr Emmanuilovich Mencher
Candidate of Physics and Mathematics,
Associate Professor, Zabaikalsky State University
(Chita, Russia) e-mail: aementcher@mail.ru

Combined Arbitration Procedure with Quadratic Payoff Function

We consider a non-cooperative zero-sum game. The players, the Labor and the Manager, negotiate an improvement in the wage rate. In a conflict situation the players appeal to the arbitrator. The arbitrator's solution is a discrete random variable. In this paper we use two arbitration schemes with quadratic payoff function. A mixed strategy Nash equilibrium in this game is found.

Keywords: arbitraton procedure, equilibrium, mixed strategies.

1. Введение

Рассматривается бескоалиционная игра с нулевой суммой, в которой игроки L и M , именуемые, соответственно, как работник и работодатель, ведут переговоры об установлении заработной платы. Игрок L делает предложение x , а игрок M – предложение y . Предположим, что x и y выбираются из заданных множеств X и Y на числовой оси. Для удобства вычислений рассмотрим предложения без ограничений на знак. В реальных приложениях интервал значений можно сдвинуть в положительную часть числовой оси. Если $x \leq y$, то конфликта нет и игроки соглашаются на выплату жалованья, равного $\frac{x+y}{2}$. Если же $x > y$, стороны апеллируют к арбитру A . Пусть выбор арбитра является дискретной случайной величиной, принимающей три возможных значения: -1 , 0 , 1 , – вероятность каждого из которых равна $\frac{1}{3}$. В работах [1 – 3] рассматривались две арбитражные схемы: арбитражная схема по последнему предложению [1; 3] и арбитражная схема с наказанием [2; 3]. В арбитражной схеме по последнему предложению арбитр выбирает то предложение, которое ближе к его решению z , т.е. функция выигрыша в данной схеме имеет вид

$$H_z(x, y) = \begin{cases} \frac{x+y}{2}, & \text{если } x < y, \\ x, & \text{если } x > y, |x-z| < |y-z|, \\ y, & \text{если } x > y, |x-z| > |y-z|, \\ z, & \text{если } x > y, |x-z| = |y-z|. \end{cases} \quad (1.1)$$

В арбитражной схеме с наказанием арбитр определяет, чье предложение ближе к его решению, и к своему решению прибавляет (если предложение L ближе к его решению) или вычитает (если предложение игрока M ближе к его решению) разницу между своим решением и предложением

¹Работа выполнена в рамках Государственного задания вузу Минобрнауки РФ (проект № 8.3641.2011).

«провинившегося» игрока. Это рассматривается здесь, как наказание. Таким образом, функция выигрыша в схеме с наказанием имеет вид

$$H_z(x, y) = \begin{cases} \frac{x+y}{2}, & \text{если } x \leq y, \\ 2z - y, & \text{если } x > y, |x - z| < |y - z|, \\ 2z - x, & \text{если } x > y, |x - z| > |y - z|, \\ z, & \text{если } x > y, |x - z| = |y - z|. \end{cases} \quad (1.2)$$

Поскольку в функциях (1.1) и (1.2) решение арбитра z является случайной величиной, в качестве функции выигрыша будем рассматривать математическое ожидание от этих функций: $H(x, y) = EH_z(x, y)$. В работе [3] найдено равновесие в игре в комбинированной арбитражной процедуре в смешанных стратегиях.

В настоящей работе мы используем две арбитражные процедуры с квадратичной функцией выигрыша, первая из которых – модификация арбитражной схемы по последнему предложению, а вторая – арбитражной схемы с наказанием. Именно: пусть $x \in [0, +\infty)$, $y \in (-\infty, 0]$; арбитраж с вероятностью p руководствуется процедурой с функцией выигрыша

$$H_z(x, y) = \begin{cases} x^2, & \text{если } |x - z| < |y - z|, \\ -y^2, & \text{если } |x - z| > |y - z|, \\ z, & \text{если } |x - z| = |y - z| \end{cases} \quad (1.3)$$

и с вероятностью $1 - p$ - процедурой с функцией выигрыша

$$H_z(x, y) = \begin{cases} 2z + y^2, & \text{если } |x - z| < |y - z|, \\ 2z - x^2, & \text{если } |x - z| > |y - z|, \\ z, & \text{если } |x - z| = |y - z|. \end{cases} \quad (1.4)$$

Равновесие в игре будем искать среди смешанных стратегий. Обозначим через $f(x)$ и $g(y)$ смешанные стратегии игроков L и M , соответственно. Имеем:

$$f(x) \geq 0, \quad \int_0^{+\infty} f(x) dx = 1; \quad g(y) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^0 g(y) dy = 1.$$

Благодаря симметрии, цена игры равна нулю, а оптимальные стратегии симметричны относительно оси ординат, т. е. $g(y) = f(-y)$. Следовательно, достаточно построить оптимальную стратегию только для одного из игроков, например, L . Обозначим через $H(f(x), y)$ функцию выигрыша игрока M при выбранной игроком L стратегии $f(x)$.

2. Оптимальные стратегии

Теорема. Если $p \in (\frac{2}{3}, 1]$, то для игрока L стратегия

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } 0 \leq x < c, \\ \frac{3p-1}{x^2} \cdot c, & \text{если } c < x < c+2, \\ 0, & \text{если } c+2 < x < +\infty, \end{cases} \quad (2.1)$$

где $c = 2(3p - 2)$, является оптимальной.

Доказательство. Будем искать оптимальную стратегию игрока L в виде

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } 0 \leq x < c, \\ \varphi(x), & \text{если } c < x < c+2, \\ 0, & \text{если } c+2 < x < +\infty, \end{cases} \quad (2.2)$$

где функция $\varphi(x)$ положительна и дважды непрерывно дифференцируема в интервале $(c, c+2)$.

Функция $H(f(x), y)$ непрерывна на всей отрицательной полуоси. Стратегия (2.2) будет оптимальной, если $H(f(x), y) = 0$ для $y \in [-(c+2), -c]$ и $H(f(x), y) \geq 0$ для $y \in (-\infty, -(c+2)) \cup (-c, 0]$.

Пусть $y \in [-(c+2), -c]$, тогда $-y \in [c, c+2]$ и

$$\begin{aligned}
 H(f(x), y) = & \frac{1}{3} \left[p \left(\int_c^{c+2} (-y^2) f(x) dx + \int_c^{-y} x^2 f(x) dx + \right. \right. \\
 & + \left. \int_{-y}^{c+2} (-y^2) f(x) dx + \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx \right) + (1-p) \left(\int_c^{c+2} (-2-x^2) f(x) dx + \right. \\
 & \left. \left. + \int_c^{-y} y^2 f(x) dx + \int_{-y}^{c+2} (-x^2) f(x) dx + \int_c^{c+2} (2+y^2) f(x) dx \right) \right]. \quad (2.3)
 \end{aligned}$$

Если теперь $f(x)$ – оптимальная стратегия, то

$$\begin{aligned}
 0 = H(f(x), -c-0) = & \frac{1}{3} \left[p(-c^2 - c^2 + \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx) + \right. \\
 & \left. + (1-p)(-2 - \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx - \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx + 2 + c^2) \right],
 \end{aligned}$$

откуда

$$(3p-2) \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx = (3p-1)c^2; \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned}
 0 = H(f(x) - (c+2) + 0) = & \frac{1}{3} [p(-(c+2)^2 + 2 \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx) + \\
 & + (1-p)(-2 - \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx + (c+2)^2 + 2 + (c+2)^2)].
 \end{aligned}$$

Отсюда

$$(3p-1) \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx = (3p-2)(c+2)^2. \quad (2.5)$$

Из (2.4) и (2.5) получаем

$$c = 2(3p-2), \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx = 4(3p-1)(3p-2). \quad (2.6)$$

Из условия $0 < c \leq 2$, получаем $\frac{2}{3} < p \leq 1$.

Далее, для оптимальности стратегии $f(x)$ необходимо $H'(f(x), y) = H''(f(x), y) = H'''(f(x), y) = 0$ в интервале $(-(c+2), -c)$.

Имеем:

$$\begin{aligned}
 H'(f(x), y) = & -\frac{2}{3} [p(y + y^2 f(-y) + y \int_{-y}^{c+2} f(x) dx) + \\
 & + (1-p)(y^2 f(-y) - y \int_c^{-y} f(x) dx - y)], \quad (2.7)
 \end{aligned}$$

$$H''(f(x), y) = -\frac{2}{3} \left[p(1 + 3yf(-y) + \int_{-y}^{c+2} f(x) dx) - y^2 f'(-y) + (1-p)(3yf(-y) - y^2 f'(-y) - 1 - \int_c^{-y} f(x) dx) \right], \quad (2.8)$$

$$H'''(f(x), y) = -\frac{2}{3} [4f(-y) - 5yf'(-y) + y^2 f''(-y)]. \quad (2.9)$$

Так как $H'''(f(x), y) = 0$, то, полагая $y = -x$, $x \in (c, c + 2)$, приходим к дифференциальному уравнению

$$x^2 \varphi''(x) + 5x \varphi'(x) + 4\varphi(x) = 0, \quad (2.10)$$

известному из [4]. Его решением является функция

$$\varphi(x) = \frac{\alpha}{x^2}.$$

Найдем константу α :

$$1 = \int_{2(3p-2)}^{2(3p-1)} \frac{\alpha}{x^2} dx = \frac{\alpha}{2(3p-1)(3p-1)},$$

откуда

$$\alpha = 2(3p-2)(3p-1) = (3p-1) \cdot c. \quad (2.11)$$

Итак, функция $f(x)$ имеет вид (2.1).

Проверим выполнение условий оптимальности.

Пусть $y \in [-(c+2), -c]$, тогда

$$\begin{aligned} H(f(x), y) &= \frac{1}{3} \left[p \left\{ \int_c^{c+2} (-y^2) \frac{(3p-1)c}{x^2} f(x) dx + \int_c^{-y} (3p-1)c dx + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \int_{-y}^{c+2} (-y^2) \frac{3p-1)c}{x^2} dx + \int_c^{c+2} (3p-1)c dx \right\} + \right. \\ &\quad \left. + (1-p) \left\{ \int_c^{c+2} (-2-x^2) \frac{(3p-1)c}{x^2} dx + \int_c^{-y} y^2 \frac{(3p-1)c}{x^2} dx + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \int_{-y}^{c+2} (-(3p-1)c) dx + \int_c^{c+2} (2+y^2) \frac{(3p-1)c}{x^2} dx \right\} \right] = \\ &= \frac{1}{3} [p \{ -y^2 + 2(3p-2)(3p-1)(-y-2(3p-2)) + y^2 2(3p-2) + \\ &\quad + 2(3p-2)(3p-1)y + 4(3p-1)(3p-2) \} + \\ &\quad + (1-p) \{ -2 - 4(3p-2)(3p-1) + 2(3p-2)(3p-1)y + 2(3p-1)y^2 - \\ &\quad - 2(3p-2)(3p-1)2(3p-1) - 2(3p-2)(3p-1)y + 2 + y^2 \}] = 0. \quad (2.12) \end{aligned}$$

Пусть $y \in (-\infty, -(c+4)]$, тогда

$$\begin{aligned} H(f(x), y) &= p \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx + (1-p) \int_c^{c+2} y^2 f(x) dx = \\ &= 4p(3p-2)(3p-1) + (1-p)y^2. \quad (2.13) \end{aligned}$$

Пусть $y \in [-(c+4), -(c+2)]$, тогда $-2-y \in [c, c+2]$ и

$$\begin{aligned}
 H(f(x), y) = & \frac{1}{3} \left[p \left\{ \int_c^{-2-y} x^2 f(x) dx - y^2 \int_{-2-y}^{c+2} f(x) dx + 2 \int_c^{c+2} x^2 f(x) dx \right\} + \right. \\
 & + (1-p) \left\{ \int_c^{-2-y} (-2+y^2) f(x) dx + \int_{-2-y}^{c+2} (-2-x^2) f(x) dx + \int_c^{c+2} y^2 f(x) dx + \right. \\
 & \left. \left. + \int_c^{c+2} (2+y^2) f(x) dx \right\} \right] \quad (2.14)
 \end{aligned}$$

Далее,

$$\begin{aligned}
 H(f(x), -(c+2) - 0) = & \frac{1}{3} [\{-(c+2)^2 + 8(3p-2)(3p-1)\} + \\
 & + (1-p)\{-4(3p-2)(3p-1) + 2(c+2)^2\}] = \\
 = & \frac{4}{3}(3p-1) [2p(3p-2) - p(3p-1) + 2(1-p)(3p-1) - \\
 & - (1-p)(3p-2)] = 0, \quad (2.15)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H'(f(x), y) = & \frac{1}{3} [p\{-(2+y)^2 f(-2-y) - y^2 f(-2-y) - \\
 & - 2y \int_{-2-y}^{c+2} f(x) dx\} + (1-p) \left\{ (-y^2 f(-2-y) + 2y \int_c^{-2-y} f(x) dx - \right. \\
 & \left. - (2+y)^2 f(-2-y) + 4y\} \right] = \\
 = & \frac{2}{3} \left[y - \frac{4(3p-2)(3p-1)}{(y+2)^2} \right] < 0. \quad (2.16)
 \end{aligned}$$

Так как $H'(f(x), y) < 0$ в интервале $(-(c+4), -(c+2))$ и $H(f(x), -(c+2) - 0) = 0$, то функция $H(f(x), y)$ на отрезке $[-(c+4), -(c+2)]$ строго убывает от $4p(3p-2)(3p-1) + (1-p)y^2$ до 0.

Пусть, наконец, $y \in [-c, 0]$, тогда $-y \in [0, c]$, $2-y \in [2, c+2]$ и

$$\begin{aligned}
 H(f(x), y) = & \frac{1}{3} \left[p\{-2y^2 + \int_c^{2-y} x^2 f(x) dx\} - y^2 \int_{2-y}^{c+2} f(x) dx \right] + \\
 & + (1-p) \left\{ \int_c^{2-y} y^2 f(x) dx - \int_{2-y}^{c+2} x^2 f(x) dx - 8(3p-2)(3p-1) \right\}. \quad (2.17)
 \end{aligned}$$

Далее,

$$\begin{aligned}
 H(f(x), -c+0) = & \frac{1}{3} [p\{-2c^2 + 4(3p-2)(3p-1)\} + \\
 & (1-p)\{c^2 - 8(3p-2)(3p-1)\}] = \\
 = & \frac{4}{3}(3p-2) [-2p(3p-2) + p(3p-1) + \\
 & + (1-p)(3p-2) - 2(1-p)(3p-1)] = 0, \quad (2.18) \\
 H(f(x), -0) = & \frac{1}{3} [p \int_c^2 x^2 f(x) dx + (1-p) \left\{ - \int_2^{c+2} x^2 f(x) dx - \right. \\
 & \left. - 8(3p-2)(3p-1) \right\}] = \frac{1}{3} [4p(3p-2)(3p-1) - 4(3p-2)^2(3p-1) -
 \end{aligned}$$

$$-8(1-p)(3p-2)(3p-1) = 0. \quad (2.19)$$

Найдем $H'(f(x), y)$ и $H''(f(x), y)$. Имеем:

$$\begin{aligned} H'(f(x), y) &= \frac{1}{3} \left[p \left\{ -4y - (2-y)^2 f(2-y) - y^2 f(2-y) - 2y \int_{2-y}^{c+2} f(x) dx \right\} + \right. \\ &\quad \left. + (1-p) \left\{ 2y \int_c^{2-y} f(x) dx - y^2 f(-2-y) - (2-y)^2 f(2-y) \right\} \right] = \\ &= -\frac{2}{3} \left[y + \frac{4(3p-2)(3p-1)}{(y-2)^2} \right], \quad (2.20) \\ H''(f(x), y) &= -\frac{2}{3} \left[1 - \frac{8(3p-2)(3p-1)}{(y-2)^3} \right] < 0. \end{aligned}$$

Таким образом, $H(f(x), -c+0) = H(f(x), -0) = 0$, функция $H(f(x), y)$ – выпуклая вверх на интервале $(-c, 0)$ и, следовательно, положительна. Теорема доказана.

Список литературы

1. Farber H. An Analysis of Final-Offer Arbitration // Journal of Conflict Resolution. 1980. Vol. 35. P. 683–705.
2. Zeng Dao-Zhi. An Amendment to Final offer Arbitratoin // Working Paper, Kagawa:Kagawa University, 2006.
3. Mazalov V. V., Mencher A. E., Tokareva J. S. On the Equilibrium in Bargaining Model with Arbitrator // Journal of Computer and Systems Science International, 2009. Vol. 48., № 5. P. 739–745.
4. Менчер А. Э. Об одной арбитражной схеме с тремя предложениями // Математический анализ и его приложения. 2011. Вып. 10. С. 34–40.

References

1. Farber H. An Analysis of Final-Offer Arbitration // Journal of Nonflict Resolution. 1980. Vol. 35. P. 683–705.
2. Zeng Dao-Zhi. An Amendment to Final offer Arbitratoin // Working Paper, Kagawa:Kagawa University, 2006.
3. Mazalov V. V., Mencher A. E., Tokareva J. S. On the Equilibrium in Bargaining Model with Arbitrator // Journal of Computer and Systems Science International, 2009. Vol. 48. № 5. P. 739–745.
4. Mencher A. E. Ob odnoy arbirtrazhnoy skheme s tremya predlozheniyami // Matematicheskyy analiz i ego prilozheniya. 2011. Vyp. 10. S. 34–40.

Статья поступила в редакцию 20.05.2013

УДК 502.3:528.8
ББК 20.18

М. Мунгуншагай, Т. Мянганбатор, Л. Ням-Очир
ассистенты профессора, Национальный университет Монголии
(Улан-Батор, Монголия), e-mail: rgalaa@yahoo.com

Л. Энхтур
доктор наук, профессор, Национальный университет Монголии
(Улан-Батор, Монголия), e-mail: rgalaa@yahoo.com

В. Е. Архинчев
доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник,
Институт физического материаловедения СОРАН
(Улан-Удэ, Россия), e-mail: varkhin@mail.ru

Р. Галбадрах
доктор наук, профессор,
Национальный университет Монголии
(Улан-Батор, Монголия), e-mail: rgalaa@yahoo.com

Исследование и анализ основных источников загрязнения Улан-Батора современными физическими методами¹

Работа посвящена исследованию загрязнения воздуха Улан-Батора и источников этого загрязнения. Среди основных причин – географическое расположение города, естественные и климатические особенности, ошибки в градостроительстве, также загрязнение обусловлено и экономическими причинами. В холодный сезон циркуляция воздушных потоков приводит к обратной температурной инверсии; в результате этого возникает дополнительное загрязнение, обусловленное диффузией частиц в воздухе. Другие факторы связаны с недостаточным озеленением как города, так и его окрестностей, плохим развитием городской инфраструктуры, использованием некачественных нефтепродуктов и др. В Улан-Баторе среднегодовые концентрации твёрдых примесей в атмосфере (PM10) были зарегистрированы на уровне 279 единиц, в то время как рекомендованный Всемирной организацией здравоохранения уровень PM10 равняется 20.

Ключевые слова: загрязнение, источники, жизнедеятельность, анализ

М. Mungunshagai, T. Myanganbaatar, L. Nyam-Ochir,
Assistant of Professor, National University of Mongolia
(Ulan Bator, Mongolia), e-mail: rgalaa@yahoo.com

L. Enkhtur
Doctor of Sciences, Professor, National University of Mongolia
(Ulan Bator, Mongolia), e-mail: rgalaa@yahoo.com

V. E. Arkhincheev
Doctor of Physics and Mathematics, Leading Researcher,
Institute of Physical Material Science, Siberian Branch,
Russian Academy of Sciences (Ulan-Ude, Russia), e-mail: varkhin@mail.ru

R. Galbadrakh
Doctor of Sciences, Professor, National University of Mongolia
(Ulan Bator, Mongolia), e-mail: rgalaa@yahoo.com

Investigation and Analysis of the Main Sources of Ulan Bator Pollution by Modern Physical Methods

The paper is devoted to the investigation of Ulan Bator air pollution and the sources of this pollution. The main reasons are geographical location of the city, unique natural and climatic characteristics, and mistakes in town building. Pollution is also caused by economic reasons. During the cold season, air circulation decreases leading to an inverse temperature occurrence and, as a result of this inversion, the polluting waste particles scatter in the air.

¹Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант 12-08-92201) и гранта Министерства образования и науки Монголии

Other factors contributing to Ulan Bator air pollution include destruction of vegetation in Ulan Bator suburbs, lack of green areas in the city, bad infrastructure development, bad quality of oil products, etc. In Ulan Bator, annual average particulate matter concentrations (PM10, i. e. particles that cause damage in the lungs when inhaled) have been recorded at as high as 279. The World Health Organization's recommended PM10 level is 20.

Keywords: pollution, sources, activity, analysis.

1. Introduction

The capital city of Mongolia is Ulaanbaatar. It locates in Central Asia, lies at 1,500 meters above sea level and occupies 470.4 thousand hectares of land. Ulaanbaatar city has an extremely continental climate, including four seasons, and it is one of the coldest national capitals in the world. Winter is cold with an average temperature of $-26\text{ }^{\circ}\text{C}$ in January. In summer, the warmest month is July with an average temperature of $+17\text{ }^{\circ}\text{C}$. The highest temperature in July reaches up to $+39\text{ }^{\circ}\text{C}$, and the lowest temperature in January ranges to $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$. According to the past decades reports, there have been 56 days registered a year with an average daily temperature of $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ and 55 days with an average temperature of $+15\text{ }^{\circ}\text{C}$.

According to the 2012 statistics, the population of Ulaanbaatar city is reached 1250 000 people, constituting 45 % of the total population of Mongolia. Although the population carrying capacity of Ulaanbaatar is about 400,000. The population density in Ulaanbaatar is 273 people's per square kilometers, which is 160 times more than the national average. In the past 20 years, the Ulaanbaatar's population increased by over 600 thousand including around 80 % mechanical increase of people migrated from rural areas.

This sharp mechanical growth of the Ulaanbaatar population produces many problems in town planning, land use, housing supply and environmental protection. Ulaanbaatar's socio-economic development, its rapid population growth and demographic changes negatively influence the city's environment and produce many different challenges like air, soil and water pollution, degradation and decrease in natural resources.

2. Pollution of air in Ulaanbaatar: main factors, sources and other issues

First of all let's consider a pollution of the air and sources of this pollution. These include among many others the geographical location of the city, the unique natural and climatic characteristics, mistakes of town building, and the country's economic-social potential.

Ulaanbaatar is located along the valley of the Tuul River surrounded by four mountain sand therefore, in a cold season the air circulation decreases leading to an inverse temperature occurrence and as a result of inversion the polluting waste particles scatter in the air and the cleaning process slows down. The recent mechanical growth of the

Ulaanbaatar population leads to mismanagement of town planning and expansion of people from rural districts which use the most backward stoves to burn great amounts of raw coal and other flammable, produce smoke and gas wastes in great amount/ special in a winter time. Other factors contributing to the Ulaanbaatar air pollution include destruction of vegetation in the near Ulaanbaatar area (increasing number of livestock near Ulaanbaatar, increasing number of fires), soil erosion and rupture, lack of green areas in the city, use of outdated and old cars (increasing import of old and used cars), bad infrastructure development including roads and bridges (increased traffic jams) and the bad quality oil products, combustibles and lubricants (use of lead containing fuel which is prohibited in most countries).

A counting of air pollution sources of Ulaanbaatar was conducted in 2007. There were counted 1378 small and medium sized low pressure stoves, 128100 ordinary stoves owned by private residents, businesses and organizations, three thermal electric power stations and over 150 thousand vehicles in nine districts of Ulaanbaatar. Every year thermal electric power plants burn 3.36 million tons of coal, small sized heating stoves burn over one million tons of coal, households, business enterprises and organizations burn 1.54 million tons of coal and 237195.8 cubic meters of firewood and thus contribute to the air pollution. In addition there are 19 brick factories, 32 gravel factories, 76 hide and leather processing factories, more than 400 car maintenance places (including tire repair, lubricant and spare parts selling points), 4 asphalt factories and over 180 gas stations and petroleum storages in Ulaanbaatar.

In Ulaanbaatar, annual average particulate matter concentrations (PM10, i. e., particles that cause damage in the lungs when inhaled) have been recorded at as high as 279. But the World Health Organization's recommended PM10 level is 20. The source for *sulfur dioxide* is burning coal containing sulfur. Each year Ulaanbaatar city burns around 6.0 million tons of coal that is mined from Baganuur

and Shivee Ovoo that contain 0.5–0.53 % of sulfur. The sulfur dioxide pollution starts in October and ends in March of each year. Such unpleasant condition happens due to an inverse temperature occurrence and windless cold winters. In months of December and January average daily content of sulfur dioxide is 3–10 times more than the tolerated level of sulfur dioxide. Sources for *nitrogen dioxide* pollution are cars that run on high temperature burning fuel, power plants and industrial waste smoke. The nitrogen dioxide level was detected highest in central parts and west 4 road (UB-2); 2–3 times more than the rest of the city parts. According to the air quality control standards, the overall observation in the 2006 demonstrated a 30.6 % more nitrogen dioxide above the tolerated level in Ulaanbaatar city. Sources of *dust* content in the air are incomplete combustion products, soil erosion and industrial activities. It can be easily observed during cold seasons, spring storms and winds and in certain parts of the city dust particles rising in the air and polluting the air. According to the study of the Nuclear Research Center, National University of Mongolia, 50 % of Ulaanbaatar's dust in the air derives from soil/earth erosion, and 35 % derives from burning of coal.

Ulaanbaatar city uses coals mined from Baganuur, Shivee-Ovoo and Nalaikh regions and extracted coals contain beryllium, boron, fluorine, thorium, silica, vanadium, chromium, manganese, cobalt, nickel, copper, aluminum, mercury, lead and uranium toxic compounds. Due to lack of experimental and controlling equipment and tools it is not possible to measure the toxic secretions from transportation and industrial processed toxic secretions.

3. Soil pollution is another pressing issue of Ulaanbaatar

In recent years, due to rapid population growth Ulaanbaatar city has also seen a rapid growth in economy, industry, services and infrastructure. Therefore, city's ecology is under a severe degradation due to increase in solid garbage and air pollution which is resulting in severe soil erosion and soil crust pollution. Sources for soil crust pollution and soil erosion are toxic substances in air, smoke and ashes and solid and damp garbage on the ground. Weather conditions and human activities are two main factors that the condition of soil and soil crust depend on.

Weather condition factors: Ulaanbaatar city is surrounded by mountains from all sides situating along the river valley, such condition allows for toxic substances that pollute the soil to move to low depression or to the center of the city and allows them to accumulate together. Along Selbe, Tolgoit and Bayan river valleys in northern part of Ulaanbaatar city mostly gher districts are situated and gher district's smoke and ashes, solid garbage and sewage water absorbed in the soil has a tendency to move towards low depression or to the center of the city creating carrying pollution towards Tuul River.

Climate factor: In the past 60 years Ulaanbaatar city's average atmosphere temperature had risen by 2.0 Celsius degrees which is 1.8 Celsius degrees more than the national average temperature which is due to rapid urbanization and air pollution. The rise in the temperature there is a tendency for ground to solidify and dry as well.

Surface water: Selbe and Tuul rivers are experiencing a low flow and passing time that contributes to the hardening and drying out of river plains. The meadows and marsh soil around the spring source of Selbe and Tolgoit rivers have dried out, as well as melting of the frozen crust allowing for the ground soil to subside and sink. Municipal solid garbage: Each year Ulaanbaatar city generates 260–280 thousand solid garbage of which only 40–50 % is transported out and the rest of the garbage is accumulated around gher districts areas, ditches and gullies thus creating ground and water pollution as shown on picture below.

Industrial waste: In recent years, Ulaanbaatar city has experienced an increase of raw skin processing factories which unfortunately resulted in unsafe and unregulated dumping of toxic polluting waste like 6 valence chromium and dumping of soiled water back into the city's clean water concentration of such factories.

Soil pollution level of Ulaanbaatar city: The soil erosion is increasing in recent years in Ulaanbaatar city. According to the research done from 2003 through 2007 the heavy metal contamination level in soil is lower than the permitted level, but there is a tendency to increase around Tuul River plains in recent years. As shows recent report, the average lead contamination in Ulaanbaatar soil is 45.7 mg/kg that is two times larger than the average uncontaminated and world soil index. In some places the lead contamination has reached 533 mg/kg which is 5.3 times more than the permitted level of contamination. Also, city's soil chromium amount reaching 89.4 mg/kg is another high indicator of contamination. Heavy metals such as Zinc, Cadmium, Copper and Nickel contamination level also are high compared to the average soil contamination of Tuul River basin. Looking at years of dynamic indexes, in 1995 the average level of lead in soil reached 30 mg/kg, in 1999 it reached 36 mg/kg and in 2006 the level reached 45.7

mg/kg indicating a rapid growth in soil lead contamination in Ulaanbaatar city soil. The primary source for soil lead contamination is leaded petroleum used in transportations.

4. Pollution by heavy metals: sources and analysis of concentration

One of strong but ignore anthropogenic source of air and soil pollution with harmful heavy metals like as lead, cadmium, chromium, selenium, and arsenic are paints that are widely used in Ulaanbaatar to paint buildings, indoor walls, floors and furnitures.

To understand the situation the heavy metal contaminants such as lead (Pb), cadmium (Cd), chromium (Cr), selenium (Se), arsenic (As) were analyzed and determined in samples of oil and ochre paints belonging to best selling brands in Ulaanbaatar city market places. Imported from China red, yellow, green, and blue color oil paints of Honglian, Chulei, and Shunshiyouqi brands (12 samples), 8 samples of ochre paint (Chinese origin, but exact names of producers are unclear), 3 samples oil paints of Russian brand name «Ленинградские краски» were selected for analyses. Also were analyzed scraped samples of yellow and blue oil paint layers from wall of main building of the NUM. Images of tested samples are shown on the Fig. 1.



Figure 1. The selected samples of oil paints (a), ochre paints (b), and scraped from wall of the NUM oil paints (c)

For the X-ray diffraction analyses, weighted samples of oil paints were dried 48 hour at 2000C in drying cabinet T6200 (Heraeus) and then ashed 6 hours at 6000C in muffle furnace K1253F(Heraeus). Ochre paint samples were not ashed. For the atomic absorption analyses, dried and accurately weighted samples were digested in suitable acid mixture of HCl, HNO₃, HClO₄, H₂O₂ using microwave digesting machine MLS1200 (Milestone) which was differently programmed for each type of sample. Reference solutions (Merck) for the atomic absorption measurements were 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1.0, 2.0 ppm for all five elements Cd, Se, As, Cr, and Pb. Right before atomic absorption measurements, the digested samples were diluted with blank solution in ratio from 1:1 to 1:100, because of high concentration of desired elements in digested samples. Atomic absorption measurements were done on Solaar5M (Thermo Elemental) spectrometer using default setting of the spectrometers own software [3]. Sample preparation and measuring procedures were commonly used ones [4], so we hope that total relative error of our determinations were not exceeding 15 %.

Concentrations of elements Cd, Se, As, Cr, and Pb determined by atomic absorption method are shown in the table below. Concentrations are given in milligrams per a kilogram of initial weight of sample (wet weight of oil paint and dry weight of ochre paint).

As seen from the table, cadmium content in samples 16 and 17 (paint scraps from the wall of the NUM main building) are respectively 20 and 12 mg/kg and in other paint samples cadmium is not exceeding 2 mg/kg. Cadmium and compounds of cadmium are classified as B1 group human carcinogens [3]. The US Environmental Protection Agency (EPA) estimates tolerable concentration (TC) of cadmium in air as 0.06 μg/m³ for an inhalation exposure, and TC for a dietary exposure 0.001mg/kg/day (0.001 mg per a kg of body weight, per a day) [5]. Much higher than TC content of cadmium in paint scraps of the NUM building might create high level of cadmium inhalation exposure to all indoor workers, and specially to workers who will scrap these old layers of paint during repairing works.

Sample number	Sample name	Element concentration, mg/kg (ppm)				
		Cd	Pb	Se	Cr	As
1	Honglian Red	1.1	314	50	68	0.0
2	Honglian Yellow	1.1	13240	30	2170	0.0
3	Honglian, Blue	1.1	13.3	65	47	16
4	Honglian, Green	0.0	4760	0.0	1175	37
5	Chulei, Yellow	1.0	25480	26	2334	74
6	Chulei, Blue	1.1	5.8	38	16	7.2
7	Chulei, Green	1.1	0.2	51	2.9	29
8	Chulei, Red	1.4	3571	88	93	57
9	Shunshiyouqi, Yellow	1.2	8826	28	1873	54
10	Shunshiyouqi, Red	2.0	985	27	249	43
11	Shunshiyouqi, Blue	2.0	35	27	3.4	111
12	Shunshiyouqi, Green	1.8	6752	50	1657	0.0
13	Ленинградские краски, Red	1.2	1251	20	2.5	32
14	Ленинградские краски, Green	1.5	838	1.0	3.5	35
15	Ленинградские краски, Blue	1.7	1086	0.0	3.0	9.3
16	NUM wall paint sample, Blue	20	238	26	365	82
17	NUM wall paint sample, Yellow	12	1979	46	1277	110
18	Ochre_Green_1	0.2	65	9	64	28
19	Ochre_Green_2	0.3	151	23	33	26
20	Ochre_Green_3	1.3	102	23	169	36
21	Ochre_Dark Blue	<0.05	8.9	20	13	35
22	Ochre_Light Blue	0.4	16	63	21	23
23	Ochre_Yellow	0.2	9086	56	2820	33
24	Ochre_Yellowish Red	2.1	2997	214	79	743
25	Ochre_Brownish Red	<0.05	723	172	218	18

Lead content in the yellow and red color Chinese paints are high as 300–25000 mg/kg and low as below 40 mg/kg in the blue color paints. It is well known a health hazards of a lead and lead based paints [6], so the US Consumer Product Safety Commission (CPSC) is banned lead containing paints for any indoor use since 1978. Therefore the investigated red and yellow color paints may be used only for outdoor works. As shown the paint ash X- ray diffraction measurements, crystal structure of lead compounds in these paints are oxidized carbonates of lead $Pb_3CO_5 \cdot 2PbO$ and $PbCO_3 \cdot 2PbO$. We suppose that the part of initial lead carbonates were oxidized during high temperature ashing of samples in furnace. As shows in the table, selenium content in oil paints not exceeds 90 mg/kg and reaches 214 and 176 mg/kg in the yellowish and brownish red color ochre paints (sample 24 and 25). Selenium is not toxic, but long term inhalation-ingestion exposure higher than 0.4 mg/day will be harmful [7]. Therefore construction workers, sellers of ochre paint powders must work wearing a safety mask to avoid inhalation of ochre paint dust.

Chromium is detected in yellow and green color oil paints and yellow color ochre paints (samples 2, 4, 5, 9, 12, 23) as much as 1175–2820 mg/kg. Sixvalent chromium (Cr^{6+}) is well known human carcinogen. In accordance with the EPA standard, chromium tolerable exposure per a day for an adult male is $35 \mu g/day$, for an adult female is $25 \mu g/day$ [8]. According to the EPA, chromium content in drinking water must be below 0.1 mg/l [9] and in accordance with the US Occupational Safety and Health Administration (OSHA) chromium in dust air must be below $5 \mu g/m^3$ [10]. Painting floors with yellow color oil paint is wide spread practice in Mongolia. As shows numbers in table above, due to this practice, indoor air may be constantly contaminated with chromium and lead. For example, a classroom floors in ordinary high schools in Mongolia are repainted each year during summer vacation time. If suppose 1 kg oil paint spending each summer for repainting of floor of classroom, a paint chips that scraps from the floor and spreads in classroom air as a microscopic dust particles will be also 1kg during one academic year. It will contain 1.28–2.82 g of chromium, and if suppose 180 days per an academic year, the floor of classroom will produce per a day moveable with dust chromium amount 200–450 times as the EPA per a day standard for adult male.

While the oil paint samples contain arsenic up to 111 mg/kg (33.6 mg/kg averagely), arsenic content in yellowish red ochre paint (sample 24) soars to very high content of 740mg/kg. Arsenic is a high toxic poison and classified as a group A human carcinogen, so the EPA is defined arsenic tolerable daily level goal as zero [11]. But completely removing arsenic from all human habitation environments is still impossible. So the EPA currently established arsenic TC in drinking water low as $10 \mu g/l$, TC in air as

$2\mu\text{g}/\text{m}^3$.

The discovered high level of arsenic content in paints is very concerning fact. In these circumstances, a reduced use of certain Chinese origin yellow and red oil and ochre paints for indoor design works will reduce contaminant level of arsenic and also other heavy metals as lead, chromium, and cadmium. It will significantly reduce a number of adverse health effect cases caused by presence of these elements in every day environment.

6. Impact of pollution and inspection of pollution

The most serious negative impact due to air pollution is a negative impact on public health. Not only human beings but also plants, animals, as well as environmental degradation and constructions and buildings may receive certain damages due to air pollution. According to the research data, due to growing air pollution, during winter months the spread of respiratory diseases has been increasing especially among children; it has been validated that 93.77 % cases of diseases cause from the air polluting substances. For instance, air pollution is the 90.91 % cause for children's bronchitis. Reconnoitering research based on pediatric hospital has proved that in sources of overall diseases 38.3 % was accounted for air dust source, and overall polluting substance based diseases accounted for 43.14 %. Researchers have suggested that the increased allergic based diseases and cancer causes could be linked to the air pollution as well. Due to the lack of sufficient research on public health and air pollution correlation there has not been given an adequate conclusion on this matter.

There are four permanent watch posts in Ulaanbaatar city where air quality is tested, monitored and measured regularly by checking the daily average content of sulfur dioxide and nitrogen dioxide in the air. UB-1 watch post is located at Khan-Uuldistrict's 3d khoroo's industrial district, UB-2 watch post is located at nearby Bayangoldistrict's West 4 road, UB-3 watch post is located at Songinokhairhandistrict's Bayankhoshuu and UB-4 watch post is located at Bayanzurkhdistrict's 13thmicro district. According to world standard the watch posts are situated and installed according to the population density, geographical location and size in order to produce precise and quality data. For instance, Japan installs watch posts per 75 thousand people, and if followed such example Ulaanbaatar city should have 14 watch posts installed that will allow to control and monitor air pollution effectively.

7. Conclusions and recommendations

High level of concentration 300–25000 mg/kg for lead, 1280–2820 mg/kg for chromium, up to 74 mg/kg for arsenic are detected in all samples of yellow and red color oil paints of 3 selected Chinese origin brands. Alarming high concentration of arsenic -740 mg/kg – is detected in yellowish red color ochre paint.

As shows our AAS analyses results, the yellow and red color Chinese paints of above mentioned brand names might be hazardous and even dangerous if they will be used to paint interior of public and residential house buildings which will create potentially contaminated indoor environment to human.

The discovered high level of lead, chromium, and arsenic content in paints is concerning fact. A use of certain Chinese origin yellow and red oil and ochre paints for indoor design works must be reduced significantly or if possible, must be banned at all.

Future research must be focused on much more extensive and detailed investigation of lead, chromium, and arsenic in all paint brand names available on Mongolian market. Results of such research may become essential guide document for government import licensing-banning legal authority, for importers in choosing of proper paint brands to be imported into country.

For more detailed analysis of pollution it is necessary to study too mechanisms of diffusion of particles with using the fractal approach and method of fractional order derivatives [12–15].

Список литературы

1. URL: <http://www.inchem.org/pages/icsc.html>.
2. URL: <http://lc.gov.mn/law/class/101/detail/1003230002/>
3. Мянганбаатар Т., Даваасурэн Л., Үлэмжсонин Б., Энхтур Л., Barbara Wick, Галбадрах Р., Сборник МУИС. Серия: Физика. № 355 (16). С. 30–35. 2011.
4. Analytical Methods for Atomic Absorption Spectroscopy. P. 310. Copyright © 1996, the Perkin Elmer Inc.
5. URL: <http://www.epa.gov/ttn/atw/hlthef/cadmium.html>.
6. URL: <http://www.epa.gov/lead/pubs/leadinfo.htm>.
7. URL: <http://water.epa.gov/drink/contaminants/basicinformation/selenium.cfm>.

8. Vincent J. B., Recent advances in the nutritional biochemistry of trivalent chromium. Proceedings of the Nutrition Society. 63 (1). P. 41–47. 2007.
9. URL: <http://water.epa.gov/drink/info/chromium/index.cfm>.
10. URL: http://www.osha.gov/pls/oshaweb/owadisp.show_document?p_table=STANDARDS&p_id=13216.
11. URL: <http://www.epa.gov/ttn/atw/hlthef/arsenic.html>.
12. Arkhincheev V. E., Random walks on comb model and its generalizations. Chaos. V. 17. P. 043102 (2007).
13. Архинчев В. Е., Обобщенный закон Фика для аномальной диффузии в многомерной гребешковой модели, Письма в ЖЭТФ. Т. 86. № 8. С. 580–583 (2007).
14. Архинчев В. Е., Физические механизмы дробно-фрактальных асимптотик переходных токов в неупорядоченных средах. ЖЭТФ. Т. 136. С. 560–565 (2009).
15. Arkhincheev V. E., The unified continuum description of subdiffusion random walks in multidimensional comb model. Physica A. 2010. V. 386. P. 1–16.

References

1. URL: <http://www.inchem.org/pages/icsc.html>.
2. URL: <http://lc.gov.mn/law/class/101/detail/1003230002/>
3. Myanganbaatar T., Davaasyren L., Ylemzhonin B., Enkhtyr L., Barbara Wick, Galbadrakh R., Sbornik MUIS. Seriya:URL: Fizika. № 355 (16). S. 30–35. 2011.
4. Analytical Methods for Atomic Absorption Spectroscopy. P. 310. Copyright © 1996, the Perkin Elmer Inc.
5. URL: <http://www.epa.gov/ttn/atw/hlthef/cadmium.html>.
6. URL: <http://www.epa.gov/lead/pubs/leadinfo.htm>.
7. URL: <http://water.epa.gov/drink/contaminants/basicinformation/selenium.cfm>.
8. Vincent J. B., Recent advances in the nutritional biochemistry of trivalent chromium, Proceedings of the Nutrition Society. 63 (1). P. 41–47. 2007.
9. <http://water.epa.gov/drink/info/chromium/index.cfm>.
10. URL: http://www.osha.gov/pls/oshaweb/owadisp.show_document?p_table=STANDARDS&p_id=13216
11. <http://www.epa.gov/ttn/atw/hlthef/arsenic.html>.
12. Arkhincheev V. E., Random walks on comb model and its generalizations. Chaos. V. 17. P. 043102 (2007).
13. Arkhincheyev V. E., Obobshchenny zakon Fika dlya anomalnoy diffuzii v mnogomernoy grebeshkovoy modeli. Pisma v ZhETF. Т. 86. № 8. S. 580–583 (2007).
14. Arkhincheyev V. E., Fizicheskiye mekhanizmy drobno-fraktalnykh asimptotik perekhodnykh tokov v neuporyadochennykh sredakh. ZhETF. Т. 136. S. 560–565 (2009).
15. Arkhincheev V. E., The unified continuum description of subdiffusion random walks in multidimensional comb model. Physica A. 2010. V. 386. P. 1–16.

Статья поступила в редакцию 25.05.2013

УДК 537.915
ББК 22.317

Алексей Олегович Орлов
младший научный сотрудник,
Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: Orlov_A_O@mail.ru
Георгий Степанович Бордонский
доктор физико-математических наук, профессор
заведующий лабораторией геофизики криогенеза,
Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: lgc255@mail.ru

Свойства переохлажденной воды при температуре ниже -40°C ¹

Выполнено экспериментальное исследование переохлажденной воды в нанопористых силикатах при их охлаждении до -140°C . Были исследованы нанопористые силикаты МСМ-41 с диаметром цилиндрических пор 3.5 нм и SBA-15 (диаметр пор 8.5 нм), использовались методы диэлектрической спектроскопии и измерения собственных электрических флуктуаций на низких частотах. Было обнаружено возникновение нелинейных свойств среды при температуре ниже -40°C , которое регистрировалось в виде зависимости ёмкости ячейки с образцом от амплитуды пробного сигнала, а также увеличения собственных шумов. Предполагается, что наблюдаемый эффект связан с ранее предсказанным сегнетоэлектрическим переходом вблизи -40°C .

Ключевые слова: нанопоры, диэлектрическая спектроскопия, фазовый переход.

Aleksey Olegovich Orlov
Junior Researcher,
Institute of Natural Resources, Ecology and Cryology,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Chita, Russia), e-mail: Orlov_A_O@mail.ru
Georgiy Stepanovich Bordonskiy
Doctor of Physics and Mathematics, Professor,
Chief of the Laboratory of Cryogenesis Geophysics,
Institute of Natural Resources, Ecology and Cryology,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Chita, Russia), e-mail: lgc255@mail.ru

Properties of Supercooled Water at a Temperature Below -40°C

The experimental investigation of supercooled water in nanoporous silica at the temperatures down to -140°C was carried out. Nanoporous silica MCM-41 with 3.5 nm diameter cylindrical pores and SBA-15 (8.5 nm pores) were investigated using the methods of dielectric spectroscopy and measuring proper electrical fluctuations at low frequencies. Occurrence of non-linear media properties at the temperature below -40°C was found, which was revealed in the form of the registered cell capacity dependence on voltage amplitude in it, as well as noise increase. The effect observed is supposed to be related to the earlier predicted ferroelectric phase transition close to -40°C .

Keywords: nanopores, dielectric spectroscopy, phase transition.

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 12-05-31052).

Введение. В работах [1; 2] при использовании диэлектрической спектроскопии был обнаружен сегнетоэлектрический фазовый переход при температуре вблизи -38°C . Он был ранее предсказан в [3] для объёмной воды. Вместе с тем, о таком фазовом переходе в работах других авторов не сообщалось.

Целью настоящей работы явилось изучение нелинейных явлений в электрической цепи, содержащей ячейку с увлажнённым нанопористым материалом при температурах ниже -38°C , для подтверждения ранее полученного результата [1; 2]. Возникновение нелинейных явлений в электрической цепи можно связать с фазовым переходом из параэлектрического в сегнетоэлектрическое состояние.

Методы измерений. Для регистрации резкого изменения электрической поляризации среды был использован метод измерения собственных электрических флуктуаций [4]. Известно, что любой резистор является источником шумового напряжения (шума Джонсона). Если резистор подключен к конденсатору (эквивалентная схема ёмкостной ячейки с исследуемой средой) и их импеданс резко изменяется, то это приводит к изменению шумового напряжения на входном сопротивлении регистрирующего сигнала усилителя. Таким способом можно зарегистрировать фазовый переход в исследуемом веществе. Однако в сегнетоэлектрической среде имеет место и другой вид электрических флуктуаций – нестационарный шум Баркаузена, возникающий на низких частотах из-за скачкообразного изменения электрической поляризации среды при изменении доменной структуры образца. В настоящей работе были исследованы именно шумы Баркаузена, преобладающие над тепловыми шумами на частотах ниже 1 кГц [4].

Кроме того, мы использовали диэлектрические измерения при различных амплитудах пробного сигнала на ячейке. Возникновение нелинейности, то есть сегнетоэлектрического состояния, должно было приводить к зависимости результатов измерений от амплитуды пробного сигнала.

Экспериментальная процедура. Как отмечалось в [1; 5], особым свойством воды в нанопорах является понижение температуры фазового перехода жидкой воды в лёд в зависимости от диаметра пор. Переохлаждение может достигать температуры приблизительно равной -90°C для пор цилиндрической формы при их диаметре 1 нм [6]. Данная особенность позволяет изучать свойства переохлаждённой воды ниже -40°C в так называемой области температур «no mans land» [7] (недоступная область для существующих технологий). Авторы работ [8; 9] считают, что свойства поровой воды близки свойствам объёмной воды при их переохлаждении. Некоторые авторы считают, например [10], что переохлаждение воды в порах объясняется повышением давления. Если это так, то в определённой степени можно также моделировать свойства объёмной переохлаждённой воды по свойствам поровой в наноразмерных порах.

В данном исследовании использовали нанопористые силикатные материалы MCM-41 и SBA-15 [11] с диаметрами цилиндрических пор 3.5 нм и 8.5 нм соответственно, имеющие температуры замерзания -38°C и -10°C .

Импедансы ёмкостной ячейки со средой определяли LCR-измерителем GW-INSTEK LCR-78110G (Тайвань).

Напряжения шумов усиливали двухкаскадным операционным усилителем с полосой пропускания 1–100 Гц и общим коэффициентом усиления 1000. Сигнал выпрямляли диодным детектором, постоянную составляющую пропускали через фильтр низких частот с полосой 0.25 Гц.

Температурные зависимости находили при помещении ячейки в термокамеру, охлаждаемую холодными парами азота, аналогично работе [1].

Результаты экспериментов. На рис. 1 приведены результаты измерений ёмкости ячейки с MCM-41 в зависимости от амплитуды напряжения. Размеры используемой ячейки в виде плоского конденсатора $30 \times 30 \times 5$ мм³.

Обнаруживается сильно выраженная зависимость измерений ёмкости от амплитуды напряжения U_0 . Для U_0 , равной 10 мВ, наблюдали увеличение ёмкости в 100 раз, по сравнению с напряжением 0.5–2 В при температуре ниже -40°C . При этом резко возрастали флуктуации измеряемой величины.

На рис. 2а приведены результаты измерений действительной части импеданса для того же образца и условий измерений, соответствующих рис. 1.

Наблюдали возникновение отрицательного сопротивления при температурах ниже -40°C . При переходе на частоту 1 кГц действительная часть импеданса имела только положительные значения (рис. 2б).

На рис. 3а представлены результаты измерений выпрямленного напряжения шумов для двух

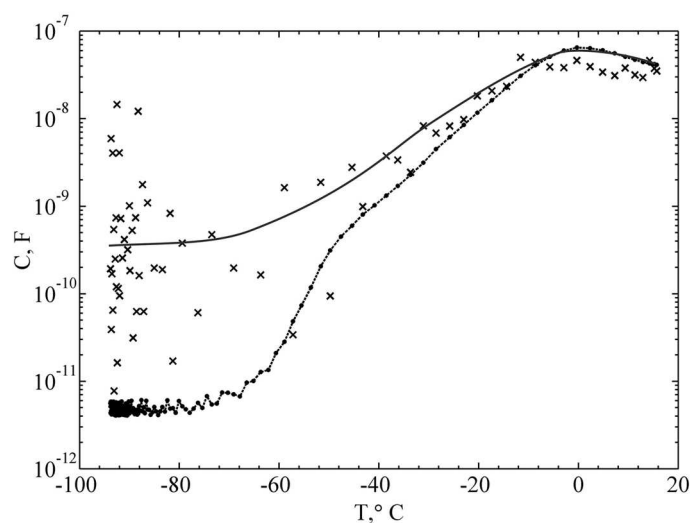


Рис. 1. Зависимости измеренной емкости ячейки с увлажненным образцом MCM-41 от температуры при различных амплитудах напряжений на ячейке на частоте 20 Гц. \times – $U_0 = 0.01 V$, \bullet – $U_0 = 2 V$

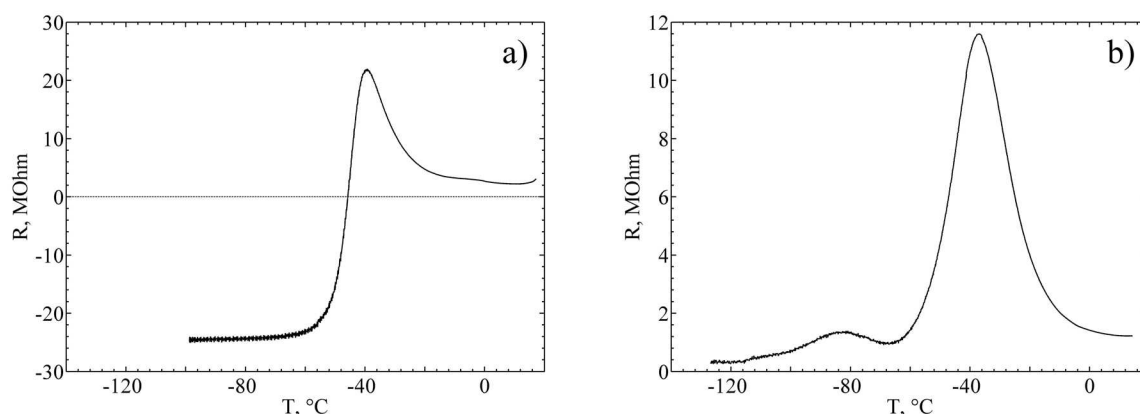


Рис. 2. Зависимость последовательного сопротивления ячейки с увлажненным MCM-41 от температуры на частотах: а) 20 Гц; б) 1 кГц. Измерения выполнены при нагревании образца

увлажнённых материалов – MCM-41 и SBA-15 в процессе охлаждения сред.

Наблюдается существенное различие шумового напряжения, которое для MCM-41 достигает экстремума вблизи $-40^\circ C$. Можно было бы предположить, что этот эффект определяется фазовым переходом первого рода в данной точке. Однако результаты измерений на SBA-15 отрицают данное предположение, что следует из рис. 3б. На этом рисунке приведены результаты термометрии охлаждаемого образца SBA-15 при постоянной скорости подачи холодных паров азота, определяемой стабилизированным током через резистор испаритель. Из рис. 3б видно, что производная температуры по времени резко изменяется вблизи $-10^\circ C$, где ожидался фазовый переход воды в лёд в более крупных порах SBA-15. При этом, однако, не наблюдали никакого возрастания шумов ячейки (рис. 3а).

Интересно отметить гистерезис шумов для SBA-15, которые резко возрастали при нагревании, после охлаждения до температур $\sim -150^\circ C$. Шумы возрастали при приближении к $-40^\circ C$, хотя ожидали твёрдого состояния воды при этой температуре в порах большего размера. Однако известно, что в таких порах возможно существование незамёрзших плёнок воды между стенками и кристалликами льда, образовавшимися в центре пор. Наблюдаемый гистерезис можно связать с особой нелинейностью процессов превращений воды в порах вблизи $-40^\circ C$.

Следует также отметить, что аналогичное возрастание шумов в работе [12] связали с переходом жидких кристаллов в сегнетоэлектрическое состояние. Спектральная плотность низкочастотного

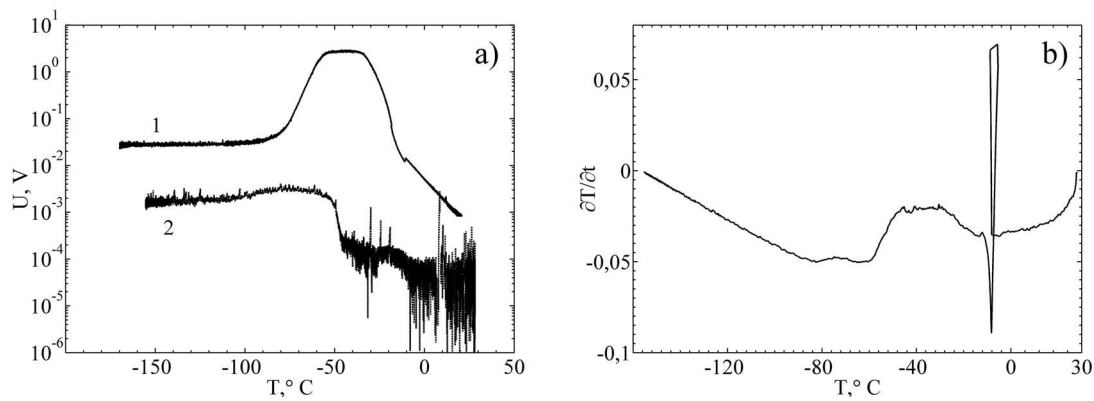


Рис. 3: а) результаты измерений выпрямленного электрического шумового напряжения после его усиления в зависимости от температуры ячейки: 1 – MCM-41, весовая влажность 56%, что соответствует 70% заполнения объема пор; 2 – SBA-15 с $W=110\%$, что соответствует полному заполнению пор; б) производная температуры по времени для SBA-15

шумового напряжения ниже некоторой температуры возросла на порядок величины и оставалась постоянной при последующем охлаждении.

На рис. 4 приведены результаты выполненных нами измерений выходных флуктуаций после их детектирования усилителем, поставленным в особый режим. Первый каскад вводили в режим насыщения, отключая резистор на входе, когда его выходное напряжение достигало возможного верхнего предела. Коэффициент усиления данного каскада выбирали равным 5. Такой усилитель выводится из насыщения импульсами напряжения обратной полярности, которые возникают, например, в случае шумов Баркгаузена. Из графика рис. 4 следует существенное возрастание шума при температуре ниже -40°C .

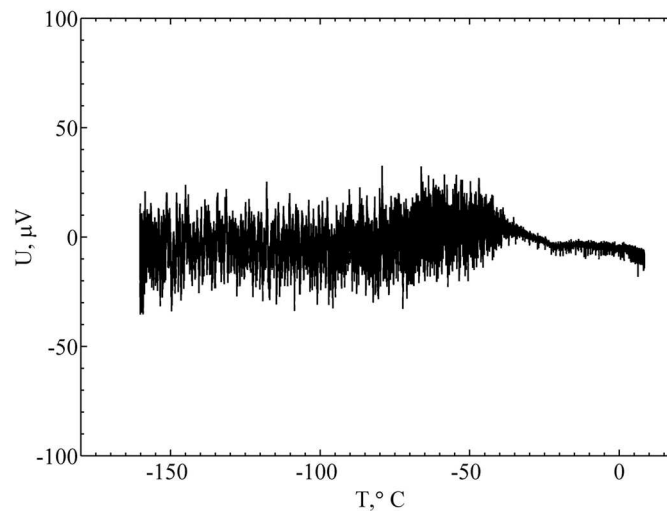


Рис. 4. Результаты измерений шумов ячейки с MCM-41 при изменении температуры с усилителем, находящимся в режиме насыщения и регистрирующего импульсы высокого входного напряжения, по возрастанию выходных флуктуаций. Цикл охлаждения образца. Весовая влажность образца 44%

Выводы

Видоизменённый метод диэлектрической спектроскопии, связанный с измерениями на разных амплитудах сигнала измерительной установки, позволил обнаружить нелинейность среды и высокие значения диэлектрической проницаемости при температуре ниже -40°C . Измерения низкочастотных шумов также указывают на особую температуру: -40°C , ниже которой шумы существенно

выше, чем для других значений температуры. Измерения для SBA-15 показали, что фазовый переход первого рода не изменяет уровень шумов в процессе охлаждения.

Таким образом, совокупность низкочастотных электрических измерений нанопористых силикатов подтверждает существование фазового перехода воды в сегнетоэлектрическое состояние при температуре вблизи -40°C . Такой переход может иметь важное значение для поведения нанопористых материалов при их охлаждении, так как образующаяся новая фаза будет иметь большое значение химического потенциала. Его изменение может активировать физико-химические процессы при глубоком переохлаждении материалов, хотя из простых оценок химические процессы в средах должны замедляться.

Список литературы

1. Бордонский Г. С., Орлов А. О. Изучение мезоструктурированного силиката MCM-41 методом низкочастотной диэлектрической спектроскопии // Конденсированные среды и межфазные границы. 2011. Т. 13. № 1. С. 5–12.
2. Fedichev P. O., Menshikov L. I., Bordonskiy G. S., Orlov A. O. Experimental evidence of the ferroelectric nature of the λ -point transition in liquid water // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 2011. Т. 94. Вып. 5–6. С. 433–437.
3. Меньшиков Л. И., Федичев П. О. Возможное существование сегнетоэлектрического состояния переохлажденной воды // Журнал физической химии. 2011. Т. 85. № 5. С. 996–998.
4. Бедняков П. С. Исследование диэлектрических свойств сегнетоэлектрических кристаллов и тонких пленок методом тепловых шумов: канд. дис. 2011. М.: МГУ. 136 с.
5. Schreiber A., Kotelsen I., Findenegy G.H. Melting and freezing of water in ordered mesoporous silica materials // Phys. Chem. Chem. Phys. 2001. V. 3. P. 1185–1195.
6. Limmer D. T., Chandler D. Phase diagram of supercooled water confined to hydrophilic nanopores // J. Chem. Phys. 2012. V. 137. p. 044509/11.
7. Stanley H. E., Buldyrev S. V., Franzese G., Halvin S. et.al. Correlated randomness and switching phenomena // Physica A. Stat. Mech. Applic. 2010. V. 389. P. 2880–2893.
8. Fedichev P. O., Menshikov L. I. How does confinement in nano-scale pores change the thermodynamic properties and the nature of phase transitions of water? Preprint arXiv: 1206.3470 [cond-mat.soft] 15 Jan 2012. 3p.
9. Castrillon S. R.-V., Giovambattista N., Arsay I. A., Debenedetti P. G. Evolution from surface-influenced to bulk-like dynamics in nanoscopically confined water // J. of Phys. Chem. B. 2009. V. 113. P. 7973–7976.
10. Jazdzewska M., Sliwinska-Bartkowiak M. M., Beskrovnyy A. I., Vasiloskiy S.G. et.al. Novel ice structures in carbon nanopores: pressure enhancement effect of confinement // Phys. Chem. Chem. Phys. 2011. V. 13. P. 9008–9013.
11. Парфенов В. А., Кирик С. Д. Получение мезоструктурированных силикатных материалов с контролируемыми размерами пор в присутствии цетилдиметиламина // Труды V Ставеровских чтений. Ультрадисперсные порошки, наноструктуры, материалы: получение, свойства, применение. 2009. Красноярск. С. 318–322.
12. Musevic I., Kityk A., Skarabot M., Blinc R. Polarization noise in a ferroelectric liquid crystal // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79. No 6. P. 1062–1065.

References

1. Bordonskiy G. S., Orlov A. O. Izucheniye mezostrukturnirovannogo silikata MSM-41 metodom nizkochastotnoy dielektricheskoy spektroskopii // Kondensirovaniye sredy i mezhfaznyye granitsy. 2011. T. 13. № 1. S. 5–12.
2. Fedichev P. O., Menshikov L. I., Bordonskiy G. S., Orlov A. O. Experimental evidence of the ferroelectric nature of the λ -point transition in liquid water // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 2011. Т. 94. Вып. 5–6. С. 433–437.

3. Menshikov L. I., Fedichev P. O. Vozmozhnoye sushchestvovaniye segnetoelektricheskogo sostoyaniya pereokhlazhdeniya vyody // Zhurnal fizicheskoy khimii. 2011. T. 85. № 5. S. 996–998.
4. Bednyakov P. S. Issledovaniye dielektricheskikh svoystv segntoelektricheskikh kristallov i tonkikh plenok tuplovykh shumov: kand. dis. 2011. M.: MGU. 136 s.
5. Schreiber A., Kotelsen I., Findeney G.H. Melting and freezing of water in ordered mesoporous silica materials // Phys. Chem. Chem. Phys. 2001. V. 3. P. 1185–1195.
6. Limmer D. T., Chandler D. Phase diagram of supercooled water confined to hydrophilic nanopores // J. Chem. Phys. 2012. V. 137. p. 044509/11.
7. Stanley H. E., Buldyrev S. V., Franzese G., Halvin S. et.al. Correlated randomness and switching phenomena // Physica A. Stat. Mech. Applic. 2010. V. 389. P. 2880–2893.
8. Fechichev P. O., Menshikov L. I. How does confinement in nano-scale pores change the thermodynamic properties and the nature of phase transitions of water? Preprint arXiv: 1206.3470 [cond-mat.soft] 15 Jan 2012. 3p.
9. Castrillon S. R.-V., Giovambattista N., Arsay I. A., Debenedetti P. G. Evolution from surface-influenced to bulk-like dynamics in nanoscopically confined water // J. of Phys. Chem. B. 2009. V. 113. P. 7973–7976.
10. Jazdzewska M., Sliwinska-Bartkowiak M. M., Beskrovnyy A. I., Vasiloskiy S.G. et.al. Novel ice structures in carbon nanopores: pressure enhancement effect of confinement // Phys. Chem. Chem. Phys. 2011. V. 13. P. 9008–9013.
11. Parfenov V. A., Kirik S. D. Polucheniye mezostrukturirovannykh silikatnykh materialov s kontroliruyemyimi razmerami v prisutstvii tsetildimetilamina // Trudy V Staroverovskikh chteny. Ultradispersionnye poroshki, nanostruktury, materialy: polucheniye, svoystva, primeneniye. 2009. Krasnoyarsk. S. 318–322.
12. Musevic I., Kityk A., Skarabot M., Blinc R. Polarization noise in a ferroelectric liquid crystal // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79. No 6. P. 1062–1065.

Статья поступила в редакцию 24.04.2013

УДК 517.956
ББК В161.912

Алексей Олегович Потехо
кандидат физико-математических наук, доцент,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: potehoao@rambler.ru

Об эффективном решении смешанных краевых задач на плоскости для уравнения Лапласа ¹

Рассмотрены краевые задачи в квадранте и полуплоскости с составной границей в виде лучей, на которых заданы различные граничные условия, включая неоднородное условие третьего рода. Методом свёртывания разложений Фурье решения задач выражены через решение классической задачи Дирихле в полуплоскости.

Ключевые слова: смешанные краевые задачи, неоднородное граничное условие третьего рода, метод свёртывания разложений Фурье.

Aleksey Olegovich Potekho
Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: potehoao@rambler.ru

On Effective Solution of Mixed Boundary Value Problems on the Plane for Laplace's Equation

The paper considers boundary value problems in a quadrant and a half-plane with integral boundary in the form of rays on which different boundary conditions are specified, including the heterogeneous condition of the third kind. Using the method of convolution of Fourier expansions, problem solutions are expressed in terms of the classical solution of the Dirichlet problem in the half plane.

Keywords: mixed boundary value problems, inhomogeneous boundary condition of the third kind, method of convolution of Fourier expansions.

В теории краевых задач математической физики одними из наиболее сложных являются смешанные задачи, содержащие граничные условия третьего рода [1; 2]. Поэтому имеет большой интерес построение явных решений смешанных краевых задач в различных областях.

1. Решение задачи типа (1, 3) в квадранте. Рассмотрим краевую задачу в квадранте $D(x > 0, y > 0)$ со смешанными граничными условиями 1-го и 3-го рода на лучах $s_1(x = 0, y > 0)$ и $s_2(x > 0, y = 0)$ вида

$$\Delta u = 0, \quad x > 0, \quad y > 0; \quad (1)$$

$$u|_{x=0} = 0, \quad \partial_y u - \gamma u|_{y=0} = \varphi(x), \quad (2)$$

где $\partial_x^n = \partial^n / \partial x^n$, Δu – оператор Лапласа, $\gamma = \text{const} > 0$, $\varphi(x)$ – заданная непрерывная функция; x, y – декартовы координаты. Граничное условие третьего рода (2) соответствует наличию на границе s_2 слабопроницаемой плёнки. Методом свёртывания разложений Фурье [3; 4] выразим решение задачи (1), (2) через решение классической задачи Дирихле с сохранением граничной функции (2).

Представим решение задачи (1), (2) в виде

$$u(x, y) = - \int_0^{\infty} e^{-\gamma t} v(x, y + t) dt, \quad x > 0, \quad y > 0, \quad (3)$$

¹Работа выполнена в рамках Государственного задания вузу Минобрнауки РФ (код проекта 1.3985.2011).

где функция $v(x, y)$ удовлетворяет достаточно слабому условию на бесконечности вида

$$|v(x, y)| = O(e^{\alpha y}), \quad y \rightarrow +\infty, \quad \alpha < \gamma.$$

Функция $u(x, y)$ (3) является решением третьей краевой задачи в полуплоскости $y > 0$ вида $\Delta u = 0$, $\partial_y u - \gamma u|_{y=0} = \psi(x)$, где $v(x, y)$ – решение соответствующей задачи Дирихле $\Delta v = 0$, $y > 0$; $v|_{y=0} = \psi(x)$, т. е. формула (3) выражает решение третьих краевых задач через решение первых краевых задач в полуплоскости с сохранением граничных функций [3; 4].

Из равенства (3) для функции $v(x, y)$ в квадранте $D(x > 0, y > 0)$ получаем задачу Дирихле вида

$$\Delta v = 0, \quad v|_{x=0} = 0, \quad v|_{y=0} = \varphi(x). \quad (4)$$

Отметим, что граничное условие третьего рода при $y = 0$ (2) для функции $u(x, y)$ (3) выполняется тождественно для любой дифференцируемой по x функции $v(x, y)$. Решение задачи (4) строится по формуле Пуассона в однократных квадратурах:

$$v(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varphi_1(p) dp}{(x-p)^2 + y^2}, \quad (5)$$

где

$$\varphi_1(x) = \begin{cases} \varphi(x), & x > 0 \\ -\varphi(-x), & x < 0 \end{cases}.$$

При этом функция $v(x, y)$ (5) является решением задачи Дирихле в полуплоскости $y > 0$ вида

$$\Delta v = 0, \quad y > 0; \quad v|_{y=0} = \varphi_1(x), \quad (6)$$

где граничная функция $\varphi_1(x)$ определяется для всех $x \in R$ посредством продолжения граничной функции $\varphi(x)$ на полуось $x < 0$ по нечётному закону. Отметим, что для широкого класса граничных функций $\varphi(x)$ интеграл (5) вычисляется в конечном виде. Например, для функции $\varphi(x)$ вида кусочно-непрерывных функций, составленных из многочленов, функция $v(x, y)$ (5) выражается в конечном виде через элементарные функции.

Таким образом, решение смешанной задачи (1), (2) выражается через решение $v(x, y)$ задачи Дирихле (6) в полуплоскости по формулам (3), (5).

2. Решение задачи типа (2, 3) в квадранте. Рассмотрим в квадранте $D(x > 0, y > 0)$ смешанную краевую задачу с граничными условиями 2-го и 3-го рода:

$$\Delta u = 0, \quad \partial_x u|_{x=0} = 0, \quad \partial_y u - \gamma u|_{y=0} = \varphi(x). \quad (7)$$

Представляя решение данной задачи в виде (3), для функции $v(x, y)$ получим смешанную краевую задачу типа (2, 1):

$$\Delta v = 0, \quad \partial_x v|_{x=0} = 0, \quad v|_{y=0} = \varphi(x).$$

Решение последней задачи также строится по формуле Пуассона:

$$v(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varphi_2(p) dp}{(x-p)^2 + y^2}, \quad (8)$$

где

$$\varphi_2(x) = \begin{cases} \varphi(x), & x > 0 \\ \varphi(-x), & x < 0 \end{cases},$$

при этом функция $v(x, y)$ (8) является решением задачи Дирихле в полуплоскости $y > 0$ вида

$$\Delta v = 0, \quad y > 0; \quad v|_{y=0} = \varphi_2(x), \quad (9)$$

где функция $\varphi_2(x)$ определяется для $x \in R$ посредством продолжения граничной функции $\varphi(x)$ на полуось $x < 0$ по чётному закону. Как и выше, функция $v(x, y)$ (8) для широкого класса граничных функций $\varphi(x)$ строится в конечном виде. При этом решение смешанной краевой задачи (7) выражается в однократных квадратурах через решение задачи Дирихле (9) в полуплоскости по формулам (3), (8).

3. Решение краевых задач типа (1, 3) и (2, 3) в полуплоскости. Рассмотрим на плоскости с декартовыми координатами ξ, η смешанную краевую задачу типа (1, 3) в полуплоскости $D_1(\eta > 0)$ вида

$$\partial_\xi^2 u + \partial_\eta^2 u = 0, \quad \eta > 0, \quad (10)$$

$$u|_{\eta=0, \xi < 0} = 0, \quad \partial_\eta u - \gamma u|_{\eta=0, \xi > 0} = f(\xi). \quad (11)$$

Аналитическая функция $\zeta = z^2$ конформно отображает квадрант $D(x > 0, y > 0)$ комплексной плоскости $z = x + iy$ на полуплоскость $D_1(\xi \in R, \eta > 0)$ комплексной плоскости $\zeta = \xi + i\eta$. Отсюда

$$\xi = x^2 - y^2, \quad \eta = 2xy, \quad -\infty < x < \infty, \quad 0 < y < \infty. \quad (12)$$

Обратное отображение имеет вид

$$x = \text{sign}(\eta) \sqrt{\frac{\xi + \sqrt{\xi^2 + \eta^2}}{2}}, \quad y = \sqrt{\frac{\sqrt{\xi^2 + \eta^2} - \xi}{2}}. \quad (13)$$

При этом в переменных x, y , т.е. на плоскости z , задача (10), (11) примет вид задачи (1), (2), где $\varphi(x) = f(\xi) = f(x^2)$ (12). Отсюда решение задачи (10), (11) строится по формулам (3), (5), где переменные $x = x(\xi, \eta)$, $y = y(\xi, \eta)$ имеют вид (13).

Рассмотрим смешанную задачу в полуплоскости $\eta > 0$ типа (2, 3):

$$\partial_\xi^2 u + \partial_\eta^2 u = 0, \quad \eta > 0, \quad (14)$$

$$\partial_\eta u|_{\eta=0, \xi < 0} = 0, \quad \partial_\eta u - \gamma u|_{\eta=0, \xi > 0} = f(\xi). \quad (15)$$

В переменных x, y (13) указанная задача примет вид (7), где $\varphi(x) = f(x^2)$. Отсюда решение задачи (14), (15) строится по формулам (3), (8), где переменные $x = x(\xi, \eta)$, $y = y(\xi, \eta)$ имеют вид (13).

Таким образом, решение всех рассмотренных задач выражается через решение классической задачи Дирихле в полуплоскости.

Отметим, что посредством метода конформных отображений можно существенно расширить класс областей, в которых решение смешанных краевых задач типа (1, 3) и (2, 3) выражается через решение классической задачи Дирихле в полуплоскости.

Список литературы

1. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972. 735 с.
2. Арсенин В. Я. Методы математической физики и специальные функции. М.: Наука, 1974. 431 с.
3. Холодовский С. Е. Метод свертывания разложений Фурье. Случай обобщенных условий сопряжения типа трещины (завесы) в кусочно-неоднородных средах // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45. № 6. С. 855–859.
4. Холодовский С. Е. Метод свертывания разложений Фурье. Случай трещины (завесы) в неоднородном пространстве // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45. № 8. С. 1204–1208.

References

1. Tikhonov A. N., Samarsky A. A. Uravneniya matematicheskoy fiziki. M.: Nauka, 1972. 735 s.
2. Arsenin V. Ya. Metody matematicheskoy fiziki i spetsialnye funktsii. M.: Nauk, 1974. 431 s.
3. Kholodovsy S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furye. Sluchay obobshchyonnykh uslovy sopryazheniya treshchin (zavesy) v kusochno-neodnorodnykh sredakh // Differentsialnye uravneniya. 2009. T. 45. № 6. S. 855–859.
4. Kholodovsy S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furye. Sluchay treshchin (zavesy) v neodnorodnom prostranstve // Differentsialnye uravneniya. 2009. T. 45. № 8. S. 1204–1208.

Статья поступила в редакцию 17.04.2013

УДК 548.3
ББК В372.3

Александр Александрович Сидоров
кандидат физико-математических наук, доцент,
Брянский государственный университет
(Брянск, Россия), e-mail: a-a-sidorov@yandex.ru
Елена Васильевна Старченко
аспирант,
Брянский государственный университет
(Брянск, Россия), e-mail: elena19191911@yandex.ru
Александр Александрович Матюта
аспирант,
Брянский государственный университет
(Брянск, Россия) e-mail: amatyta@gmail.com
Евгений Александрович Кульченков
старший преподаватель
Брянский государственный технический университет
(Брянск, Россия), e-mail: phbgu@yandex.ru

Зависимость радиусов атомов в бинарных ионных кристаллах с кубической решёткой от заряда ядра¹

Исследованы зависимости радиусов атомов в бинарных ионных кристаллах с кубической решёткой от заряда их ядра. Используя постулат об устойчивости кристаллической решётки, определены соотношения между радиусами ионов и параметром кристаллической решётки в бинарных кубических кристаллах со структурой NaCl, CsCl и флюорита.

Ключевые слова: ион, кристаллическая решётка, электронная плотность.

Aleksandr Alekseevich Sidorov
Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor,
Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: a-a-sidorov@yandex.ru
Elena Vasil'evna Starchenko
Postgraduate Student,
Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: elena19191911@yandex.ru
Aleksandr Aleksandrovich Matyuta
Postgraduate Student,
Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: amatyta@gmail.com
Evgeniy Aleksandrovich Kul'chenkov
Senior Lecturer,
Bryansk State Technical University
(Bryansk, Russia), e-mail: phbgu@yandex.ru

The Dependence of the Radii of the Atoms in Binary Ionic Crystals with Cubic Lattice on the Nuclear Charge

The dependence of the radii of the atoms in binary ionic crystals with cubic lattice on the charge of the nucleus is investigated. Using the postulate of the stability of the crystal lattice, we determine the ratio between the radii of the ions and the lattice parameter in binary cubic crystals with the structure of NaCl, CsCl, and fluorite.

Keywords: ion, crystal lattice, electron density.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания Минобрнауки РФ по теме «Тепловые свойства новых термоэлектрических, полупроводниковых и оптических материалов».

Введение. Размеры атомов играют важную роль как в кристаллохимии, физической химии, так и в геохимии. Располагая набором величин радиусов атомов порядка сотни элементов, можно приближенно предсказать многие тысячи значений межатомных расстояний, их разностей или отношений в различных химических соединениях [9]. За более чем 90-летнюю историю изучения кристаллических структур создано много систем радиусов атомов и ионов. Их можно подразделить на две главные группы: системы аддитивных и неаддитивных радиусов [4].

Непосредственное измерение радиусов изолированных атомов или ионов практически невозможно. Обычно с помощью физико-химических методов измеряют межъядерные расстояния в кристаллах или в газовых молекулах, из которых полумпирическим методом вычисляют аддитивные значения радиусов атомов [3]. Сумма аддитивных радиусов очень близка к величине наикратчайшего расстояния между соответствующими атомами в химическом соединении. Неаддитивные радиусы свободных атомов или ионов получаются путём квантовомеханического расчёта радиального распределения электронной плотности. Получаемые таким образом радиусы удовлетворительно коррелируют со свойствами атомов и ионов [4]. В любом случае все значения радиусов являются расчётными. На них влияют порядок связи, степень ионности, тип связи, окислительное состояние химически связанных атомов и кристаллическая или молекулярная структура. Из-за различного состояния атомов в молекуле или кристалле не может быть единого типа атомных радиусов. По типу химической связи аддитивные радиусы разделяются на металлические, ионные, ковалентные и ван-дер-ваальсовы [3].

Определение радиусов ионов в бинарных соединениях. Способ определения радиусов атомов в монокристаллических веществах, например в металлах, ковалентных и ван-дер-ваальсовых достаточно прост: достаточно разделить пополам кратчайшее межатомное расстояние, которое определяется из параметра кристаллической решётки для данной структуры [10].

Иная ситуация возникает в бинарных соединениях. Знание только типа структуры и наикратчайших межатомных расстояний d недостаточно для установления размеров отдельных ионов, так как сумма $r_a + r_k = d$ удовлетворяет бесконечному числу значений радиусов анионов и катионов. Если даже составить систему уравнений, в которой бинарные соединения имеют, например, r_a – одно значение, а r_k – количество значений, равное числу уравнений, то всё равно единственное решение определить нельзя, т. е. остается неизвестным отношение r_a/r_k .

При переходе от одного элемента к другому внутри одной подгруппы периодической системы элементов будет иметь место увеличение размеров ионов с возрастанием атомного номера [2]. Отметим, что развитие понятия радиуса иона, к сожалению, не обошлось без путаницы в терминах и определениях. Для упрощения и внесения ясности в этот вопрос Слейтер предложил для сильно электроположительных элементов считать ионный радиус меньше атомного радиуса примерно на $0,85 \text{ \AA}$, а для сильно электроотрицательных элементов больше атомного радиуса на $0,85 \text{ \AA}$. В результате этого сумма ионных радиусов даёт тот же результат, что и сумма атомных радиусов. Таким образом, Слейтер предложил брать единственный радиус для каждого типа атомов в любом виде соединений [3].

Несмотря на изложенное выше, опубликовано много работ, авторы которых оперируют величинами r_k , r_a для самых разнообразных целей, вплоть до далеко не всегда оправданных суждений о характере химической связи в кристаллах. Лишь некоторые из этих выводов справедливы хотя бы в первом приближении [6].

В решении проблемы определения ионных радиусов, по нашим представлениям, большую роль сыграл постулат Магнуса-Гольдшмидта, согласно которому кристаллическая решётка является наиболее устойчивой тогда, когда имеет место касание шарообразных ионов [6].

В настоящей работе исследованы радиусы ионов бинарных соединений с кристаллическими структурами типа NaCl, CsI и флюорита с использованием указанного постулата. При этом используются некоторые дополнения, введенные нами:

1. Согласно теореме Ирншоу, устойчивое распределение электрических зарядов ионов на определённых расстояниях друг от друга возможно только при их динамическом (колебательном) характере взаимодействий, обусловленных одновременным действием сил притяжения и отталкивания.
2. Кристаллические структуры исследованных соединений имеют геометрически правильные формы, в которых среднее расстояние между ядрами атомов определяется современными физическими методами с точностью 10^{-5} \AA .
3. Как показали исследования динамики ионов кристаллической решётки рассматриваемых соединений [7], средние смещения атомов из положения равновесия не превышают 8 % от их наи-

кратчайшего расстояния. Это позволяет определять радиусы ионов до тысячных долей ангстремма.

Исходя из вышеизложенных предпосылок, были получены простые геометрические соотношения для определения радиусов атомов в исследованных соединениях. Для структуры NaCl $r_a = a/\sqrt{8}$ и $r_k = a(\sqrt{2} - 1)/\sqrt{8}$; для структуры CsCl $r_a = a/2$, $r_k = a(\sqrt{3} - 1)/2$, а для структуры флюорита $r_a = a/4$, $r_k = a(\sqrt{3} - 1)/4$.

В табл. 1 приведены значения параметров кристаллических решёток, радиусов ионов и характеристические температуры Θ_d , которые определяют жёсткость связи между атомами. Из приведённых данных видно, что при одном из анионов (F, Cl, Br, I, O) в рассматриваемых кристаллах с увеличением заряда ядра катиона происходит периодическое увеличение параметра кристаллической решётки, радиусов ионов и уменьшение характеристической температуры.

Аналогичная ситуация происходит при одном из выбранных катионов (Li, Na, K, Rb, Ag, Mg, Ca, Sr, Ba, Cs, Zr, Ce, Th) в этих кристаллах с увеличением заряда ядра анионов.

На рис. 1–3 представлены графики зависимостей радиусов анионов и катионов в исследуемых соединениях от зарядового числа Z. Для сравнения в табл. 1 приведены усреднённые значения радиусов атомов и ионов из справочных данных. Отметим, что их усреднённые значения не зависят от параметров кристаллической решётки кристалла. Здесь наблюдается как хорошее совпадение величин радиусов ионов, рассчитанных нами, так и значительное различие с литературными усреднёнными данными. Это связано с отсутствием единого метода определения радиусов ионов.

Большинство авторов, которые исследовали радиусы ионов, придерживаются мнения о том, что наиболее достоверными являются значения, определяемые по рентгенографическим измерениям распределения электронной плотности (РЭП). Однако для многих веществ карты распределения электронной плотности отсутствуют, а их построение достаточно сложно [3].

В качестве примера на рис. 4, 5 показаны распределения электронной плотности в соединениях LiF и NaF по рентгенографическим данным, полученным в нашей лаборатории [8]. Проведённые исследования показали соответствие радиусов катионов и анионов, определённых из геометрических соотношений, и карт РЭП.

Таблица 1

Радиусы анионов и катионов

Структура типа NaCl						
Соединение	Θ_d [1, 5]	Параметр решётки a, Å [1, 5]	r_k , Å	r_a Å	Средние значения радиусов [1, 5]	
					r_k , Å	r_a Å
LiF	743	4,02620	0,604	1,410	0,68	1,34
NaF	496	4,62344	0,695	1,621	0,97	1,34
KF	283	5,347	0,799	1,866	1,33	1,34
RbF	232	5,640	0,845	1,971	1,48	1,34
LiCl	425	5,1398	0,771	1,799	0,68	1,81
NaCl	322	5,64009	0,846	1,974	0,97	1,81
KCl	235	6,29294	0,944	2,202	1,33	1,81
RbCl	168	6,590	0,989	2,307	1,48	1,81
LiBr	244	5,501	0,825	1,925	0,68	1,95
NaBr	225	5,970	0,896	2,090	0,97	1,95
KBr	180	6,59828	0,987	2,302	1,33	1,95
RbBr	136	6,890	1,034	2,412	1,48	1,95
LiI	201	6,012	0,902	2,104	0,68	2,20
NaI	180	6,4728	0,971	2,265	0,97	2,20
KI	129	7,06555	1,058	2,468	1,33	2,20
RbI	105	7,325	1,099	2,564	1,48	2,20
AgCl	165	5,5491	0,832	1,942	1,17	1,81
AgBr	140	5,7745	0,866	2,021	1,17	1,95
MgO	949	4,2113	0,619	1,489	0,69	1,38
CaO	648	4,812	0,705	1,701	1,01	1,38
SrO	306	5,083	0,744	1,797	1,15	1,38
BaO	272	5,542	0,812	1,959	1,33	1,38

Структура типа CsCl

CsCl	165	4,1200	1,508	2,060	1,67	1,81
CsBr	142	4,2953	1,572	2,148	1,67	1,95
CsI	128	4,5667	1,671	2,283	1,67	2,20
Структура типа флюорита						
CaF ₂	514	5,46295	0,999	1,366	1,01	1,34
SrF ₂	380	5,810	1,061	1,450	1,15	1,34
BaF ₂	288	6,196	1,134	1,549	1,36	1,34
ZrO ₂	780	5,110	0,935	1,278	0,81	1,38
CeO ₂	—	5,410	0,990	1,353	0,84	1,38
ThO ₂	660	5,5859	1,022	1,396	0,90	1,38

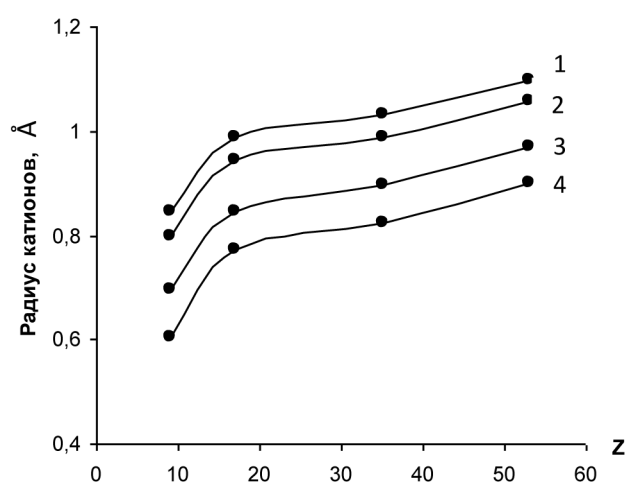


Рис. 1. Зависимость радиусов катионов от порядкового номера Z анионов F, Cl, Br, I в соединениях со структурой NaCl: 1 – Rb; 2 – K; 3 – Na; 4 – Li

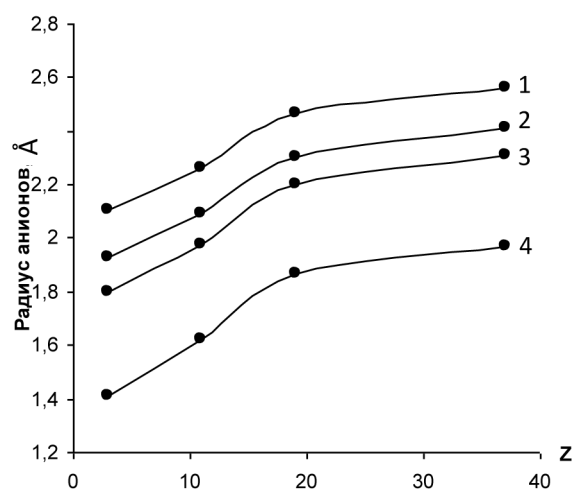


Рис. 2. Зависимость радиусов анионов от порядкового номера Z катионов Li, Na, K, Rb в соединениях со структурой NaCl: 1 – I; 2 – Br; 3 – Cl; 4 – F

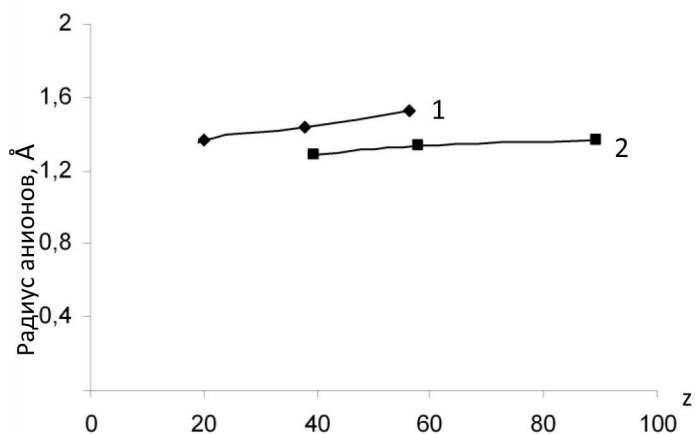


Рис. 3: 1 – зависимость радиусов анионов фтора от порядкового номера Z катионов Ca, Sr, Ba; 2 – зависимость радиусов анионов кислорода от порядкового номера Z катионов Zr, Ce, Th в структуре флюорита

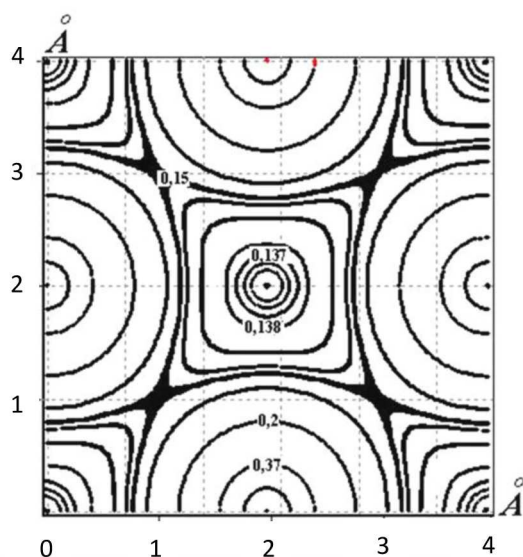


Рис. 4. Карта распределения электронной плотности LiF

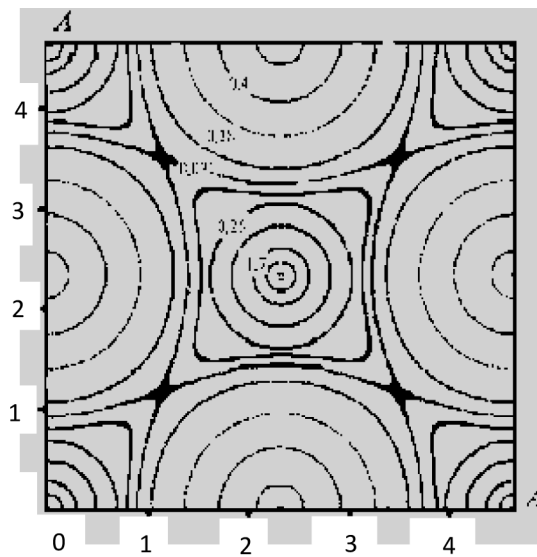


Рис. 5. Карта распределения электронной плотности NaF

Список литературы

1. Блистанов А. А. Акустические кристаллы: Справочник /А. А. Блистанов, В. С. Бондаренко, Н. В. Переломова [и др.] М.: Наука, 1982. 632 с.
2. Бокий Г. Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971. 400 с.
3. Дей К. Теоретическая неорганическая химия. М.: Химия, 1976. 568 с.
4. Игнатъев В. Д. Размеры атомов и ионов и ковалентность связи в молекулах и кристаллах // Журнал структурной химии. 2005. Т. 46. № 4. С. 764–771
5. Мищенко К. П., Равделя А. А. Краткий справочник физико-химических величин. Л.: Химия, 1974. 200 с.
6. Ормонт Б. Ф. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. М.: Высш. школа, 1982. 528 с.
7. Сидоров А. А. Распределение электронной плотности и динамика кристаллической решетки фторида лития по рентгенографическим данным / А. А. Сидоров, В. Е. Холодовский, Е. А. Кульченков [и др.] // Известия Самарского научного центра РАН. (принято к печати)
8. Сидоров А. А. Распределение электронной плотности и динамика кристаллической решетки фторида лития по рентгенографическим данным / А. А. Сидоров, В. Е. Холодовский, Е. А. Кульченков [и др.] // Ученые записки Забайкальского государственного гуманитарно-педагогического университета им. Н. Г. Чернышевского № 3 (38). 2011. Чита. 2011. С. 145–148.
9. Урусов В. С. Теоретическая кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ, 1987. 275 с.
10. Урусов В.С. Кристаллохимия. Часть 1. Изд-во МГУ. 2004.

References

1. Blistanov A. A. Akusticheskiye kristally: spravochnik /A. A. Blistanov, V. S. Bondarenko, N. V. Perelomova [и др.]. М.: Nauka, 1982. 632 s.
2. Boky G. B. Kristallokhimiya. М.: Nauka, 1971. 400 s.
3. Dey K. Teoreticheskaya neorganicheskaya khimiya. М.: Khimiya, 1976. 568 s.

4. Ignatyev V. D. Razmery atomov i ionov i kovalentnost svyazi v molekulakh i kristallakh // Zhurnal strukturnoy khimii. 2005. T. 46. № 4. S. 764–771.
5. Mishchenko K. P., Ravdelya A. A. Kratky spravochnik fiziko-khimicheskikh velichin. L.: Khimiya, 1974. 200 s.
6. Ormont B. F. Vvedeniye v fizicheskuyu khimiyu i kristallokhimiyu poluprovodnikov. M.: Vyssh. shkola, 1982. 528 s.
7. Sidorov A. A. Raspredeleniye elektronnoy plotnosti i dinamika kristallicheskoy reshetki ftorida litiya po rentgenograficheskim dannym / A. A. Sidorov, V. E. Kholodovsky, Ye. A. Kulchenkov [i dr.] // Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra RAN. (prinyato k pechati).
8. Sidorov A. A. Raspredeleniye elektronnoy plotnosti i dinamika kristallicheskoy reshetki ftorida litiya po rentgenograficheskim dannym / A. A. Sidorov, V. E. Kholodovsky, Ye. A. Kulchenkov [i dr.] // Uchenye zapiski Zabaykalskogo gosudarstvennogo gumanitarno-pedagogicheskogo universiteta im. N.G. Chernyshevskogo №3 (38). Chita. 2011. S. 145–148.
9. Urusov V. S. Teoreticheskaya kristallokhimiya. M.: Izd-vo MGU, 1987. 275 s.
10. Urusov V. S. Kristallokhimiya. Ch. 1. Izd-vo MGU. 2004.

Статья поступила в редакцию 15.05.2013

УДК 538.9В
ББК В31

Александр Алексеевич Сидоров
кандидат физико-математических наук, доцент,
Брянский государственный университет им. И. Г. Петровского
(Брянск, Россия), e-mail: a-a-sidorov@yandex.ru
Владимир Евгеньевич Холодовский
кандидат физико-математических наук, доцент,
Брянский государственный университет им. И. Г. Петровского
(Брянск, Россия), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru
Евгений Александрович Кульченков
старший преподаватель,
Брянский государственный технический университет
(Брянск, Россия), e-mail: ewgeniy2000@mail.ru

Аппроксимация атомно-рассеивающего фактора в кристаллической решётке на основе электромагнитной теории рассеяния¹

Описана новая методика нахождения аппроксимирующей функции атомно-рассеивающего фактора для атомов в кристаллической структуре, которая по физическому смыслу отвечает понятию сглаживающей f_{hkl} -кривой.

Ключевые слова: электронная плотность, атомно-рассеивающий фактор, кристаллическая решётка.

Aleksandr Alekseevich Sidorov
Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor
Petrovskiy Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru
Vladimir Evgen'evich Kholodovskiy
Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor
Petrovskiy Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: a-a-sidorov@yandex.ru
Evgeniy Aleksandrovich Kul'chenkov
Senior Lecturer,
Bryansk State Technical University
(Bryansk, Russia), e-mail: ewgeniy2000@mail.ru

Approximation of Atomic Scattering Factor in a Crystal Lattice Based on Electromagnetic Scattering Theory

We describe a new method of finding an approximate function of the atomic scattering factor for the atoms in the crystal structure, which meets a requirement for the physical meaning of the concept of smoothing f_{hkl} -curve.

Keywords: electron density, atomic scattering factor, crystal lattice.

При расчёте распределения электронной плотности в кристалле одной из главных задач является нахождение атомно-рассеивающего фактора (АРФ) $f_{hkl} = f(H_{hkl})$, входящего в структурную амплитуду F_{hkl} .

В справочной литературе приведены атомно-рассеивающие факторы уединённых атомов практически для всех элементов таблицы Д. И. Менделеева, полученные путём квантово-механических расчётов методом Хартри-Фока [1]. Данные (АРФ) представлены в виде таблиц и их функции не имеют явного аналитического выражения.

Значения атомно-рассеивающих факторов f_{hkl} атомов кристаллической решётки определяются из экспериментальных данных по рентгенографическим исследованиям интегральных интенсивностей дифракционных максимумов в определённых точках обратного пространства с разрешёнными

¹Работа выполнена в рамках Государственного задания вузу Минобрнауки РФ по теме «Тепловые свойства новых термоэлектрических, полупроводниковых и оптических материалов».

значениями hkl . Согласно квантово-механической теории рассеяния рентгеновских лучей [2] распределение электронной плотности должно быть непрерывно во всех точках обратного пространства. Это значит, что экспериментально полученные значения АРФ должны допускать аппроксимацию некоторой плавной функцией, свободной от сингулярных точек, удовлетворяющей теории рассеяния рентгеновских лучей и значениям f_{hkl} .

В работах [3, 4] при определении распределения электронной плотности было отмечено, что используемый ряд Фурье является слабо сходящимся, и его обрыв раньше времени может привести к значительным ошибкам. Авторы предложили перейти к другому ряду с использованием уравнения Пуассона, который, по их мнению, является более быстро сходящимся. Однако это потребовало дополнительных достаточно сложных преобразований и математических расчётов. Кроме того, при сглаживании f_{hkl} -кривой использовались аппроксимирующие функции, не имеющие физического смысла, и, как показали наши исследования, оказавшиеся мало эффективными.

Целью настоящей работы является описание нового метода нахождения функции атомно-рассеивающего фактора для многоэлектронного атома в кристаллической структуре, которая по своей зависимости от $(\sin \theta)/\lambda$ и физическому смыслу отвечает понятию сглаживающей f_{hkl} -кривой.

Как известно, распределение электронной плотности в кристалле дается формулой:

$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{\infty} F_{hkl} \exp(-2\pi i \mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{R}), \quad (1)$$

где F_{hkl} – измеряемые на опыте величины структурных амплитуд, $\mathbf{H}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ – вектор обратной решётки, V – объём, а $\mathbf{R} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}$ – радиус-вектор точки элементарной ячейки кристалла. В случае многоатомной решётки структурные амплитуды F_{hkl} выражаются формулой

$$F_{hkl} = \sum_{\mathbf{r}_j} f_j(H_{hkl}) \exp(-2\pi i \mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_j),$$

где f_j – атомная амплитуда атома, находящегося в узле, радиус-вектор которого есть \mathbf{r}_j .

Как известно, атомно-рассеивающий фактор для сферически симметрично распределённой электронной плотности $U(r)$ в атоме выражается формулой

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \frac{\lambda}{\sin \theta} \int_0^{\infty} rU(r) \sin\left[4\pi r \frac{\sin \theta}{\lambda}\right] dr. \quad (2)$$

Формула (2) хорошо передаёт особенности электронного распределения свободного атома. В случае атома кристалла распределение электронной плотности его внешней оболочки претерпевает некоторые изменения и ограничивается размерами элементарной ячейки, а распределение электронной плотности его внутренних оболочек остается без изменений.

Пусть r_0 – радиус сферы с центром в положении равновесия атома решётки, в пределах которой его электронная плотность отличается от нуля (а за пределами которой равна нулю). Тогда, пренебрегая некоторым отклонением от сферической симметрии распределения его внешних электронов, можно считать, что атомно-рассеивающий фактор атома решётки выражается формулой

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \frac{\lambda}{\sin \theta} \int_0^{r_0} rU(r) \sin\left[4\pi r \frac{\sin \theta}{\lambda}\right] dr. \quad (3)$$

Введем в интеграл (3) сокращенное обозначение $\tau = 4\pi(\sin \theta)/\lambda$ и сделаем замену переменной, полагая $r\tau = t$. Тогда, как нетрудно видеть, справедливо равенство

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = f\left(\frac{\tau}{4\pi}\right) = \frac{4\pi}{\tau^3} \int_0^{r_0\tau} tU\left(\frac{t}{\tau}\right) \sin t dt. \quad (4)$$

Предположим, что электронная плотность атома $U(r)$ в промежутке $r \in [0, r_0]$ с достаточной точностью может быть аппроксимирована полиномом степени n :

$$4\pi U(r) \cong P_n(r) = \sum_{k=0}^n b_k r^k, \quad r \in [0, r_0], \quad (5)$$

где

$$4\pi U(r_0) = P_n(r_0) = 0. \quad (6)$$

Тогда

$$4\pi t U\left(\frac{t}{\tau}\right) = t P_n\left(\frac{t}{\tau}\right) = \sum_{k=0}^n C_k t^{k+1} = Q_{n+1}(t) \quad (7)$$

и формула (4) может быть переписана в виде

$$f\left(\frac{\tau}{4\pi}\right) = \frac{1}{\tau^3} \int_0^{r_0\tau} Q_{n+1}(t) \sin t dt, \quad (8)$$

где ввиду (6) и (7) справедливы равенства:

$$Q_{n+1}(0) = 0, \quad Q_{n+1}(r_0\tau) = r_0\tau P_n(r_0) = 0. \quad (9)$$

Непосредственной проверкой нетрудно убедиться в справедливости равенства

$$\begin{aligned} \int_0^{r_0\tau} Q_{n+1}(t) \sin t dt &= \sin r_0\tau \sum_{1 \leq 2k-1 \leq n+1} (-1)^{k-1} Q_{n+1}^{(2k-1)}(r_0\tau) - \\ &- \cos r_0\tau \sum_{0 \leq 2k \leq n+1} (-1)^k Q_{n+1}^{(2k)}(r_0\tau) + \sum_{0 \leq 2k \leq n+1} (-1)^k Q_{n+1}^{(2k)}(0). \end{aligned}$$

Откуда, учитывая равенства (8), (9), окончательно получаем

$$\begin{aligned} f\left(\frac{\tau}{4\pi}\right) &= \frac{1}{\tau^3} \left[\sin r_0\tau \sum_{1 \leq 2k-1 \leq n+1} (-1)^{k-1} Q_{n+1}^{(2k-1)}(r_0\tau) - \right. \\ &\left. - \cos r_0\tau \sum_{2 \leq 2k \leq n+1} (-1)^k Q_{n+1}^{(2k)}(r_0\tau) + \sum_{2 \leq 2k \leq n+1} (-1)^k Q_{n+1}^{(2k)}(0) \right]. \quad (10) \end{aligned}$$

Пусть $n = 4$. Тогда

$$4\pi U(r) = b_0 + b_1 r + b_2 r^2 + b_3 r^3 + b_4 r^4,$$

где в силу условия (6)

$$b_0 = -b_1 r_0 - b_2 r_0^2 - b_3 r_0^3 - b_4 r_0^4. \quad (11)$$

Согласно формуле (10) имеем

$$f\left(\frac{\tau}{4\pi}\right) = \left(\frac{b_1 r_0 + 2b_2 r_0^2 + 3b_3 r_0^3 + 4b_4 r_0^4}{\tau^3} - 6\frac{b_2}{\tau^5} - 24\frac{b_3}{\tau^6} r_0 - 60\frac{b_4}{\tau^5} r_0^2 + 120\frac{b_4}{\tau^4}\right) \sin r_0 \tau +$$

$$+ \left(\frac{2b_1 + 6b_2 r_0 + 12b_3 r_0^2 + 20b_4 r_0^3}{\tau^4} - 24\frac{b_4}{\tau^6} - 120\frac{b_4}{\tau^6} r_0\right) \cos r_0 \tau - 2\frac{b_1}{\tau^4} + 24\frac{b_3}{\tau^6}. \quad (12)$$

Полагая

$$c_1 = b_1 r_0^4, \quad c_2 = b_2 r_0^5, \quad c_3 = b_3 r_0^6, \quad c_4 = b_4 r_0^7, \quad r_0 \tau = t,$$

выражение (12) представим в виде

$$f\left(\frac{\tau}{4\pi}\right) = \frac{1}{t^7} \{ (c_1 + 2c_2 + 3c_3 + 4c_4)t^4 - 6(c_2 + 4c_3 + 10c_4)t^2 + 120c_4 \} \sin t +$$

$$+ \{ 2(c_1 + 3c_2 + 6c_3 + 10c_4)t^3 - 24(c_3 + 5c_4)t \} \cos t + 24c_1 t^3. \quad (13)$$

По условию нормировки должно выполняться равенство

$$\lim_{t \rightarrow 0} f\left(\frac{\tau}{4\pi}\right) = \lim_{t \rightarrow 0} f\left(\frac{t}{4\pi r_0}\right) = z, \quad (14)$$

где z – заряд ядра атома. Для вычисления предела (14) можно считать, что

$$\sin t = t - \frac{t^3}{3!} + \frac{t^5}{5!} - \frac{t^7}{7!}, \quad \cos t = 1 - \frac{t^2}{2!} + \frac{t^4}{4!} - \frac{t^6}{6!}. \quad (15)$$

Подставляя (13), (15) в равенство (14) и вычисля коэффициенты при степенях t, t^3, t^5 , приходим к выводу, что все они равны нулю. Отсюда находим

$$z = -\frac{1}{12}c_1 - \frac{2}{15}c_2 - \frac{1}{6}c_3 - \frac{4}{21}c_4$$

или

$$c_1 = -\frac{8}{5}c_2 - 2c_3 - \frac{16}{7}c_4 - 12z.$$

Заменяя c_1 в формуле (13), окончательно получаем

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = f\left(\frac{t}{4\pi r_0}\right) = g(t) - h(t)z, \quad (16)$$

где

$$g(t) = \frac{1}{t^7} \{ (a_1 + a_2 + a_3)t^4 - (15a_1 + 24a_2 + 35a_3)t^3 + 70a_3 \} \sin t +$$

$$+ \{ (7a_1 + 8a_2 + 9a_3)t^3 - (24a_2 + 70a_3)t \} \cos t + (8a_1 + 4a_2 + \frac{8}{3}a_3)t^3 + 24a_2 t, \quad (17)$$

$$h(t) = \frac{12}{t^4} [t \sin t + 2(\cos t - 1)], \quad (18)$$

$$a_1 = \frac{2}{5}c_2, \quad a_2 = c_3, \quad a_3 = \frac{12}{7}c_4.$$

Отметим, что функция, выражающая атомно-рассеивающий фактор по формуле (16), убывает обратно пропорционально кубу своего аргумента, что обеспечивает достаточно быструю сходимость ряда (1).

Предположим теперь, что нам известна таблица экспериментальных данных по атомно-рассеивающему фактору, представленная в виде

τ	τ_1	τ_2	...	τ_n
f	f_1	f_2	...	f_n

где, как и выше, $\tau = 4\pi \frac{\sin \theta}{\lambda}$.

Зафиксируем некоторое значение r_0 , сравнимое с параметром решётки, и положим

$$t_k = r_0 \tau_k, \quad k = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Рассмотрим функцию

$$\Phi(a_1, a_2, a_3) = \sum_{k=1}^n [f(t_k) - f_k]^2 = \sum_{k=1}^n \{g(t_k) - [f_k + h(t_k)z]\}^2, \quad (19)$$

где $g(t)$ и $h(t)$ выражаются по формулам (16), (17). Применяя к функции (19) метод наименьших квадратов, можно найти значения параметров a_1, a_2, a_3 , при которых она достигает своего минимума.

В настоящей работе были проделаны все необходимые вычисления и найдены значения коэффициентов a_1, a_2, a_3 , определяющих по формуле (16) кривую, сглаживающую атомно-рассеивающий фактор. Для вычислений использовались данные по атомно-рассеивающему фактору для кристалла кремния (табл. 1), полученные нами экспериментально на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3 [5]. На рис.1 приведено изображение f -кривой, сглаживающее экспериментальные данные. Расхождение сглаживающей кривой и экспериментальных точек не превышает погрешности измерений. При этом наилучшее приближение экспериментальных данных было обеспечено при значении параметра $r_0 = 0,23a$, что близко к значению реального радиуса атома в кристаллической решётке.

Таблица

f	$\frac{\sin \theta}{\lambda}$	τ
10,26316	0,16	2,0096
8,658263	0,26	3,2656
8,074767	0,3	3,768
7,126295	0,37	4,6472
6,746098	0,4	5,024
6,144619	0,45	5,652
5,801777	0,48	6,0288
5,364099	0,52	6,5312
5,153075	0,54	6,7824
4,745511	0,58	7,2848
4,54851	0,6	7,536
4,166923	0,64	8,0384
3,981877	0,66	8,2896
3,710846	0,69	8,6664
3,534181	0,71	8,9176

На рис. 1 приведены экспериментальные значения (точки) и сглаженная кривая, полученная описанным выше методом.

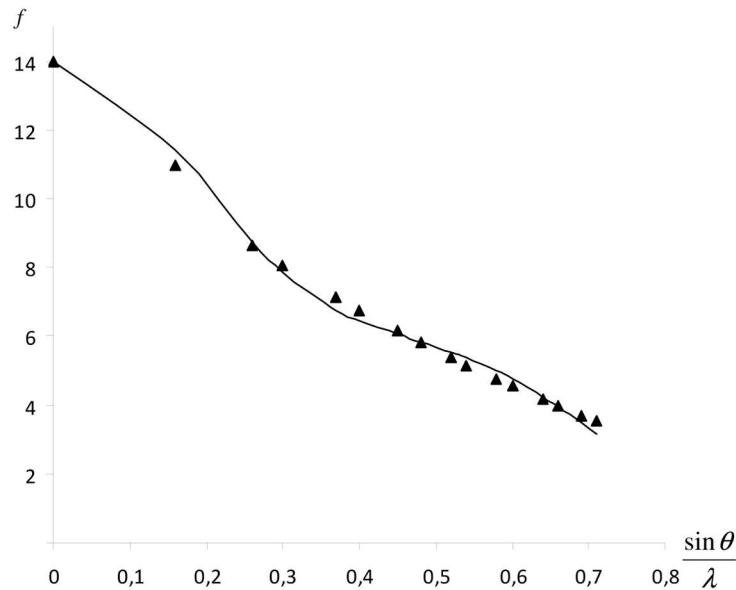


Рис. 1. Точки – экспериментальные значения [5], линия – сглаженная кривая

Список литературы

1. Миркин Л. И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов / под ред. Я. С. Усманского. М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1961. 863 с.
2. Блохин М. А. Физика рентгеновских лучей. М.: Наука, 1957. 510 с.
3. Олехнович Н. М., Сирота Н. Н., Маковецкий Г. И. О распределении электронной плотности в решётке селенида марганца. Минск: Наука и техника. 1996. С. 59–63.
4. Горохов И. Г., Цветков В. П. Исследование распределения потенциала и электронной плотности в решётке кремния по рентгенографическим данным. Минск: Наука и техника. 1996. С. 85–92.
5. Сидоров А. А., Кульченков Е. А. Расчёт распределения электронной плотности по данным упругого рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах со структурой алмаза // Вестник БГТУ. Брянск, 2007. № 2. С. 118–123.

References

1. Mirkin L. I. Spravochnik po rentgenostrukturnomu analizu polikristallov / pod. red. Ya. S. Usmanskogo. M.: Gos. izd-vo fiz.-mat. lit., 1961. 863 s.
2. Blokhin M. A. Fizika rentgenovskikh luchey. M.: Nauka, 1957. 510 s.
3. Olenkhovich N. M., Sirota N. N., Makovetsky G. I. O raspredelenii elektronnoy plotnosti v reshyotke selenida margantsa. Minsk: Nauka i tekhnika, 1996. S. 59–63.
4. Gorokhov I. G., Tsvetkov V. P. Issledovaniye raspredeleniya potentsiala i elektronnoy plotnosti v reshyotke kremniya rentgenograficheskim dannym. Minsk: Nauka i tekhnika. 1996. S. 85–92.
5. Sidorov A. A., Kulchenkov Ye. A. Raschyot raspredeleniya elektronnoy plotnosti po dannym uprugogo rasseyaniya rentgenovskikh luchey v kristallakh so strukturoy almaza // Vestnik BGTU. Bryansk, 2007. № 2. S. 118–123.

Статья поступила в редакцию 10.04.2013

УДК 519.833.2
ББК В 11

Юлия Сергеевна Токарева
кандидат физико-математических наук,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: jtokareva2@mail.ru

Владимир Викторович Мазалов
доктор физико-математических наук,
Институт прикладных математических исследований
Карельского научного центра РАН
(Петрозаводск, Россия), e-mail: vmazalov@krc.karelia.ru

Об одной задаче наилучшего выбора с правилом консенсуса¹

В работе рассматривается многошаговая игра трёх лиц. Пирог единичного размера делится между тремя игроками. Для разрешения проблемы приглашается арбитр, который представлен генератором случайных чисел с распределением Дирихле. Найдено аналитическое выражение выигрыша каждого из трех игроков в виде рекуррентных формул. Оптимальное поведение участников переговоров получено в классе пороговых стратегий.

Ключевые слова: переговоры, задача наилучшего выбора, арбитр, дисконтирование, распределение Дирихле, пороговые стратегии.

Yuliya Sergeevna Tokareva
Candidate of Physics and Mathematics,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), jtokareva2@mail.ru

Vladimir Viktorovich Mazalov
Doctor of Physics and Mathematics,
Institute of Applied Mathematical Research
Karelian Research Center, Russian Academy of Sciences
(Petrozavodsk, Russia), vmazalov@krc.karelia.ru

On a Problem of the Best Choice with Consensus Rule

This paper considers the multi-stage game of three persons. A cake of unit size is divided between the three players. To resolve the problem, an arbitrator who is represented by a random number from the Dirichlet distribution is invited. The analytical expression of each of the three winning players as recurrence formulas is found. The optimal behavior of the negotiators is obtained in the class of threshold strategies.

Keywords: negotiation problem, the best choice, arbitrator, discounting, Dirichlet distribution, threshold strategies.

Введение. Задача наилучшего выбора является классической задачей теории переговоров. Одной из наиболее известных среди них является задача о разделе пирога. Под словом «пирог» подразумевается любой ресурс, который должен быть разделен на части с учетом интересов сторон, участвующих в переговорах. Это может быть вопрос о разделении территорий, материальных ценностей, сферы влияния и т.д. Проблема состоит в том, чтобы все участники переговоров получили свой кусок пирога, считая его достаточным. Для раздела пирога существуют различные процедуры [1; 2; 11].

В данной работе рассматривается многошаговая игра трёх лиц. Для разрешения проблемы приглашается независимая сторона – арбитр, который представлен генератором случайных чисел.

Пусть для переговоров мы имеем K шагов и пирог единичного размера. На каждом шаге арбитр генерирует случайные предложения и представляет их игрокам – участникам переговоров. Пусть генератор случайных чисел представлен распределением Дирихле с плотностью

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{\Gamma(k_1 + k_2 + k_3)}{\Gamma(k_1)\Gamma(k_2)\Gamma(k_3)} x_1^{k_1-1} x_2^{k_2-1} x_3^{k_3-1},$$

¹Работа выполнена в рамках Государственного задания вузу Минобрнауки РФ, № 8.3641.2011.

где $\Gamma(k)$ – гамма-функция, при этом $x_1 + x_2 + x_3 = 1$, $x_1 \geq 0$, $x_2 \geq 0$, $x_3 \geq 0$.

Игроки рассматривают предложенный арбитром кусок пирога и либо отклоняют его, либо принимают. Если все игроки соглашаются с предложением арбитра, то игра заканчивается. Это так называемый полный консенсус. Если хотя бы один из игроков не соглашается, то игра переходит на следующий шаг. Считаем, что после каждого шага пирог «усыхает», т. е. дисконтирует на величину δ , где $\delta < 1$. Если время для переговоров закончилось (шаг $k = 0$), а участники так и не пришли к решению проблемы, то они получают куски пирога малого размера.

Если участники переговоров имеют равные веса, то параметры распределения Дирихле могут быть выбраны равными. Тогда процедура распределения гарантирует равные возможности для всех участников. Если у какого-либо из участников есть больший вес, то необходимо увеличить свой параметр в распределении.

Все существующие модели раздела пирога можно разделить на две группы. В первой группе участникам предлагают различные варианты дележа [4; 8; 9]. Ко второй группе относятся задачи с привлечением арбитра, который формирует предложения (куски пирога) и предлагает их участникам [3; 5; 7; 10].

В работе [14] был рассмотрен симметричный случай раздела пирога для трех игроков. Для решения проблемы использовалось или правило большинства, или правило консенсуса. Развитие данной модели представлено в работе [13], где была исследована подобная схема с параметрами распределения Дирихле $k_1 = k_2 = k_3 = 2$. Проблема наилучшего выбора, рассмотренная в работе [10], является близкой к данной проблеме.

В статье [6] показано, что задача о дележе пирога с двумя игроками всегда имеет единственное равновесие по Нэшу, а в работе [12] доказано, что пирог может быть справедливо разделен среди n игроков.

Задача наилучшего выбора с правилом консенсуса. Рассматривается следующая теоретико-игровая модель переговоров. Пирог единичного размера делится на трёх игроков с помощью многошаговой процедуры. Для дележа приглашается арбитр, который на каждом шаге предлагает игрокам *I*, *II* и *III* куски пирога размера x_1 , x_2 , x_3 , соответственно.

Пусть предложения арбитра распределены по закону Дирихле:

$$f(x, y, z) = \frac{\Gamma(k_1 + k_2 + k_3)}{\Gamma(k_1) \cdot \Gamma(k_2) \cdot \Gamma(k_3)} \cdot x_1^{k_1-1} \cdot x_2^{k_2-1} \cdot x_3^{k_3-1},$$

где $x_1 + x_2 + x_3 = 1$.

Положим, что $k_1 = 3$, $k_2 = k_3 = 1$, тогда

$$f(x_1, x_2) = 12x_1^2, \quad x_1 + x_2 \leq 1, x_1, x_2 \geq 0.$$

Обозначим через $\mu_1(x_1)$ вероятность того, что игрок *I* примет текущее предложение арбитра x_1 ; $\mu_2(x_2)$ – вероятность того, что игрок *II* примет предложенное x_2 и $\mu_3(x_3) = \mu_3(1 - x_1 - x_2)$ – вероятность того, что игрок *III* примет x_3 . В силу симметрии игры для второго и третьего игрока полагаем $\mu_2(x_2) = \mu_3(1 - x_1 - x_2)$.

Если хотя бы один из игроков отказывается, то игра переходит на следующий шаг, на котором снова арбитром генерируются случайные предложения x_1 , x_2 , x_3 . Считаем, что на каждом шаге игры пирог уменьшается и становится размером $\delta < 1$. Игра заканчивается, когда все три игрока одновременно примут предложения арбитра или закончится время для переговоров.

Обозначим через $H_k^{(i)}$ выигрыш i -го игрока в момент времени, когда до окончания игры осталось k шагов.

Теорема. *Оптимальные стратегии игроков на k -м шаге имеют вид*

$$\mu_1(x_1) = I_{\{x_1 \geq \delta H_{k-1}^{(1)}\}}, \quad \mu_i(x_i) = I_{\{x_i \geq \delta H_{k-1}^{(i)}\}} \quad i = 2, 3,$$

где I_A – индикатор события A .

Значение игры удовлетворяет рекуррентным соотношениям

$$H_k^{(1)} = \left(1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)}\right)^4 \left[\frac{3}{5} \left(1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)}\right) - \delta H_{k-1}^{(1)}\right] + \left(\delta H_{k-1}^{(1)}\right)^4 \left[1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)} - \frac{3}{5}\delta H_{k-1}^{(1)}\right] + \delta H_{k-1}^{(1)},$$

$$H_k^{(2)} = \frac{1}{5} \left(1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)}\right)^5 - 2 \left(\delta H_{k-1}^{(1)}\right)^3 \left(1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)} - \delta H_{k-1}^{(1)}\right)^2 + \\ + \frac{-1}{5} \left(\delta H_{k-1}^{(1)}\right)^4 \left[5 - 10\delta H_{k-1}^{(2)} - 4\delta H_{k-1}^{(1)}\right] + \delta H_{k-1}^{(2)}.$$

Доказательство. Пусть до конца игры осталось k шагов. С вероятностью $\mu_1(x_1) \cdot \mu_2(x_2) \cdot \mu_3(x_3)$ все игроки примут предложения x_1, x_2, x_3 . С вероятностью

$$1 - \mu_1(x_1) \cdot \mu_2(x_2) \cdot \mu_3(x_3)$$

хотя бы один из игроков отвергнет текущее предложение и игра перейдет на следующий шаг с дисконтированным размером пирога. Тогда уравнение оптимальности для выигрыша игрока I на k -м шаге имеет вид

$$H_k^{(1)} = \sup_{\mu_1} \int_0^1 dx_1 \int_0^{1-x_1} \left\{ \mu_1 \mu_2 \mu_3 x_1 + (1 - \mu_1 \mu_2 \mu_3) \delta H_{k-1}^{(1)} \right\} 12x_1^2 dx_2 = \\ = \sup_{\mu_1} 12 \left\{ \int_0^1 \mu_1 x_1^2 (x_1 - \delta H_{k-1}^{(1)}) dx_1 \int_0^{1-x_1} \mu_2 \mu_3 dx_2 \right\} + \delta H_{k-1}^{(1)}.$$

Цель I -го игрока – максимизация своего выигрыша. Рассмотрим выражение при $\mu_1(x_1)$

$$x_1^2 (x_1 - \delta H_{k-1}^{(1)}) \int_0^{1-x_1} \mu_2(x_2) \mu_3(1 - x_1 - x_2) dx_2.$$

Будем искать равновесие в данной игре среди пороговых стратегий. Пусть

$$\mu_1(x_1) = I \{x_1 \geq b\}, \quad \mu_2(x_2) = I \{x_2 \geq a\}, \quad \mu_3(x_3) = I \{x_3 \geq a\}.$$

Тогда получаем

$$x_1^2 (x_1 - \delta H_{k-1}^{(1)}) \int_0^{1-x_1} \mu_2(x_2) \mu_3(1 - x_1 - x_2) dx_2 = \\ = x_1^2 (x_1 - \delta H_{k-1}^{(1)}) \int_a^{1-x_1-a} dx_2 I \{b \leq x_1 \leq 1 - 2a\} + 0 \cdot I \{x_1 > 1 - a\} = \\ = x_1^2 (x_1 - \delta H_{k-1}^{(1)}) (1 - x_1 - 2a) I \{b \leq x_1 \leq 1 - 2a\},$$

и оптимальная стратегия игрока I имеет вид

$$\mu_1^*(x_1) = \begin{cases} 1 & \text{если } x_1 \leq 1 - 2a, \\ \forall & \text{если } x_1 > 1 - 2a. \end{cases}$$

Уравнение оптимальности для выигрыша игрока I на k -м шаге примет вид

$$H_k^{(1)} = \left(1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)}\right)^4 \left[\frac{3}{5} \left(1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)}\right) - \delta H_{k-1}^{(1)} \right] + \\ + \left(\delta H_{k-1}^{(1)}\right)^4 \left[1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)} - \frac{3}{5} \delta H_{k-1}^{(1)} \right] + \delta H_{k-1}^{(1)},$$

где

$$a = \delta H_{k-1}^{(2)}, \quad b = \delta H_{k-1}^{(1)}.$$

Уравнение оптимальности для выигрыша игрока II на k -м шаге имеет вид

$$H_k^{(2)} = \sup_{\mu_2} \int_0^1 dx_2 \int_0^{1-x_2} \left\{ \mu_1 \mu_2 \mu_3 x_2 + (1 - \mu_1 \mu_2 \mu_3) \delta H_{k-1}^{(2)} \right\} 12x_1^2 dx_1.$$

Рассмотрим выражение при $\mu_2(y)$:

$$(x_2 - \delta H_{k-1}^{(2)}) \int_0^{1-x_2} x_1^2 \mu_1(x_1) \mu_3(1 - x_1 - x_2) dx_1.$$

Для пороговых стратегий получаем

$$\begin{aligned} & (x_2 - \delta H_{k-1}^{(2)}) \int_0^{1-x_2} x_1^2 \mu_1 \mu_3 dx_1 = \\ & = \frac{1}{3} (x_2 - \delta H_{k-1}^{(2)}) ((1-x_2-a)^3 - b^3) I \{a \leq x_2 \leq 1-a-b\} + \\ & \quad + 0 \cdot I \{x_2 > 1-a-b\}. \end{aligned}$$

Тогда уравнение оптимальности для выигрыша игрока II на k -м шаге примет вид

$$\begin{aligned} H_k^{(2)} = & \frac{1}{5} \left(1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)}\right)^5 - 2 \left(\delta H_{k-1}^{(1)}\right)^3 \left(1 - 2\delta H_{k-1}^{(2)} - \delta H_{k-1}^{(1)}\right)^2 + \\ & + \frac{-1}{5} \left(\delta H_{k-1}^{(1)}\right)^4 \left[5 - 10\delta H_{k-1}^{(2)} - 4\delta H_{k-1}^{(1)}\right] + \delta H_{k-1}^{(2)}. \end{aligned}$$

Теорема доказана.

Заключение. В статье рассматривается процедура раздела пирога. Эта модель может быть адаптирована к различным реальным ситуациям. В одних случаях можно выбирать одинаковые параметры распределения Дирихле. Если же участники имеют разный вес, то можно увеличивать или уменьшать соответствующий параметр распределения. Найдено аналитическое выражение выигрыша каждого из трёх игроков в виде рекуррентных формул. Решение задачи будет зависеть от параметров модели: интервал времени, который был выделен для переговоров k , коэффициент дисконтирования пирога δ , параметры распределения Дирихле. Оптимальное поведение участников переговоров получено в классе пороговых стратегий.

Список литературы

1. Brams S. J., Taylor A. D. Fair Division: from Cake-Cutting to Dispute Resolution. Cambridge University Press, 1996. 272 p.
2. Brams S. J., Taylor A. D. An envy-free cake division protocol // American Mathematical Monthly. 1995. Vol. 102, № 1. P. 9–18.
3. Crawford V. P. On Compulsory arbitration schemes // Journal of Political Economy. 1973. Vol. 11. P. 13–15.
4. Dubins L. E., Spanier E. H. How to cut a cake fairly // American Mathematical Monthly. 1961. Vol. 68. P. 1–17.
5. Garnaev A. Y. Value of information in optimal stopping games // Game Theory and Applications. 2000. Vol. 5. P. 55–64.
6. Hamers H. A Silent Duel over a Cake // Mathematical Methods of Operations Research. 1993. Vol. 43. P. 119–127.
7. Mazalov V.V., Banin M.V. N-person best-choice game with voting // Game Theory and Applications. 2003. N 9. P. 45–153.
8. Mazalov V.V., Sakaguchi M., Zabelin A.A. Multistage arbitration game with random offers // Game Theory and Applications. 2002. № 8. P. 95–106.
9. Rubinstein A. Perfect Equilibrium in a Bargaining Model // Econometrica. 1982. Vol. 50(1). 97–109.
10. Sakaguchi M. Best-choice game where arbitration comes in // Game Theory and Applications. 2003. N 9. P. 141–149.
11. Steinhaus H. The problem of fair division // Econometrica. 1948. № 16. P. 101–104.
12. Stromquist W. How to cut a cake fairly // American Mathematical Monthly. 1980. Vol. 87, № 8. P. 640–644.
13. Мазалов В. В., Менчер А. Э., Токарева Ю. С. Переговоры. Математическая теория. СПб.: Лань, 2012. 304 с.
14. Мазалов В. В., Носальская Т. Э. Стохастический дизайн в задаче о дележе пирога // Математическая теория игр и ее приложения. 2012. Вып. 4, Т. 3. С. 33–50.

References

1. Brams S. J., Taylor A. D. Fair Division: from Cake-Cutting to Dispute Resolution. Cambridge University Press, 1996. 272 p.
2. Brams S. J., Taylor A. D. An envy-free cake division protocol // American Mathematical Monthly. 1995. Vol. 102, № 1. P. 9–18.
3. Crawford V. P. On Compulsory arbitration schemes // Journal of Political Economy. 1973. Vol. 11. P. 13–15.
4. Dubins L. E., Spanier E. H. How to cut a cake fairly // American Mathematical Monthly. 1961. Vol. 68. P. 1–17.
5. Garnaev A. Y. Value of information in optimal stopping games // Game Theory and Applications. 2000. Vol. 5. P. 55–64.
6. Hamers H. A Silent Duel over a Cake // Mathematical Methods of Operations Research. 1993. Vol. 43. P. 119–127.
7. Mazalov V.V., Banin M.V. N-person best-choice game with voting // Game Theory and Applications. 2003. N 9. P. 45–153.
8. Mazalov V.V., Sakaguchi M., Zabelin A.A. Multistage arbitration game with random offers // Game Theory and Applications. 2002. N 8. P. 95–106.
9. Rubinstein A. Perfect Equilibrium in a Bargaining Model // Econometrica. 1982. Vol. 50(1). 97–109.
10. Sakaguchi M. Best-choice game where arbitration comes in // Game Theory and Applications. 2003. N 9. P. 141–149.
11. Steinhaus H. The problem of fair division // Econometrica. 1948. № 16. P. 101–104.
12. Stromquist W. How to cut a cake fairly // American Mathematical Monthly. 1980. Vol. 87, № 8. P. 640–644.
13. Mazalov V. V., Mencher A. E., Tokareva Yu. S. Peregovory. Matematicheskaya teoriya. Spb.: Lan, 2012. 304 s.
14. Mazalov V. V., Nosalskaya T. E. Stokhastichesky lizayn v zadache o delezhe piroga // Matematicheskaya teoriya igshr i eye prilozheniya. 2012. Вып. 4. Т. 3. S. 33–50.

Статья поступила в редакцию 25.05.2013

УДК 532.5
ББК В253.31

Владимир Александрович Толпаев

доктор физико-математических наук, профессор,
зав. лабораторией подземной гидродинамики,

Северо-Кавказский научно-исследовательский проектный институт природных газов
(Ставрополь, Россия), e-mail: v.a.tolpaev@mail.ru

Курбан Сапизжуллаевич Ахмедов

кандидат технических наук, директор научного центра информационных технологий,
Северо-Кавказский научно-исследовательский проектный институт природных газов

(Ставрополь, Россия), e-mail: svnipigz@gazprom.ru

Светлана Анатольевна Гоголева

научный сотрудник лаборатории подземной гидродинамики,

Северо-Кавказский научно-исследовательский проектный институт природных газов
(Ставрополь, Россия), e-mail: svnipigz@gazprom.ru

Исследование эксплуатационных режимов подземных хранилищ газа методом схемотехнического моделирования

В статье предлагается методика схемотехнического моделирования подземных хранилищ газа (ПХГ) как единого целого: взаимодействующих участков пласта, групп скважин и применяемой на ПХГ газосборной сети.

Ключевые слова: подземное хранилище газа, дебит, скважина, фильтрация, электрическая цепь, сопротивление.

Vladimir Aleksandrovich Tolpaev

Doctor of Physics and Mathematics, Professor,

North-Caucasian Scientific Research Project Institute of Natural Gases
(Stavropol, Russia), e-mail: v.a.tolpaev@mail.ru

Kurban Sapizhullaevich Akhmedov

Candidate of Engineering Science, Director of Scientific Center of Information Technologies,
North-Caucasian Scientific Research Project Institute of Natural Gases

(Stavropol, Russia), e-mail: svnipigz@gazprom.ru

Svetlana Anatol'evna Gogoleva

Researcher, Laboratory of Subsurface Hydrodynamics,

North-Caucasian Scientific Research Project Institute of Natural Gases
(Stavropol, Russia), e-mail: svnipigz@gazprom.ru

Research of Operating Conditions of Underground Gas Storage by a Circuit Simulation Method

The paper provides a methodology of a circuit simulation of underground gas storages (UGS) as a whole: interacting parts of the gas bed, groups of wells and a gas-collecting network used in UGS.

Keywords: underground gas storage, rate of yield, well, filtration, electrical circuit, resistance.

1. Практическое значение схемотехнических моделей ПХГ

Методологической основой построения электрофизических моделей подземных хранилищ газа (ПХГ) служит аналогия дифференциальных уравнений, описывающих движение флюида в пласте-коллекторе при наличии перепада давления между контуром питания и контурами скважин, и распространение тока в электрической среде под действием разности потенциалов между моделями границ скважин, и контуром питания. Неослабевающий интерес к построению электрофизических моделей подчеркивает тот факт, что 13 декабря 2010 г. в АО «Интергаз Центральная Азия» г. Астана состоялось специальное научно-техническое совещание по созданию электрофизических и гидродинамических моделей подземных хранилищ газа.

Преимуществом электрофизических и, в частности, схемотехнических моделей по сравнению с цифровыми является то, что на них можно наглядно и быстро моделировать влияние отдельных участков ПХГ на работу всего объекта в целом. В частности, можно моделировать различные схемы газосборных сетей на ПХГ, по результатам моделирования выбрать оптимальную локальную газосборную сеть, оптимизировать процессы закачки и отбора газа, определить величины перетоков газа между отдельными зонами пласта, установить величины безвозвратных технологических потерь газа. Именно поэтому электрофизические, конкретнее схемотехнические, модели ПХГ, в силу их способности наглядно представлять весь сложный механизм ПХГ как единое целое взаимодействующих отдельных участков, следует рекомендовать, на взгляд авторов, как один из обязательных разделов в отчетах авторского надзора за эксплуатацией ПХГ.

2. Необходимые исходные данные для построения схемотехнической модели ПХГ

Для построения электрофизической модели ПХГ потребуются следующие документы.

1. Структурная карта размещения скважин по площади ПХГ.
2. Действующая зональная геолого-технологическая модель ПХГ, характеризующая геологическое строение и свойства рабочего пласта-коллектора.
3. Данные по внутрипластовым перетокам газа между зонами геолого-технологической модели ПХГ.
4. Схема соединений газораспределительных пунктов (ГРП) и дожимно-компрессорных станций (ДКС) в применяемой локальной газосборной сети.

Конкретные примеры перечисленных документов представлены на рис. 1, 2, 3 и в табл. 1.

На рис. 1 представлен пример структурной карты размещения скважин с выделением на ней зон геолого-технологической модели некоторого конкретного ПХГ. Номера эксплуатационных и наблюдательных скважин в зонах представленной геолого-технологической модели ПХГ перечислены в табл. 1. Данные по перетокам газа между зонами геолого-технологической модели приведены на рис. 2.

На рис. 3 представлена конструктивная схема рабочей локальной газосборной сети ПХГ.

Таблица

Номера скважин в зонах геолого-технологической модели ПХГ

№ зоны	№ РГП	Номера эксплуатационных скважин	Кол-во скважин
1	1	77, 78, 111, 79, 4, 112, 113, 158	8
2	2	2, 37, 108, 2, 48, 56, 76, 73, 32	9
3	3	107, 5, 47, 46, 38, 31, 109, 20, 110	9
4	4	43, 102, 104, 45, 105, 103, 32, 160, 106	9
5	5	7, 123, 139, 138, 141, 121, 140, 122, 150, 119, 142	11
6	6	135, 136, 44, 137, 151	5
7	7	187, 118, 14, 42, 50, 58, 15	7
8	8	74, 3	2
9	9	23, 60, 85, 53, 59, 54, 55, 115	8
10	10	69, 94, 68, 93, 67, 84, 98	7
11	11	41, 99, 60, 100, 65, 91, 101, 64	8
12	12	127, 117, 131, 92, 132, 90, 89, 63, 88, 154, 62, 87, 155, 61, 86, 145	16
13	13	97, 96, 95, 133	4
14	14	1, 71, 80, 81, 72, 49, 30, 70, 82	9
15		143, 17, 6, 157, 149	5
16		114, 124, 8, 125, 126, 153, 147, 12	8
17		19, 35, 24, 16, 128, 159, 116, 130, 13	9
18		85, 146, 156, 144, 18, 10	6
19		29, 30, 5, 20, 31, 15, 21, 32, 7, 22, 33, 23, 34, 17, 24, 35, 28, 25, 36, 26, 37, 19, 27, 42, 3, 11, 9, 2, 41, 8, 39, 40, 38, 10	34
ИТОГО		Эксплуатационных скважин:	112
		Наблюдательных скважин:	62

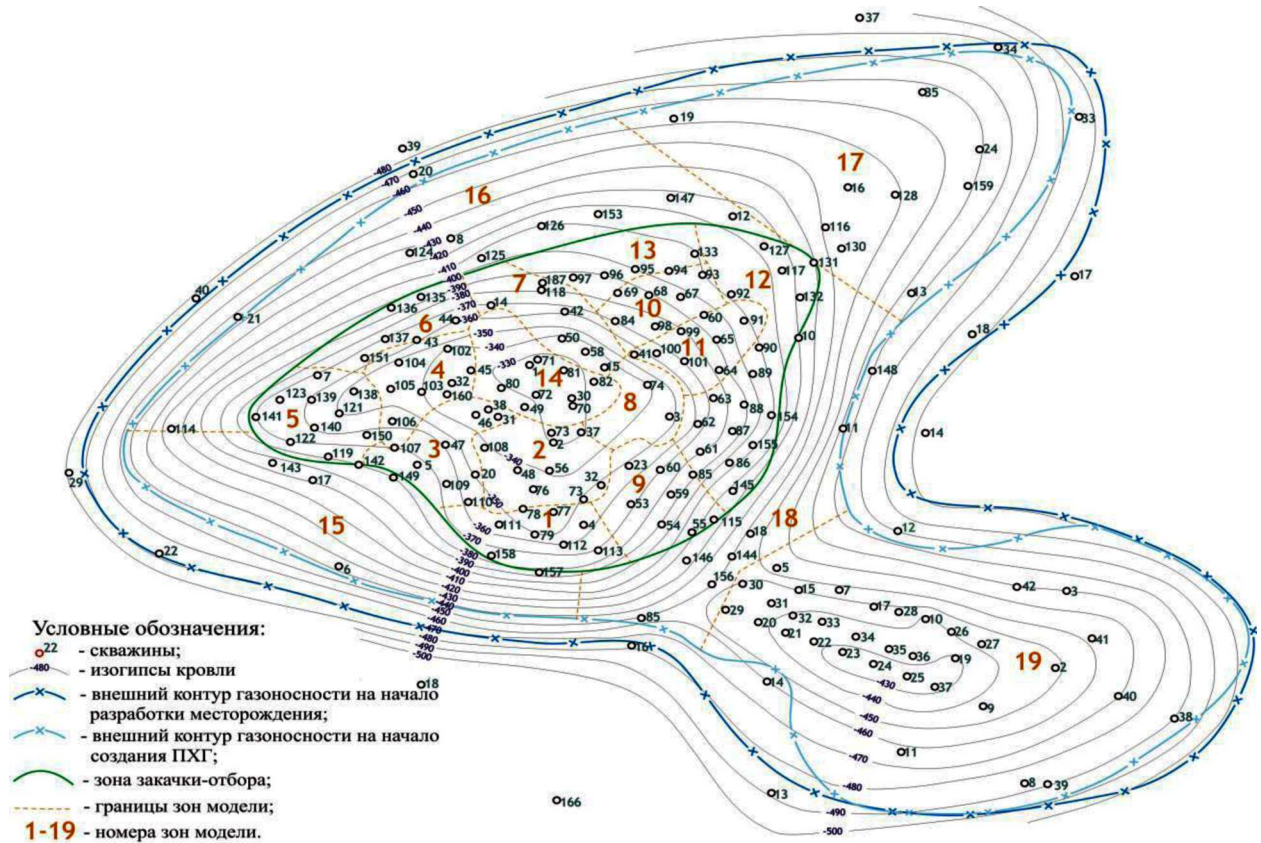


Рис. 1. Структурная карта размещения скважин по площади ПХГ с выделенными зонами действующей геолого-технологической модели

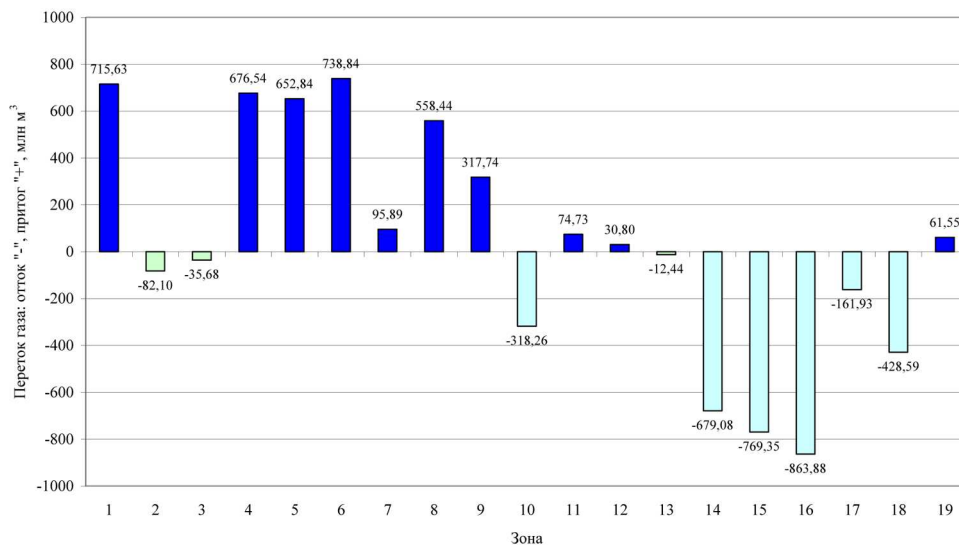


Рис. 2. Гистограммы внутрипластовых перетоков газа между зонами ПХГ в периодах отбора

3. Схемотехническая модель ПХГ

Схемотехническая модель любого подземного хранилища газа, созданного на основе выработанного газового месторождения, представляет собой сложную разветвленную электрическую цепь, состоящую из резисторных сопротивлений, конденсаторов электрической ёмкости, переключателей (ключей), источников постоянного тока. Схемотехническая модель для рассматриваемого приме-

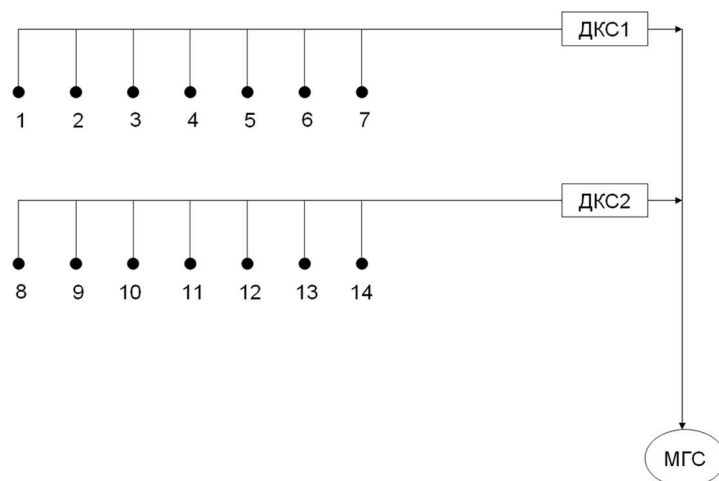


Рис. 3. Пример схемы локальной газосборной сети по скважинам ПХГ ● – газораспределительные пункты (ГРП); ДКС1 и ДКС2 – дожимные компрессорные станции №1 и №2; МГС – магистральная газораспределительная сеть

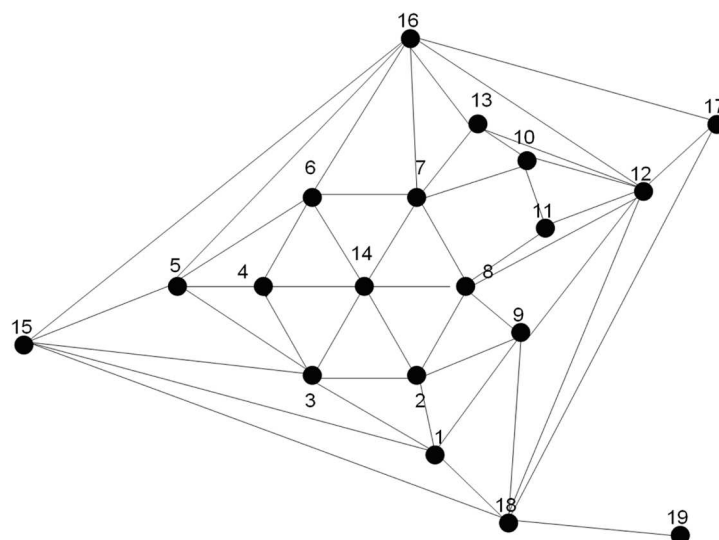


Рис. 4. Схематическая модель рабочего пласта-коллектора ПХГ. Представляет электрическую цепь, моделирующую зоны в принятой геолого-технологической модели ПХГ. Сопротивления между контактными точками 1, 2, ..., 19 подбираются пропорционально перетокам газа по гистограмме на рис. 2. Каждая контактная точка рассматривается как укрупненная скважина, заменяющая собой группу реальных скважин (перечисленных в табл. 1) в зоне с соответствующим номером

ра ПХГ представлена на трёх рисунках. Рис. 4 (зональная геолого-технологическая модель пласта ПХГ); рис. 5 (схематическая модель локальной газосборной сети с подключенными геолого-технологическими зонами) и рис. 6 (схематическая модель, имитирующая работу комплекса всех геолого-технологических зон).

Окончательная итоговая схематическая модель всего комплекса ПХГ из представленных составных частей получается объединением схем на рис. 4, 5 и 6. Для этого, во-первых, контактные точки с номерами 1, 2, ..., 14 на рис. 5 соединяем (для образования электрического контакта) с одноименными по номеру контактными точками на рис. 4. Во-вторых, контактные точки с номерами 1, 2, ..., 19 на рис. 6 соединяем (снова для создания электрического контакта) с одноименными по номеру контактными точками на рис. 4. В результате такого соединения получим схематическую модель всего ПХГ. Активные сопротивления на указанной цепи моделируют падение давления вдоль насосно-компрессорных труб скважин, по длине участков газосборной сети, давления в точках

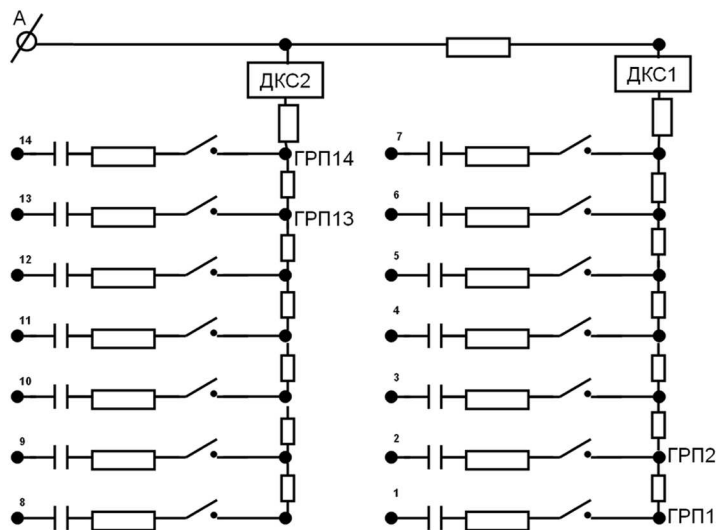


Рис. 5. Блок цепи схмотехнической модели, моделирующий работу комплекса локальной газосборной сети и геолого-технологических зон пласта

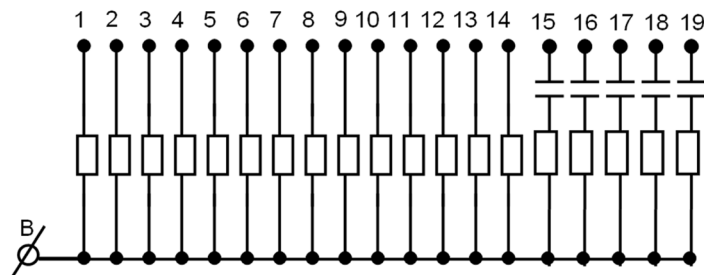


Рис. 6. Блок цепи схмотехнической модели, моделирующий работу комплекса геолого-технологических зон

входа в ДКС, а также (на рис. 4) перегородки газа между отдельными геолого-техническими зонами ПХГ. Конденсаторы электрической ёмкости (разной для разных геолого-технических зон) моделируют локальные емкостные свойства геолого-технических зон. Переключатели (ключи) позволяют моделировать различные способы закачки (отбора) газа в ПХГ.

Для моделирования различных режимов закачки на предложенной схмотехнической модели к клеммам нужно подключить источник постоянного тока с заданным напряжением (пропорциональным задаваемой репрессии). Снимая показатели напряжений и токов в характеристических узлах цепи, будем знать, как и насколько быстро заполняются закачиваемым газом отдельные геолого-технические зоны ПХГ. Например, если будут включены только ключи 10 и 4, то это значит, что моделируется режим закачки газа в ПХГ через две зоны 10 и 4.

Для моделирования процесса отбора на предложенной схмотехнической модели клеммы нужно соединить друг с другом активным сопротивлением и включить (замкнуть) ключи тех геолого-технических зон, из которых планируется делать отбор газа. В результате будет происходить процесс разрядки конденсаторов соответствующих зон, который физически и будет моделировать отбор газа. Снимая показатели напряжений и токов, будем знать, как и насколько быстро будут истощаться отдельные геолого-технологические зоны ПХГ. Например, при всех включенных ключах будет моделироваться одновременный отбор газа из всех скважин ПХГ.

Наличие множества ключей на схмотехнической модели позволяет исследовать всё многообразие режимов закачки и отбора газа на ПХГ и подобрать оптимальный режим для заданного объёма отбора (или закачки) газа.

4. Программное обеспечение, поддерживающее схмотехническое моделирование

После того как схмотехническая модель создана, для разработанной электрической цепи на

основе законов Ома и Кирхгофа необходимо составить систему алгебраических (при моделировании стационарных процессов) или дифференциальных (при моделировании нестационарных динамических процессов) уравнений и произвести их математический расчёт. Разумеется, это весьма сложный и ответственный этап разработки любых математических моделей.

Однако на сегодняшний день для разработки современного радиоэлектронного оборудования существуют специализированные пакеты программ САПР, в которых автоматически составляются уравнения (алгебраические и дифференциальные) для данной электронной цепи и производится их математический расчёт.

Примерами таких САПР являются профессиональные пакеты разработчиков электронной аппаратуры типа ACCEL, EDA и ORCAD. Более простыми пакетами САПР являются пакеты Electronics Workbench и Micro-Cap, основанные на моделях, создаваемых на языке SPice.

Программа Micro-Cap 8 подробно с соответствующими примерами описана в [1]. Эта программа позволяет анализировать сложные замкнутые электронные цепи с переменной конфигурацией. Несмотря на достаточно скромные требования к программно-аппаратным средствам ПК (процессор не ниже Pentium II, ОС Windows 95/98/ME или Windows NT 4/2000/XP, память не менее 64 Мб, монитор не хуже SVGA), возможности данного пакета достаточно велики. Интерфейс программы является стандартным для программ ОС Windows. Как обычно, все команды можно вызвать через меню. Часть наиболее употребляемых команд выведена на инструментальные панели в виде ярлычков (пиктограмм). Пользователь составляет электрическую цепь непосредственно в удобном графическом редакторе (Circuit editor), затем задаёт параметры анализа цепи (Analysis) и изучает графики с данными. Программа, как уже сказано, автоматически составляет уравнения для данной цепи и производит их математический расчёт.

При загрузке программы появляется главное окно MAIN, готовое для рисования электрической схемы в новом файле, получающем название по умолчанию circuit1.cir. В разделе FAIL приведены обычные для ОС Windows команды для работы с файлами. Созданные файлы электрических цепей сохраняются в типе Schematic (*.cir).

В окне EDIT наиболее важной является команда Copy to Clipboard с её четырьмя возможностями сохранения видимого окна или его части. Наиболее востребовано окно Component. По сути, это большая библиотека элементов электрической цепи. В разделе Analog primitives/Passive Components находятся три главных аналоговых линейных элемента: резистор R, конденсатор C, индуктивность L.

По клику левой кнопкой мышки команды Analysis/DC вызывается очень мощное и нужное диалоговое окно DC Analysis Limits. В этом окне можно установить пределы изменения переменных, вид выводимых графиков и собственно команду Run, которая позволяет машине начать анализ электронной цепи. Всё окно разделено на пять областей: кнопки управления, числовые значения, представление графиков, выражения и дополнительные функции (опции).

Важной особенностью пакета Micro-Cap 8 является его способность к математическому моделированию электрических цепей с нелинейными элементами (например, с сопротивлениями, зависящими от температуры и силы тока). Важным из самых простых нелинейных элементов является диод – по сути дела, резистор, сопротивление которого зависит от полярности приложенного напряжения. Именно этот элемент позволит при схемотехническом моделировании ПХГ учесть какие-то гистерезисные явления, в частности, те необратимые процессы, которые приводят к невосполнимым технологическим потерям буферного газа. Поэтому эта способность Micro-Cap 8 заслуживает специального внимания.

5. Заключение

Учитывая наличие на сегодняшний день мощных и с удобным интерфейсом специализированных пакетов САПР для анализа сложных электронных схем, разработку схемотехнических моделей ПХГ следует считать, на взгляд авторов, как один из обязательных разделов в отчетах авторского надзора за эксплуатацией ПХГ. Схемотехнические модели ПХГ помогут с наименьшими затратами оптимизировать процессы закачки-отбора газа на ПХГ и выбирать оптимальные режимы эксплуатации скважинного фонда ПХГ.

Список литературы

- Амелина М. А., Амелин С. А. Программа схемотехнического моделирования Micro-Cap 8. М.: Горячая линия-Телеком, 2007. 464 с.

References

Amelina M. A., Amelin S. A. Programma skhemotekhnicheskogo modelirovaniya Micro-Cap 8. M.: Goryachaya liniya–Telekom, 2007. 464 s.

Статья поступила в редакцию 29.01.2013

УДК 532.5
ББК В253.31/32

Владимир Александрович Толпаев
доктор физико-математических наук, профессор,
Северо-Кавказский научно-исследовательский
проектный институт природных газов
(Ставрополь, Россия), e-mail: v.a.tolpaev@mail.ru

Ирина Анатольевна Евенко
старший преподаватель,
Ставропольский институт кооперации (филиал)
Белгородского университета кооперации, экономики и права
(Ставрополь, Россия) e-mail: irina.evenko@mail.ru

Математические модели плоскорадиальной фильтрации газа по закону Форхгеймера к вертикальной скважине

В статье дается вывод уравнения для исследования нестационарного плоскорадиального притока газа по закону Форхгеймера с целью его дальнейшего применения для обработки данных кривых восстановления давления и кривых падения давления, по которым можно значительно точнее по сравнению со стационарными исследованиями определить пластовое давление в зоне дренирования скважины.

Ключевые слова: скважина, зона дренирования, обработка данных газогидродинамических исследований, плоскорадиальный приток газа, линейный закон Дарси, закон Форхгеймера, кривые восстановления давления, кривые падения давления.

Vladimir Aleksandrovich Tolpaev
Doctor of Physics and Mathematics, Professor,
North-Caucasian Research Planning Institute of Natural Gases
(Stavropol, Russia) e-mail: v.a.tolpaev@mail.ru

Irina Anatol'evna Evenko
Senior Lecturer,
Stavropol Institute of Cooperation, Branch of
Belgorod University of Cooperation, Economics and Law
(Stavropol, Russia) e-mail: irina.evenko@mail.ru

Mathematical Models of Flat-Radial Gas Filtration by the Forchheimer Law to a Vertical Well

The article provides derivation of an equation for the study of unsteady flat-radial gas discharge according to the Forchheimer law for the purpose of its further application with the data on pressure recovery curves and pressure drop curves. They can more accurately determine reservoir pressure in the drainage area of the well as compared with the stationary studies.

Keywords: well, drainage area, data processing of gas-hydrodynamic studies, flat-radial gas discharge, Darcy's linear law, Forchheimer law, pressure recovery curves, pressure drop curves.

Введение. На сегодняшний день стандартная методика обработки данных газогидродинамических исследований (ГДИ) скважин базируется на решениях стационарных и нестационарных задач о плоскорадиальном притоке газа к вертикальной скважине, когда фильтрация подчиняется линейному закону Дарси, а при решении нестационарного уравнения применяется линеаризация Лейбензона. В действительности в призабойной зоне пласта (ПЗП) фильтрация газа подчиняется двучленному закону Форхгеймера [1], однако двучленное уравнение применяется лишь для обработки данных ГДИ на установившихся режимах. В статье дается вывод уравнения для исследования нестационарного плоскорадиального притока газа по закону Форхгеймера с целью его дальнейшего применения для обработки данных кривых восстановления давления и кривых падения давления,

по которым можно значительно точнее по сравнению со стационарными исследованиями определить пластовое давление в зоне дренирования скважины.

1. Вывод основного уравнения плоскорадиальной фильтрации газа по закону Форхгеймера к вертикальной скважине. Математические модели нестационарных плоскорадиальных притоков газа по закону Форхгеймера [1] (говорят также, по двухчленному закону фильтрации) к совершенной вертикальной скважине для однородной призабойной зоны пласта описываются системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r}[\rho v(r, t)] + \frac{\rho v(r, t)}{r} &= m \frac{\partial \rho}{\partial t}, \\ \beta \frac{\rho}{\sqrt{k}} v^2(r, t) + \frac{\mu v(r, t)}{k} &= \frac{\partial P(r, t)}{\partial r}, \\ \rho &= \rho_{am} \zeta \frac{P}{P_{am}}, \quad \zeta = \frac{Z_{am} T_{am}}{Z_{nl} T_{nl}}. \end{aligned} \quad (1)$$

В системе уравнений (1): r – расстояние от оси скважины до точки наблюдения; t – время; $P(r, t)$ – давление газа в пласте; $\rho(r, t)$ – плотность газа в пластовых условиях; ρ_{am} – плотность газа при нормальном атмосферном давлении; P_{am} и стандартной атмосферной температуре T_{am} ; $v(r, t)$, – скорость фильтрации; k – проницаемость пласта; m – пористость, β – безразмерная характеристика шероховатости и извилистости порового пространства пласта; μ – коэффициент динамической вязкости газа в пластовых условиях; $Z_{am} = Z(P_{am}, T_{am})$, $Z_{nl} = Z(P_{nl}, T_{nl})$ – коэффициенты сверхсжимаемости газа при пластовых и нормальных атмосферных условиях.

Первое уравнение в системе (1) представляет собой математическое выражение закона сохранения массы фильтрующегося газа; второе – динамическое уравнение движения (закон Форхгеймера); третье – уравнение состояния реального газа. Заметим, что для идеального газа уравнение состояния имеет вид

$$\rho = \frac{\rho_{am} P}{P_{am}}, \quad (2)$$

то есть для идеального газа коэффициент $\zeta = 1$. Поэтому в дальнейших выкладках, исходя из соображений сокращения объемов записи формул, будем применять без ограничения общности уравнение состояния газа в виде (2). Там, где понадобится произвести расчёт для реального газа, нужно заменить плотность ρ_{am} произведением $\rho_{am} \zeta$.

Приступим к выводу основного уравнения. Из второго уравнения системы (1), которое перепишем в виде квадратного уравнения относительно $v(r, t)$, найдём

$$\rho v(r, t) = \frac{\mu}{2\beta\sqrt{k}} \left(\sqrt{1 + \frac{4\beta k \rho \sqrt{k}}{\mu^2} \frac{\partial P(r, t)}{\partial r}} - 1 \right). \quad (3)$$

Отсюда, учитывая уравнения состояния (2) и вводя функцию Лейбензона $\Phi(r, t) = P^2(r, t)$, получим

$$\rho v(r, t) = \frac{\mu}{2\beta\sqrt{k}} \left(\sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r}} - 1 \right). \quad (4)$$

Подставляя (4) в первое уравнение системы (1), с учётом уравнения (2), найдём

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(\sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r}} \right) + \frac{1}{r} \left(\sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r}} - 1 \right) &= \\ &= \frac{m\beta\rho_{am}\sqrt{k}}{\mu P_{am}\sqrt{\Phi(r, t)}} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнения (5), и есть основное уравнение нестационарного плоскорадиального притока газа к вертикальной скважине.

2. Преобразование основного уравнения плоскорадиальной фильтрации газа. Выполняя дифференцирование первого слагаемого в левой части уравнения (5), с учётом

$$\sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r}} - 1 = \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r} \left(\sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r}} + 1 \right)^{-1}$$

уравнение (5) приведём к виду

$$\frac{\partial^2 \Phi(r, t)}{\partial r^2} + \frac{F_1[\Phi(r, t)]}{r} \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r} = \frac{m\mu}{k\sqrt{\Phi(r, t)}} F_2[\Phi(r, t)] \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial t}, \quad (6)$$

где $F_1[\Phi(r, t)]$ и $F_2[\Phi(r, t)]$ – две безразмерные функции, определяемые равенствами

$$F_1[\Phi] = 2\sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi}{\partial r}} \left(\sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi}{\partial r}} + 1 \right)^{-1}, \quad (7)$$

$$F_2[\Phi] = \sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{\partial \Phi}{\partial r}}. \quad (8)$$

Поскольку, как легко видеть, $F_{1,2}[\Phi] \rightarrow 1$ при $\beta \rightarrow 0$, то в пределе, когда двучленный закон фильтрации газа переходит в закон Дарси, из (6) получаем хорошо известное уравнение нестационарного плоскорадиального притока газа к вертикальной скважине по закону Дарси.

3. Точное стационарное решение задачи о плоскорадиальном притоке газа по закону Форхгеймера к вертикальной скважине. Уравнение стационарного плоскорадиального притока газа (6) примет вид

$$\frac{d\Psi(r)}{dr} + \frac{1}{r}[\Psi(r) - 1] = 0,$$

где

$$\Psi(r) = \sqrt{1 + \frac{2\beta k \rho_{am} \sqrt{k}}{\mu^2 P_{am}} \frac{d\Phi(r)}{dr}}.$$

Опуская элементарные выкладки, запишем точное решение стационарной задачи:

$$\Phi(r) - \Phi_3 = A Q \frac{\ln(r/r_c)}{\ln(R/r_c)} + B Q^2 \frac{(r - r_c)R}{(R - r_c)r}, \quad (9)$$

где

$$A = \frac{\mu P_{am}}{\pi b k} \ln(R/r_c), \quad B = \frac{\beta \rho_{am} P_{am}}{2\pi^2 b^2 \sqrt{k}} \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{R} \right) \cong \frac{\beta \rho_{am} P_{am}}{2\pi^2 b^2 r_c \sqrt{k}},$$

R – радиус контура питания, r_c – радиус скважины (радиус долота, вскрывшего пласт), а на этих круговых границах области фильтрации задаются значения давления, т. е. значения функции Лейбензона $\Phi(r_c) = \Phi_3 = P_3^2$ и $\Phi(R) = \Phi_n = P_n^2$. Подставляя в (9) значение $r = R$, получим следующее хорошо известное в литературе уравнение для расчета дебита Q скважины:

$$P_n^2 - P_3^2 = A Q + B Q^2. \quad (10)$$

4. Упрощённая форма основного уравнения второй базовой модели. Математические модели нестационарных плоскорадиальных притоков газа по закону Форхгеймера к вертикальной скважине для однородной призабойной зоны пласта описываются решениями весьма сложного для аналитического и численного решения уравнения (5) и его модификацией (6). Для преобразования уравнения (6) будем опираться на следующие свойства его стационарного решения (9). Первое свойство стационарного решения (9) показывает, что во всей области фильтрации (за исключением кольца между контуром скважины и окружностью с радиусом $r \cong (10 \div 50)r_c$) можно считать $\sqrt{\Phi(r)} \cong P_{nl}$. Второе свойство стационарного решения (9) заключается в том, что

$$F_1[\Phi(r)] = 1 + \frac{C}{2r + C}, \quad F_2[\Phi(r)] = 1 + \frac{C}{r},$$

где

$$C = \frac{\rho_{am} Q \beta \sqrt{k}}{\pi b \mu},$$

Q – соответствующий стационарному решению дебит скважины, определяемый из уравнения (10); F_i имеют вид (7), (8).

Для преобразования уравнения (6) с целью его упрощения примем *рабочую гипотезу* – для любого нестационарного решения $\Phi(r, t)$ уравнения (6) с достаточной для практики точностью можно считать верными равенства

$$F_1[\Phi(r, t)] \cong 1 + \frac{C}{2r + C}, \quad F_2[\Phi(r, t)] \cong 1 + \frac{C}{r}. \quad (11)$$

Если рабочая гипотеза (11) верна, то для исследования закономерностей плоскорадиального притока газа к скважине, когда фильтрация подчиняется двучленному закону Форхгеймера, вместо точных уравнений (5) и (6) можно будет применять более простое для решения начально-краевых задач уравнение

$$\frac{\partial^2 \Phi(r, t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \left(1 + \frac{C}{2r + C} \right) \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r} = \frac{m\mu}{k\sqrt{\Phi(r, t)}} \left(1 + \frac{C}{r} \right) \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial t}. \quad (12)$$

Если же к рабочей гипотезе (11) присоединить приближенное равенство $\sqrt{\Phi(r, t)} \approx \sqrt{\Phi(r)} \cong P_{nl}$, то тогда плоскорадиальную фильтрацию по двучленному закону Форхгеймера в первом приближении можно будет описывать решениями начально-краевых задач линейного уравнения

$$\frac{\partial^2 \Phi(r, t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \left(1 + \frac{C}{2r + C} \right) \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial r} = \frac{m\mu}{kP_{nl}} \left(1 + \frac{C}{r} \right) \frac{\partial \Phi(r, t)}{\partial t}. \quad (13)$$

В заключение отметим, что вопрос о возможности применения в обработке экспериментальных данных кривых восстановления давления и кривых падения давления с помощью нестационарных решений начально-краевых задач приближенных уравнений (12) и (13) пока остается открытым и ждет своих исследователей.

Список литературы

Басниев К. С., Дмитриев Н. М., Розенберг Г. Д. Нефтегазовая гидромеханика. М.; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. 480 с.

References

Basniyev K. S., Dmitriyev N. M., Rozenberg G. D. Neftegazovaya gidromekhanika. M.; Izhevsk: Institut kompyuternykh issledovany, 2003. 480 s.

Статья поступила в редакцию 17.04.2013

УДК 534.1
ББК В312

Владимир Евгеньевич Холодовский
кандидат физико-математических наук, доцент,
Брянский государственный университет им. И. Г. Петровского
(Брянск, Россия), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru
Елена Юрьевна Краюшкина
аспирант,
Брянский государственный университет им. И. Г. Петровского
(Брянск, Россия), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru

Дисперсионные соотношения для кристаллов твёрдых растворов со структурой CsCl¹

На основе ранее разработанной методики построена динамическая модель для кристаллов, имеющих структуру типа CsCl, учитывающая взаимодействие между атомами на первых двух координационных сферах. С применением экспериментальных данных по нейтронному рассеянию сделаны расчёты дисперсионных кривых и упругих констант для кристаллов твёрдых растворов NiAl, ZnCu и FeAl.

Ключевые слова: кристаллическая решётка, динамическая модель, межатомное взаимодействие, дисперсионные кривые, упругие константы.

Vladimir Evgen'evich Kholodovskiy
Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor,
Petrovskiy Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru
Elena Yur'evna Krayushkina
Postgraduate Student,
Petrovskiy Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru

Dispersion Relations for Solid Solution Crystals with CsCl Structure

Using a previously developed method, a dynamic model for the crystal structure of CsCl type is constructed. The model takes into account the interactions between the atoms of the first two coordination spheres. Based on experimental data on neutron scattering, calculations of the dispersion curves and elastic constants for crystal solid solutions of NiAl, ZnCu and FeAl are made.

Keywords: crystal lattice, dynamic model, interatomic interaction, dispersion curves, elastic constants.

В работах [1–5] в адиабатическом приближении была построена динамическая модель, описывающая вибрацию кристаллов инертных газов, а также металлов, имеющих ОЦК и ГЦК кристаллические решётки. При определении сил межатомного взаимодействия использовался механизм Ван-дер-Ваальсовских связей. Разработанные математические методы позволили произвести расчёты дисперсионных кривых, фоновых спектров, температурных зависимостей теплоёмкости и среднеквадратичных смещений для кристаллов инертных газов при различных сжатиях, а также для ряда элементов 1–5 групп таблицы Д. И. Менделеева. Расчёты производились без использования подгоночных параметров, а исходными данными служили значения упругих констант, атомная масса и параметр решётки соответствующего вещества. Для КИГ в тех случаях, когда данные по упругим константам отсутствовали, использовались экспериментальные данные по значениям дисперсионных кривых на границе зоны Бриллюэна. Полученные результаты обнаружили достаточно хорошее соответствие имеющимся экспериментальным данным.

¹Работа выполнена в рамках Государственного задания вузу Минобрнауки РФ по теме «Тепловые свойства новых термоэлектрических, полупроводниковых и оптических материалов».

К кристаллам, обладающим металлическими связями, помимо моноатомных относятся также бинарные соединения, называемые твёрдыми растворами или сплавами. Среди них, например, находятся соединения NiAl и ZnCu и др., кристаллические решётки которых имеют структуру типа CsCl. Исследования указанных соединений проводились в работах [6–11] и др. В них речь шла о сплавах, в которых соотношение образующих элементов отличалось от 50 % на 50 %. Так, в работе [6] с использованием ультразвуковых методов исследования определялась температурная зависимость значений упругих констант сплава NiAl от концентрации Ni. В работе [7] на основе экспериментальных данных производились расчёты дисперсионных кривых для сплава NiAl, где концентрация Ni составляла 49.4 %. Для расчётов использовалась динамическая модель Борна-Кармана. Для достижения приемлемой точности по отношению к экспериментальным данным необходим был учёт сил взаимодействия между атомами, расположенными друг относительно друга на 1–4 координационных сферах. Описание такого рода сил потребовало введения 8 свободных параметров. На основе полученных данных производились расчёты фононного спектра. Ещё раньше аналогичные исследования были проведены в работе [8] для сплава ZnCu, где концентрация Zn составляла 47 % и 48 %. Здесь также авторы отталкивались от экспериментальных данных по нейтронному рассеянию и использовали модель Борна-Кармана. Используя 8 подгоночных параметров, они произвели расчёты дисперсионных кривых, упругих констант и фононных спектров сплавов. Следует отметить, что во всех случаях физическая суть механизма межатомного взаимодействия оставалась невыясненной.

В настоящей работе в продолжение проведенных исследований разработанная динамическая модель рассматривается применительно к бинарным решеткам твёрдых растворов NiAl, ZnCu и FeAl, где соотношение образующих атомов считается равным 50 % на 50 %. Не вдаваясь в физическую суть механизмов межатомного взаимодействия (см. работы [1–5]), мы рассмотрим лишь математическую сторону вопроса.

1. Уравнение динамики. Рассмотрим бинарную кубическую кристаллическую решётку типа CsCl. Такая решётка может быть получена путём наложения двух простых кубических подрешёток, когда центры кубических ячеек первой подрешётки совмещаются с соответствующими узлами второй. Пусть каждая из подрешёток имеет форму куба, ребра которого содержат n атомов. Тогда $N = n^3$ – число атомов в каждой из подрешёток.

Обозначим через a параметр решётки, а через μ_1 и μ_2 – массы атомов, образующих первую и соответственно вторую подрешётки кристалла. Выберем в пространстве систему кристаллографических координат $Oxyz$ с единичными направляющими векторами $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ координатных осей так, чтобы радиус-вектор каждого узла $P = P_{ijk}^1$ первой подрешётки мог быть задан по формуле

$$\mathbf{r}_{ijk}^1 = a(i\mathbf{e}_x + j\mathbf{e}_y + k\mathbf{e}_z).$$

Тогда радиус-вектор каждого узла $P = P_{ijk}^2$ второй подрешётки определится так:

$$\mathbf{r}_{ijk}^2 = [a(i + 1/2)\mathbf{e}_x + (j + 1/2)\mathbf{e}_y + (k + 1/2)\mathbf{e}_z],$$

где $i, j, k = 1, \dots, n$ – некоторый набор натуральных чисел.

Пусть Λ – множество всех числовых наборов $\xi = (i, j, k)$, в которых $i, j, k = 1, \dots, n$, а A_ξ^1 и A_ξ^2 – атомы первой и второй подрешёток, положения равновесий которых находятся в узлах $P_\xi^1 = P_{ijk}^1$ и $P_\xi^2 = P_{ijk}^2$ соответственно. Обозначим через $S_l^1(\xi)$ и $S_l^2(\xi)$ множества всех мультииндексов $\xi' \in \Lambda$, нумерующих атомы, находящиеся на l -той координационной сфере атомов A_ξ^1 и A_ξ^2 соответственно.

Пусть $\xi' = (i', j', k') \in S_l^1(\xi)$. Обозначим через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}^1$ единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ^1 к узлу $P_{\xi'}^1$. Тогда, как легко видеть, справедливо равенство

$$\mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\epsilon_{ii'}^1\mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}^1\mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}^1\mathbf{e}_z),$$

где $\epsilon_{ii'}^1 = 2(i' - i) + 1$, $\epsilon_{jj'}^1 = 2(j' - j) + 1$, $\epsilon_{kk'}^1 = 2(k' - k) + 1$, причем $\epsilon_{ii'}^1, \epsilon_{jj'}^1, \epsilon_{kk'}^1 = \pm 1$.

Аналогично, если $\xi' = (i', j', k') \in S_l^2(\xi)$, то обозначим через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}^2$ единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ^2 к узлу $P_{\xi'}^2$. Тогда справедливо равенство

$$\mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\epsilon_{ii'}^2\mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}^2\mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}^2\mathbf{e}_z),$$

где $\epsilon_{ii'}^2 = 2(i' - i) - 1$, $\epsilon_{jj'}^2 = 2(j' - j) - 1$, $\epsilon_{kk'}^2 = 2(k' - k) - 1$, так что $\epsilon_{ii'}^2, \epsilon_{jj'}^2, \epsilon_{kk'}^2 = \pm 1$.

В случае, когда $\xi' = (i', j', k') \in S_2^1(\xi)$ (или $\xi' = (i', j', k') \in S_2^2(\xi)$), единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ^1 к узлу $P_{\xi'}^1$ (или от узла P_ξ^2 к узлу $P_{\xi'}^2$), будет обозначаться просто $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$. Полагая в этом случае $\epsilon_{ii'} = i' - i$, $\epsilon_{jj'} = j' - j$, $\epsilon_{kk'} = k' - k$, приходим к равенству

$$\mathbf{e}_{\xi\xi'} = \epsilon_{ii'}\mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}\mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}\mathbf{e}_z,$$

в правой части которого всегда два из трёх коэффициентов $\epsilon_{ii'}$, $\epsilon_{jj'}$, $\epsilon_{kk'}$ равны нулю, тогда как третий может принимать значения ± 1 .

Обозначим, наконец, через $\mathbf{u}_\xi^1(t)$ вектор смещения атома A_ξ^1 из положения равновесия в момент времени t ; аналогично определим вектор $\mathbf{u}_\xi^2(t)$.

Пусть A_ξ – атом первой или второй подрешётки, а $A_{\xi'}$ – атом, находящийся на первой или второй координационной сфере атома A_ξ . Обозначим, как и выше, опуская пока верхние индексы, через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$ единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ к узлу $P_{\xi'}$. Пусть $\mathbf{w}_{\xi\xi'} = \mathbf{u}_{\xi'} - \mathbf{u}_\xi$ – вектор относительного перемещения атомов A_ξ и $A_{\xi'}$, а $\mathbf{r}_{\xi\xi'} = \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} - \mathbf{e}_{\xi\xi'}$ – его радиальная и $\mathbf{p}_{\xi\xi'} = \mathbf{w}_{\xi\xi'} - \mathbf{r}_{\xi\xi'}$ – тангенциальная составляющие. На атом A_ξ со стороны атома $A_{\xi'}$ действует сила $\mathbf{F}_{\xi\xi'}$, которую мы будем считать линейно зависящей от вектора $\mathbf{w}_{\xi\xi'}$ согласно формулам

$$\mathbf{F}_{\xi\xi'} = \sigma_{1r}\mathbf{r}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{p}_{\xi\xi'} = (\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{w}_{\xi\xi'},$$

если $\xi' \in S_1(\xi)$ и

$$\mathbf{F}_{\xi\xi'} = \sigma_{2r}\mathbf{r}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}\mathbf{p}_{\xi\xi'} = (\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}\mathbf{w}_{\xi\xi'},$$

если $\xi' \in S_2(\xi)$, где σ_{ir} , σ_{it} – некоторые константы, определяемые свойствами кристалла. Ограничиваясь действием сил указанного вида и обозначая через μ массу атома A_ξ , приходим к уравнению Ньютона

$$\begin{aligned} \mu\ddot{\mathbf{u}}_\xi = & \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{w}_{\xi\xi'}] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} [(\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}\mathbf{w}_{\xi\xi'}]. \end{aligned}$$

Преобразуем полученное уравнение, используя равенство $\mathbf{w}_{\xi\xi'} = \mathbf{u}_{\xi'} - \mathbf{u}_\xi$. Тогда уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} \mu\ddot{\mathbf{u}}_\xi = & -\sigma_0\mathbf{u}_\xi + \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{u}_{\xi'}] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} [(\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}\mathbf{u}_{\xi'}], \end{aligned} \quad (1.1)$$

где

$$\sigma_0 = \frac{8}{3}(\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) + 2(\sigma_{2r} + 2\sigma_{2t}). \quad (1.2)$$

Рассматриваемая кристаллическая решётка обладает свойством центральной симметрии относительно произвольного её узла. Это значит, что для каждого узла P_ξ и соседнего к нему узла $P_{\xi'}$ найдётся узел $P_{\bar{\xi}}$, противоположно расположенный к $P_{\xi'}$ относительно узла P_ξ . При этом, если $\xi' \in S_l(\xi)$, то и $\bar{\xi}' \in S_l(\xi)$, а $\mathbf{e}_{\xi\bar{\xi}'} = -\mathbf{e}_{\xi\xi'}$.

Из сказанного следует, что в уравнении (1.1) суммирование по координационным сферам можно свести к суммированию по полусферам, взяв в качестве слагаемых суммы сил, действующих на атом A_ξ со стороны двух противоположно расположенных атомов соответствующей координационной сферы. Обозначим через $\bar{S}_l(\xi)$ множество мультииндексов, нумерующих атомы какой-нибудь полусферы l -той координационной сферы атома A_ξ . Тогда уравнение (1.1) может быть записано так:

$$\begin{aligned} \mu \ddot{\mathbf{u}}_{\xi} = & -\sigma_0 \mathbf{u}_{\xi} + \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}(\mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'})] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} [(\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}(\mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'})]. \end{aligned}$$

Разделяя атомы кристалла по подрешёткам, будем считать, что силовые коэффициенты $\sigma_{2r}^1, \sigma_{2r}^2$, а также $\sigma_{2t}^1, \sigma_{2t}^2$, определяющие взаимодействие между собой атомов каждой из подрешёток, различны для этих подрешёток. Тогда согласно формуле (1.2) получаем

$$\sigma_0^1 = \frac{8}{3}(\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) + 2(\sigma_{2r}^1 + 2\sigma_{2t}^1); \quad \sigma_0^2 = \frac{8}{3}(\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) + 2(\sigma_{2r}^2 + 2\sigma_{2t}^2).$$

С учётом сказанного система уравнений, описывающая колебания каждой из подрешёток, может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \mu_1 \ddot{\mathbf{u}}_{\xi}^1 = & -\sigma_0^1 \mathbf{u}_{\xi}^1 + \sum_{\xi' \in S_1^1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'}^2 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2, \mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 + \sigma_{1t}(\mathbf{u}_{\xi'}^2 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2)] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2^1(\xi)} [(\sigma_{2r}^1 - \sigma_{2t}^1) \langle \mathbf{u}_{\xi'}^1 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^1, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}^1(\mathbf{u}_{\xi'}^1 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^1)], \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$\begin{aligned} \mu_2 \ddot{\mathbf{u}}_{\xi}^2 = & -\sigma_0^2 \mathbf{u}_{\xi}^2 + \sum_{\xi' \in S_1^1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'}^1 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^1, \mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 + \sigma_{1t}(\mathbf{u}_{\xi'}^1 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^1)] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2^1(\xi)} [(\sigma_{2r}^2 - \sigma_{2t}^2) \langle \mathbf{u}_{\xi'}^2 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}^2(\mathbf{u}_{\xi'}^2 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2)]. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Будем искать решение полученной системы уравнений в виде бегущих волн:

$$\mathbf{u}_{\xi}^1(t) = \mathbf{v}^1 \sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_{\xi}^1 - \omega t) = \mathbf{v}^1 s_{\xi}^1(t), \quad \mathbf{u}_{\xi}^2(t) = \mathbf{v}^2 \sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_{\xi}^2 - \omega t) = \mathbf{v}^2 s_{\xi}^2(t), \quad (1.5)$$

где ω – частота, $\mathbf{K} = K_x \mathbf{e}_x + K_y \mathbf{e}_y + K_z \mathbf{e}_z$ – волновой вектор, а $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2$ – векторы поляризации. Согласно условию цикличности Борна-Кармана, при описании движения решётки волновой вектор может принимать только те значения, при которых на протяжении решётки в направлении каждой координатной оси укладывается целое число длин волн. Это значит, что должны выполняться равенства:

$$\mathbf{K}na\mathbf{e}_x = K_x na = 2\pi h, \quad \mathbf{K}na\mathbf{e}_y = K_y na = 2\pi l, \quad \mathbf{K}na\mathbf{e}_z = K_z na = 2\pi m,$$

где h, l, m – целые числа. Отсюда следует, что волновой вектор должен иметь вид

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{na} (h\mathbf{e}_x + l\mathbf{e}_y + m\mathbf{e}_z).$$

Пусть $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$, а $\xi' = (i', j', k') \in S_1^1(\xi)$. Положим $\Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1 = \mathbf{r}_{\xi'}^2 - \mathbf{r}_{\xi}^1$. Тогда

$$\mathbf{r}_{\xi'}^2 = \mathbf{r}_{\xi}^1 + \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1, \quad \mathbf{r}_{\bar{\xi}'}^2 = \mathbf{r}_{\xi}^1 - \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1, \quad \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1 = \frac{a}{2}(\epsilon_{ii'}^1 \mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}^1 \mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}^1 \mathbf{e}_z). \quad (1.6)$$

Вычисляя сумму $\mathbf{u}_{\xi'}^2(t) + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2(t)$ и учитывая (1.5), (1.6), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{\xi'}^2(t) + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2(t) = & \mathbf{v}^2 \{ \sin[\mathbf{K}(\mathbf{r}_{\xi}^1 + \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1) - \omega t] + \sin[\mathbf{K}(\mathbf{r}_{\xi}^1 - \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1) - \omega t] \} = \\ = & 2s_{\xi}^1(t) \cos(\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1) \mathbf{v}^2. \end{aligned}$$

Аналогично, определяя вектор смещения $\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}^2 = \mathbf{r}_{\xi'}^1 - \mathbf{r}_{\xi}^2$, приходим к равенству

$$\mathbf{u}_{\xi'}^1(t) + \mathbf{u}_{\xi}^1(t) = 2s_{\xi}^2(t) \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}^2) \mathbf{v}^1.$$

Если $\xi' \in S_2^1(\xi)$ или $\xi' \in S_2^2(\xi)$, то $\mathbf{r}_{\xi'}^1 - \mathbf{r}_{\xi}^1 = \mathbf{r}_{\xi'}^2 - \mathbf{r}_{\xi}^2$. Полагая $\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'} = \mathbf{r}_{\xi'}^1 - \mathbf{r}_{\xi}^1$, получаем

$$\mathbf{u}_{\xi'}^1(t) + \mathbf{u}_{\xi}^1(t) = 2s_{\xi}^1(t) \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}) \mathbf{v}^1, \quad \mathbf{u}_{\xi'}^2(t) + \mathbf{u}_{\xi}^2(t) = 2s_{\xi}^2(t) \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}) \mathbf{v}^2.$$

Введем сокращенные обозначения, полагая для заданного вектора \mathbf{K}

$$c_{\xi\xi'}^1 = \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}^1), \quad c_{\xi\xi'}^2 = \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}^2), \quad c_{\xi\xi'} = \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}).$$

Подставляя бегущие волны (1.5) в полученную выше систему, учитывая приведенные выше равенства и сокращая обе её части на общие множители $s_{\xi}^1(t)$ и $s_{\xi}^2(t)$ соответственно, приходим к системе уравнений относительно частоты ω и векторов $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2$:

$$\begin{aligned} -\mu_1 \omega^2 \mathbf{v}^1 &= -\sigma_0^1 \mathbf{v}^1 + 2 \sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^1 [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) < \mathbf{v}^2, \mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 > \mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 + \sigma_{1t} \mathbf{v}^2] + \\ &+ 2 \sum_{\xi' \in \bar{S}_2^1(\xi)} c_{\xi\xi'} [(\sigma_{2r}^1 - \sigma_{2t}^1) < \mathbf{v}^1, \mathbf{e}_{\xi\xi'} > \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}^1 \mathbf{v}^1], \end{aligned} \quad (1.7)$$

$$\begin{aligned} -\mu_2 \omega^2 \mathbf{v}^2 &= -\sigma_0^2 \mathbf{v}^2 + 2 \sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^2 [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) < \mathbf{v}^1, \mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 > \mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 + \sigma_{1t} \mathbf{v}^1] + \\ &+ 2 \sum_{\xi' \in \bar{S}_2^1(\xi)} c_{\xi\xi'} [(\sigma_{2r}^2 - \sigma_{2t}^2) < \mathbf{v}^2, \mathbf{e}_{\xi\xi'} > \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}^2 \mathbf{v}^2]. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Обозначим через x_1, y_1, z_1 и x_2, y_2, z_2 координаты векторов \mathbf{v}^i . Вводя сокращённые обозначения

$$\sigma_1 = \frac{\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}}{3}, \quad \sigma_2 = \frac{\sigma_{1r} - \sigma_{1t}}{3}, \quad c_h = \cos \frac{\pi h}{n}, \quad s_h = \sin \frac{\pi h}{n} \quad (1.9)$$

и вычисляя суммы

$$\sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^1 = 4c_h c_l c_m, \quad \sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^1 \epsilon_{ii'}^1 \epsilon_{jj'}^1 = -4s_h s_l c_m, \quad \sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^1 \epsilon_{ii'}^1 \epsilon_{kk'}^1 = -4s_h c_l s_m,$$

приходим к системе

$$\begin{aligned} (a_x^1 - \mu_1 \omega^2) x_1 + b x_2 + b_z y_2 + b_y z_2 &= 0, & (a_y^1 - \mu_1 \omega^2) y_1 + b_z x_2 + b y_2 + b_x z_2 &= 0, \\ (a_z^1 - \mu_1 \omega^2) z_1 + b_y x_2 + b_x y_2 + b z_2 &= 0, \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$b x_1 + b_z y_1 + b_y z_1 + (a_x^2 - \mu_2 \omega^2) x_2 = 0, \quad b_z x_1 + b y_1 + b_x z_1 + (a_y^2 - \mu_2 \omega^2) y_2 = 0,$$

$$b_y x_1 + b_x y_1 + b z_1 + (a_z^2 - \mu_2 \omega^2) z_2 = 0,$$

$$a_x^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^1 s_h^2 + 4\sigma_{2t}^1 (s_l^2 + s_m^2), \quad a_x^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^2 s_h^2 + 4\sigma_{2t}^2 (s_l^2 + s_m^2), \quad (1.11)$$

$$b = -8\sigma_1 c_h c_l c_m, \quad b_x = 8\sigma_2 c_h s_l s_m. \quad (1.12)$$

Остальные коэффициенты получаются перестановкой индексов.

2. Дисперсионные соотношения и принцип длинных волн. Будем искать решение системы (1.10) в случае, когда направление волнового вектора совпадает с одним из основных кристаллографических направлений. К таким направлениям относятся: направление [100],

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na} \mathbf{e}_x = K_x \mathbf{e}_x, \quad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2} = \frac{K_x a}{2}; \quad (2.1)$$

направление [110],

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) = K_x (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2\sqrt{2}} = \frac{K_x a}{2}; \quad (2.2)$$

направление [111],

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z) = K_x (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z), \quad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2\sqrt{3}} = \frac{K_x a}{2}. \quad (2.3)$$

Рассмотрим направление [100]. Обращаясь к формулам (1.11), (1.12) и учитывая (2.1), приходим к равенствам

$$a_x^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^1 s_h^2 = \sigma_1 + 4\sigma_{2r}^1 \sin^2 \frac{Ka}{2}, \quad a_x^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^2 s_h^2, \quad a_y^1 = a_z^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2t}^1 s_h^2,$$

$$a_y^2 = a_z^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2t}^2 s_h^2, \quad b = -8\sigma_1 c_h = -8\sigma_1 \cos \frac{Ka}{2}, \quad b_x = b_y = b_z = 0.$$

Из этих равенств следует, что система (1.10) распадается на три независимые подсистемы, одна из которых описывает продольные колебания, поляризованные вдоль оси Ox , а две другие, совпадающие между собой, – поперечные колебания, поляризованные вдоль других осей. Решая соответствующие характеристические уравнения, приходим к дисперсионным соотношениям

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 b^2}}{2\mu_1 \mu_2}, \quad (2.4)$$

$$\omega^2 = \frac{a_y^2 \mu_1 + a_y^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_y^2 \mu_1 - a_y^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 b^2}}{2\mu_1 \mu_2}, \quad (2.5)$$

Рассмотрим теперь направление [110]. Положим $\sigma_{rt}^1 = \sigma_{2r}^1 + \sigma_{2t}^1$, $\sigma_{rt}^2 = \sigma_{2r}^2 + \sigma_{2t}^2$. Тогда справедливы равенства

$$a_x^1 = a_y^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{rt}^1 s_h^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{rt}^1 \sin^2 \frac{Ka}{2}, \quad a_x^2 = a_y^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{rt}^2 s_h^2,$$

$$a_z^1 = 8\sigma_1 + 8\sigma_{2t}^1 s_h^2, \quad a_z^2 = 8\sigma_1 + 8\sigma_{2t}^2 s_h^2, \quad b = -8\sigma_1 c_h^2 = -8\sigma_1 \cos^2 \frac{Ka}{2},$$

$$b_x = b_y = 0, \quad b_z = 8\sigma_2 s_h^2.$$

Как нетрудно видеть, в этом случае система (1.10) распадается на две подсистемы, из которых одна описывает продольные и поперечные, поляризованные в плоскости Oxy , колебания, а другая – поперечные колебания, поляризованные вдоль оси Oz .

В случае поперечных волн, поляризованных вдоль оси Oz , получим

$$\omega^2 = \frac{a_z^2 \mu_1 + a_z^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_z^2 \mu_1 - a_z^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 b^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.6)$$

В случае продольных колебаний дисперсионное соотношение даётся равенством

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 (b + b_z)^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.7)$$

В случае же поперечных колебаний, поляризованных в плоскости Oxy , дисперсионное соотношение имеет вид

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 (b - b_z)^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.8)$$

Пусть теперь волновой вектор имеет направление $[111]$. Положим $\sigma_{r2t}^1 = \sigma_{2r}^1 + 2\sigma_{2t}^1$, $\sigma_{r2t}^2 = \sigma_{2r}^2 + 2\sigma_{2t}^2$. Тогда справедливы равенства

$$a_x^1 = a_y^1 = a_z^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{r2t}^1 s_h^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{r2t}^1 \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{3}}, \quad a_x^2 = a_y^2 = a_z^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{r2t}^2 s_h^2,$$

$$b = -8\sigma_1 c_h^3 = -8\sigma_1 \cos^3 \frac{Ka}{2\sqrt{3}}, \quad b_x = b_y = b_z = 8\sigma_2 c_h s_h^2.$$

Если колебательная мода имеет продольную поляризацию, то для неё закон дисперсии выражается соотношением

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 (b + 2b_x)^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.9)$$

В случае же поперечной поляризации справедливо равенство

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 (b - b_x)^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.10)$$

Рассматривая полученные дисперсионные соотношения, нетрудно обнаружить, что все они приводятся к виду

$$\omega^2 = \frac{A_1 \mu_1 + A_2 \mu_2}{2\mu_1 \mu_2} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1 \mu_2 (A_1 A_2 - B^2)}{(A_1 \mu_1 + A_2 \mu_2)^2}} \right],$$

где A_1, A_2, B – некоторые числа, определяемые коэффициентами системы (1.10). При этом знак (+) берется для оптических, а знак (–) – для акустических колебательных мод.

В континуальном приближении, когда выполняется условие $Ka \ll 1$, справедливо соотношение $A_1 A_2 - B^2 \ll 1$. Поэтому можно считать, что для акустических мод справедливо соотношение

$$\omega^2 = \frac{A_1 A_2 - B^2}{A_2 \mu_1 + A_1 \mu_2}. \quad (2.11)$$

Сравнивая соотношение (2.11) с дисперсионными соотношениями из теории упругости для основных кристаллографических направлений, приходим к равенствам

$$2\sigma_1 = aC_{44} - (\sigma_{2t}^1 + \sigma_{2t}^2), \quad 4\sigma_2 = a(C_{12} + C_{44}),$$

$$\sigma_{2r}^1 + \sigma_{2r}^2 = a(C_{11} - C_{44}) + \sigma_{2t}^1 + \sigma_{2t}^2. \quad (2.12)$$

В настоящей работе были проделаны расчёты дисперсионных кривых по приведённым выше формулам в сравнении с экспериментальными данными, полученными методом неупругого рассеяния нейтронов и представленными в работах [7; 8; 10] для кристаллов твердых растворов NiAl, CuZn и FeAl. Используя подобранные значения силовых констант, по формулам (2.12) были рассчитаны значения упругих констант рассматриваемых соединений. Следует отметить, что имеющиеся данные о значениях упругих констант для рассматриваемых веществ существенно отличаются друг от друга у разных авторов. Так, например, в работе [11] приводятся данные разных авторов по упругим константам для соединения FeAl, где разброс значений достигает 10 & – 30 %.

Ниже, в табл. 1 приведены используемые и полученные (для упругих констант) в настоящей работе данные. В табл. 2 приводятся аналогичные данные, взятые из работ [6; 9; 11]. На рис. 1, 2, 3 изображены дисперсионные кривые для указанных соединений в сравнении с экспериментальными данными, полученными методом неупругого рассеяния нейтронов и представленными в работах [7, 8, 10]. Во всех случаях q обозначает K_x и изменяется в пределах $0 \leq q \leq \pi/a$.

Таблица 1

	a, нм	C11, ГПа	C12, ГПа	C44, ГПа	m1, а.е.м.	m2, а.е.м.
NiAl	0,288	181	108	87	58,693	26,982
CuZn	0,294	108	88	64,5	63,546	65,39
FeAl	0,291	148	90	123,5	55,845	26,982

Таблица 2

	a, нм	C11, ГПа	C12, ГПа	C44, ГПа	m1, а.е.м.	m2, а.е.м.
NiAl	0,288	190,36	129,64	108	58,693	26,982
CuZn	0,294	133,6	103,8	74	63,546	65,39
FeAl	0,291	181	113	127	55,845	26,982

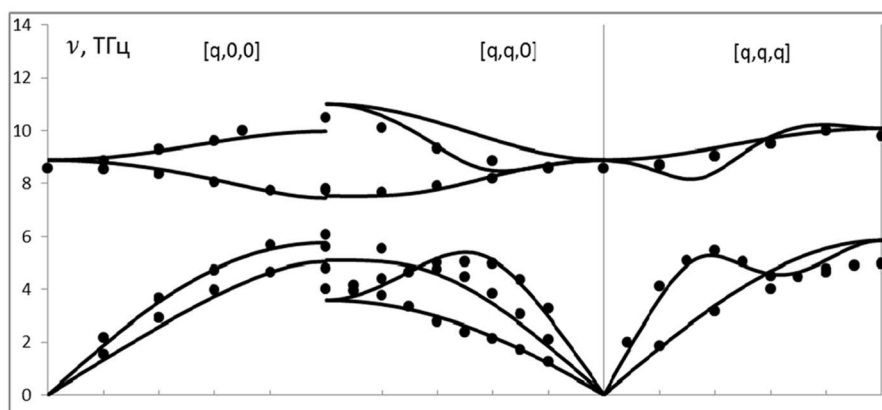


Рис. 1. Расчетные кривые дисперсии фононов в NiAl при 296°K. Кружками отмечены экспериментальные точки, взятые из [7]

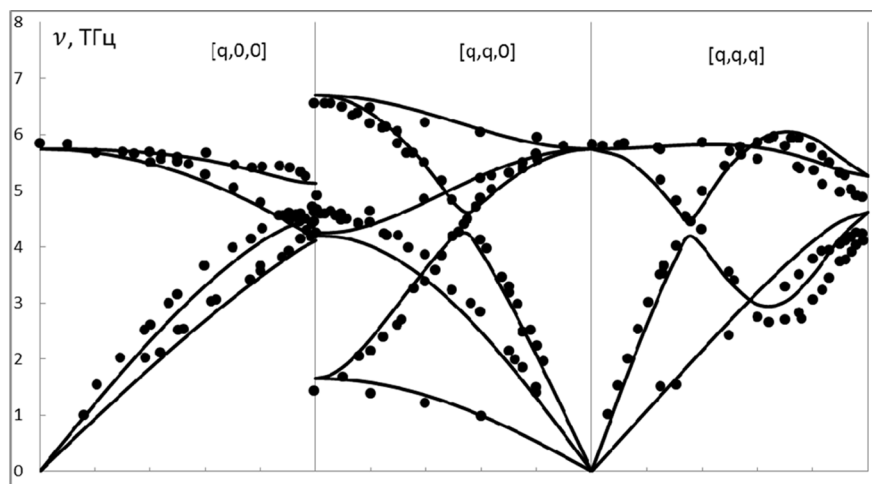


Рис. 2. Расчетные кривые дисперсии фононов в CuZn при 296° K.
Кружками отмечены экспериментальные точки, взятые из [8]

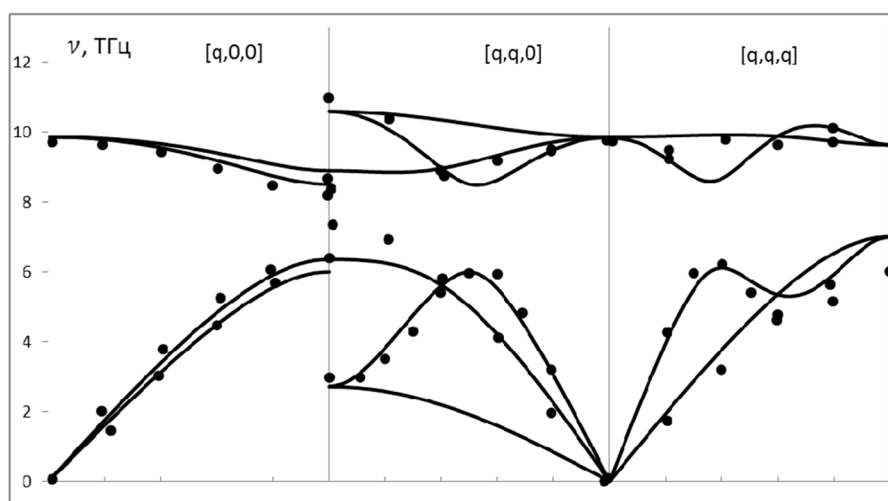


Рис. 3. Расчетные кривые дисперсии фононов в FeAl при 296° K.
Кружками отмечены экспериментальные точки, взятые из [10]

Список литературы

1. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е. А. Принцип длинных волн и дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решёток в модели диполь-дипольных взаимодействий // Известия СамНЦ РАН. Сер. «Физика и электроника». 2009. Том 11. № 5(31). С. 49–55.
2. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е. А. Дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решёток в модели диполь-дипольных взаимодействий // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Математика, физика, химия». 2009. Вып. 12. № 10(143). С. 92–99.
3. Холодовский В. Е., Мачихина И. О. Принцип длинных волн и фононные спектры кубических кристаллических решёток // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Математика. Механика. Физика». 2009. Вып.1. № 22. С. 109–116.
4. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е. А. Расчёт теплоёмкости и среднеквадратичных смещений по фононным спектрам для кристаллов с ОЦК и ГЦК решёткой // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Математика. Механика. Физика». 2010. Вып. 2. № 9. С. 101–109.

5. Мачихина И. О. Холодовский В. Е. Расчёт теплофизических свойств кристаллов инертных газов по упругим константам // Известия СамНЦ РАН. Т. 14. № 4. 2012. С. 116–120.
6. Rusovic N., Warlimont H. The Elastic Behaviour of β_2 -NiAl Allaus // Phys. Stat. Sol. 1977. vol. 44. iss. 2. P. 609–619.
7. Mostolle M., Nicklow R. M., Zehner D. M., Lui S.-C., Mundenar J. M., Plummer. E. W. Bulk and surface vibrational modes in NiAl // Phys. Rev. B, 1989, volume 40, issue 5, pp. 2856–2872.
8. Gilat G., Dolling G.. Normal Vibrations of β Brass // Phys. Rev., 1965, volume 138, issue 4A. P. A1053–A1065.
9. McManus G.M. Elastic Properties of β -CuZn // Phys. Rev. 1963. vol. 129, iss. 5. P. 2004–2007.
10. Meyer B., Schott V., Fahnle M.. Phonon spectrum of B2-FeAl: Ab initio calculation and comparison with data from inelastic neutron scattering // Phys. Rev. B 1998, volume 58, issue 22. P. 674–676.
11. Yifang Ouyang, Xiaofeng Tong, ChangLi, HongmeiChen, XiaomaTao, Tilmann Hickel, YongDuc. Thermodynamic and physical properties of FeAl and Fe3Al: an atomistic study by EAM simulation // Physica B 407 (2012) pp, 4530–4536.

References

1. Kholodovsky V. Ye., Machikhin I. O., Kulchenkov Ye. A. Printsip dlinnykh voln i dispersionnye sootnosheniya dlya kubicheskikh kristallicheskikh reshyotok v modeli dipol-dipolnykh vzaimodeystvy // Izvestiya SamNTs RAN. Ser. «Fizika i elektronika». 2009. T. 11. № 5(31). S. 49–55.
2. Kholodovsky V. Ye., Machikhina I. O., Kulchenkova Ye. A. Dispersionnye sootnosheniya dlya kubicheskikh kristallicheskikh reshyotok v modeli dipol-dipolnykh vzaimodeystvy // Vestnik YuUrGU. Ser. «Matemtaika, fizika, khimiya». 2009. Vyp. 12. № 10(143). S. 92–99.
3. Kholodovsky V. Ye., Machikhina I. O. Printsip dlinnykh voln i fononnye spektry kubicheskikh kristallicheskikh reshyotok // Vestnik YuUrGU. Ser. «Matematika. Mekhanika. Fizika». 2009. Vyp. № 22. S. 109–116.
4. Kholodovsky V. Ye., Machikhina I. O. Kulchenkov Ye. A. Raschyot teployomkosti i srednekvadraticnykh smeshcheny po fonovym spektram dlya kristallov s OTsK i GTsK reshyotkoy // Vestnik YuUrGU. Ser. «Matemtaika. Mekhanika. Fizika». 2010. Vyp. 2. № 9. S. 101–109.
5. Machikhina I. O., Kholodovsky V. Ye. Raschyot teplofizicheskikh svoystv kristallov inertnykh gazov po uprugim konstantam // Izvestiya SamNTs RAN. T. 14. № 4. 2012. S. 116–120.
6. Rusovic N., Warlimont H. The Elastic Behaviour of β_2 -NiAl Allaus // Phys. Stat. Sol. 1977. vol. 44. iss. 2. P. 609–619.
7. Mostolle M., Nicklow R. M., Zehner D. M., Lui S.-C., Mundenar J. M., Plummer. E. W. Bulk and surface vibrational modes in NiAl // Phys. Rev. B, 1989, volume 40, issue 5, pp. 2856–2872.
8. Gilat G., Dolling G.. Normal Vibrations of β Brass // Phys. Rev., 1965, volume 138, issue 4A. P. A1053–A1065.
9. McManus G.M. Elastic Properties of β -CuZn // Phys. Rev. 1963. vol. 129, iss. 5. P. 2004–2007.
10. Meyer B., Schott V., Fahnle M.. Phonon spectrum of B2-FeAl: Ab initio calculation and comparison with data from inelastic neutron scattering // Phys. Rev. B 1998, volume 58, issue 22, pp.674–676.

11. Yifang Ouyang, Xiaofeng Tong, ChangLi, HongmeiChen, XiaomaTao, Tilmann Hickel, YongDuc. Thermodynamic and physical properties of FeAl and Fe₃Al: an atomistic study by EAM simulation // Physica B 407 (2012) P. 4530–4536.

Статья поступила в редакцию 10.04.2013

УДК 519.63
ББК В192.1

Святослав Евгеньевич Холодовский
доктор физико-математических наук,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: hol47@yandex.ru

Решение задачи о движении неограниченной разрывной струны (стержня) с упругим контактом¹

Рассмотрена задача Коши о движении неограниченной струны (стержня), состоящей из двух кусков, концы которых соединены упругой прокладкой типа пружинки. Методом свёртывания разложений Фурье решение задачи выражено через решение классической задачи Коши при сохранении начальных функций. Приведён пример решения задачи в конечном виде, для которого построены графики струны в окрестности упругого контакта с постоянным шагом по времени.

Ключевые слова: составная струна, составной стержень, волновое уравнение, упругий контакт, метод свёртывания разложений Фурье.

Svyatoslav Evgen'evich Kholodovskiy
Doctor of Physics and Mathematics,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: hol47@yandex.ru

Solution of the Problem of the Motion of Unbounded Breaking String (a Rod) with an Elastic Contact

The paper considers the Cauchy problem of the motion of an unbounded string (a rod), consisting of two pieces, the ends of which are connected by an elastic gasket type of spring. Using the method of convolution of Fourier expansions, the problem solution is expressed in terms of the classical solution of the Cauchy problem maintaining the initial functions. The paper gives an example of the problem solution in a closed form for which the graphs in the vicinity of the elastic contact with a constant time step are drawn.

Keywords: compound string, compound rod, wave equation, elastic contact, method of convolution of Fourier expansions.

При решении задач о движении струн с точечными возмущениями, как правило, применяются методы рядов Фурье, преобразований Фурье, численное моделирование [1–5]. При этом основная проблема заключается в нахождении спектра собственных частот. В данной работе рассматривается нестандартный подход к решению задачи о движении составной струны с упругим контактом составляющих частей струны. Поскольку метод свёртывания разложений Фурье непосредственно к решению рассматриваемой задачи неприменим, то для вывода общих формул решается вспомогательная задача, допускающая применение указанного метода. Далее доказывается, что полученные общие формулы также дают решение задачи о составной струне с упругим контактом.

1. Вывод общих формул. Рассмотрим сначала задачу для оператора Лапласа на плоскости с декартовыми координатами x, y вида

$$\Delta u_1 = 0, \quad x < 0; \quad \Delta u_2 = H(x, y), \quad x > 0; \quad (1)$$

$$x = 0 : \quad \gamma(u_2 - u_1) = \partial_x u_1, \quad \partial_x u_2 = \partial_x u_1, \quad (2)$$

где $\partial_x^n = \partial^n / \partial x^n$, $\gamma = \text{const} > 0$, $H(x, y)$ – заданная непрерывная функция. Условия сопряжения (2) в данной задаче соответствуют наличию слабопроницаемой плёнки $x = 0$ [1; 6–8] (для волнового уравнения условия (2) соответствуют наличию упругого контакта).

¹Работа выполнена в рамках Государственного задания вузу Минобрнауки РФ (код проекта 1.3985.2011).

Методом свёртывания разложений Фурье [6, 7] выразим решение этой задачи через решение аналогичной классической задачи на всей плоскости x, y без условий сопряжения:

$$\Delta f = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ H(x, y), & x > 0 \end{cases} \quad (3)$$

при соответствующем условии на бесконечности, обеспечивающем корректность задачи (3). В частности, функция $f(x, y)$ является гармонической функцией, имеющей особые точки при $x > 0$.

Далее при выводе общих формул учитывается возможность применения метода Фурье к задачам (1), (2) и (3) по переменной y (вдоль плёнки $x = 0$), т.е. возможность разложений Фурье заданных функций, как функций от переменной y .

Предположим, что функция $f(0, y)$ разлагается в интеграл Фурье с коэффициентами Фурье $f_i(\lambda)$, т. е.

$$f(0, y) = \int_0^{\infty} g(y, \lambda) d\lambda, \quad g(y, \lambda) = f_1(\lambda) \sin \lambda y + f_2(\lambda) \cos \lambda y. \quad (4)$$

Тогда для функции $f(x, y)$ при $x < 0$ (где $\Delta f = 0$ (3)) получим разложение

$$f(x, y) = \int_0^{\infty} e^{\lambda x} g(y, \lambda) d\lambda, \quad x \leq 0. \quad (5)$$

Отсюда, представляя решение задачи (1), (2) в виде

$$u_1(x, y) = \int_0^{\infty} a_1 e^{\lambda x} g d\lambda, \quad x < 0, \quad (6)$$

$$u_2(x, y) = f(x, y) + \int_0^{\infty} a_2 e^{-\lambda x} g d\lambda, \quad x > 0, \quad (7)$$

из условий сопряжения (2) находим

$$a_1 = \frac{\gamma}{\lambda + \gamma}, \quad a_2 = 1 - \frac{\gamma}{\lambda + \gamma}.$$

При этом функции (6), (7) с учетом разложения (5) примут вид

$$u_1 = \gamma \int_0^{\infty} \frac{e^{\lambda x} g(y, \lambda)}{\lambda + \gamma} d\lambda, \quad x < 0, \quad (8)$$

$$u_2 = f(x, y) + f(-x, y) - \gamma \int_0^{\infty} \frac{e^{-\lambda x} g(y, \lambda)}{\lambda + \gamma} d\lambda, \quad x > 0, \quad (9)$$

где функция $g(y, \lambda)$ равна (4). Из разложения (5) следует формула

$$\int_0^{\infty} e^{-\gamma z} f(x - z, y) dz = \int_0^{\infty} \frac{e^{\lambda x} g(y, \lambda)}{\lambda + \gamma} d\lambda, \quad x \leq 0, \quad \gamma > 0.$$

Отсюда решение (8), (9) задачи (1), (2) выражается непосредственно через решение $f(x, y)$ классической задачи (3) без разложений Фурье:

$$u_1 = \gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma z} f(x - z, y) dz, \quad x < 0. \quad (10)$$

$$u_2 = f(x, y) + f(-x, y) - \gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma z} f(-x - z, y) dz, \quad x > 0. \quad (11)$$

Интегралы (10), (11) сходятся для любой функции $f(x, y)$, удовлетворяющей на бесконечности условию

$$|f(x, y)| < ce^{\alpha|x|}, \quad x \rightarrow -\infty, \quad \alpha < \gamma.$$

При этом функции $u_i(x, y)$ (10), (11) тождественно удовлетворяют условиям сопряжения (2) для любой дифференцируемой функции $f(x, y)$.

Формулы (10), (11) представляют собой операторы, действующие на функцию $f(x, y)$ по одной переменной x (переменная y является параметром). Отсюда для функций $u_i(x, y)$ и $f(x, y)$ по свободной переменной y можно изменить уравнение и задать дополнительные краевые условия.

2. Решение задачи о струне. Рассмотрим для функций $u_i(x, t)$ краевую задачу на прямой $-\infty < x < \infty$ с условиями сопряжения (2):

$$\partial_x^2 u_1 - \partial_t^2 u_1 = 0, \quad u_1|_{t=0} = 0, \quad \partial_t u_1|_{t=0} = 0, \quad x < 0, \quad (12)$$

$$\partial_x^2 u_2 - \partial_t^2 u_2 = 0, \quad u_2|_{t=0} = \varphi(x), \quad \partial_t u_2|_{t=0} = \psi(x), \quad x > 0, \quad (13)$$

$$x = 0: \quad \gamma(u_2 - u_1) = \partial_x u_1, \quad \partial_x u_2 = \partial_x u_1, \quad (14)$$

где $0 \leq t < \infty$ – время,

$$\gamma = \frac{B}{k}. \quad (15)$$

Условия данной задачи однородны при $x < 0$, что не умаляет общности, т.к. задача с однородными условиями при $x > 0$ (и неоднородными при $x < 0$) решается аналогично, а в общем случае неоднородных условий при $-\infty < x < \infty$ решение задачи имеет вид суммы решений указанных задач.

Задача (12)–(14) описывает движение неограниченной струны или стержня, состоящего из двух кусков $x < 0$ и $x > 0$ при их упругом контакте, когда куски струны (стержня) в точке $x = 0$ соединены пружинкой с жёсткостью B , т.е. в точке $x = 0$ действует сила натяжения, пропорциональная смещению $k\partial_x u_1 = B(u_2 - u_1)$ [1, 8]. Далее в силу большей наглядности рассматривается струна.

Решение задачи (12)–(14) строится по общим формулам (10), (11), что проверяется непосредственно, т. е.

$$u_1(x, t) = \gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma z} f(x - z, t) dz, \quad x < 0, \quad (16)$$

$$u_2(x, t) = f(x, t) + f(-x, t) - \gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma z} f(-x - z, t) dz, \quad x > 0, \quad (17)$$

где $f(x, t)$ – решение классической задачи Коши

$$\partial_x^2 f - \partial_t^2 f = 0, \quad -\infty < x < \infty, \quad (18)$$

$$f|_{t=0} = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \varphi(x), & x > 0 \end{cases}, \quad \partial_t f|_{t=0} = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \psi(x), & x > 0 \end{cases}, \quad (19)$$

при этом функция $f(x, t)$ выражается по формуле Даламбера [1; 8]. Для широкого класса начальных функций $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ функции $u_i(x, t)$ строятся в конечном виде (16), (17).

Отметим, что указанный выше вывод формул (16), (17) для решения задачи (12)–(14) невозможен, т.к. к задачам (12)–(14) и (18), (19) метод Фурье в указанном выше смысле неприменим.

Из формул (16), (17) в предельном случае $B \rightarrow 0$ ($\gamma \rightarrow 0$ (15)), когда сила возврата пружинки бесконечно мала, находим $u_1 = 0$, $u_2 = f(x, t) + f(-x, t)$, что соответствует классическому случаю движения полуграниченной струны $0 < x < \infty$ со свободным концом $x = 0$ (без пружинки). При $B \rightarrow \infty$, когда сила возврата пружинки бесконечно большая, из формул (16), (17) с помощью интегрирования по частям получим $u_1 = u_2 = f(x, t)$, что соответствует классическому случаю движения неограниченной непрерывной струны. Сказанное имеет очевидное физическое обоснование.

Рассмотрим задачу (12)–(14) для начальных функций вида

$$\varphi(x) = \begin{cases} 2h(x), & x \in (a, b) \\ 0, & x \notin (a, b) \end{cases}, \quad \psi(x) = 0, \quad (20)$$

где $a > 0$, $h(x) \geq 0$, $h(a) = h(b) = 0$. Отсюда решение задачи (12)–(14) строится по формулам (16), (17), где функция $f(x, t)$ в точках, в которых она отлична от нуля, имеет вид

$$f(x, t) = \begin{cases} h(x+t), & a-t < x < b-t \\ h(x-t), & a+t < x < b+t \end{cases}. \quad (21)$$

Пусть для момента времени $t = a$, когда обратная волна $h(x+t)$ доходит до точки $x = 0$, носители этой волны и прямой волны $h(x-t)$ не пересекаются, т.е. $3a > b$. Выражение для функции u_2 (17), (21) содержит в качестве слагаемого прямую волну $h(x-t)$ при $a+t < x < b+t$, которая движется вправо и не пересекает точку $x = 0$. Далее рассматривается движение струны в окрестности точки $x = 0$, при этом слагаемое $h(x-t)$ в u_2 будем опускать. Отсюда функции $u_i(x, y) \neq 0$ (16), (17) с учетом (21) примут вид

$$u_1(x, t) = \gamma e^{-\gamma(x+t)} \int_a^{x+t} e^{\gamma z} h(z) dz, \quad x < 0, \quad (22)$$

$$u_2(x, t) = h(x+t) + h(t-x) - \gamma e^{-\gamma(t-x)} \int_a^{t-x} e^{\gamma z} h(z) dz, \quad x > 0. \quad (23)$$

При $0 < t < a$, когда обратная волна $h(x+t)$ не доходит до точки $x = 0$, получим $u_1 = 0$, $u_2 = h(x+t)$.

При $a < t < (a+b)/2$, $(a+b)/2 < t < b$, $t > b$ функции u_i (22), (23) в точках, в которых они отличны от нуля, приводятся соответственно к виду

$$u_1 = \Phi(x+t), \quad a-t < x < 0, \quad u_2 = \begin{cases} h(x+t) + Q(x, t), & 0 < x < t-a \\ h(x+t), & t-a < x < b-t \end{cases}; \quad (24)$$

$$u_1 = \Phi(x+t), \quad a-t < x < 0, \quad u_2 = \begin{cases} h(x+t) + Q(x, t), & 0 < x < b-t \\ Q(x, t), & b-t < x < t-a \end{cases}; \quad (25)$$

$$u_1 = \begin{cases} \Phi(x+t), & a-t < x < b-t \\ e^{-\gamma(x+t)}c, & b-t < x < 0 \end{cases}, \quad u_2 = \begin{cases} -e^{\gamma(x-t)}c, & 0 < x < t-b \\ Q(x,t), & t-b < x < t-a \end{cases}, \quad (26)$$

где $h(x)$ – заданная функция, $Q(x,t) = h(t-x) - \Phi(t-x)$,

$$\Phi(x) = \gamma e^{-\gamma x} \int_a^x e^{\gamma z} h(z) dz, \quad c = \gamma \int_a^b e^{\gamma z} h(z) dz. \quad (27)$$

Отсюда законы движения концов струны $x = \pm 0$ имеют вид

$$u_1(0,t) = \begin{cases} 0, & 0 < t < a \\ \Phi(t), & a < t < b \\ e^{-\gamma t}c, & t > b \end{cases}, \quad u_2(0,t) = \begin{cases} 0, & 0 < t < a \\ 2h(t) - \Phi(t), & a < t < b \\ -e^{-\gamma t}c, & t > b \end{cases}.$$

Отметим, что функция $u_1(0,t)$ является гладкой.

В качестве примера рассмотрим начальную функцию $h(x) = \sin x$ (20) при $2\pi < x < 3\pi$ ($a = 2\pi$, $b = 3\pi$), $\gamma = 1$, т. е. на упругий контакт $x = 0$ справа набегают волна в виде синусоиды. Отсюда решение задачи (12)–(14), (20) строится в конечном виде по формулам (24)–(26), где (27)

$$\Phi(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{1}{2}e^{2\pi-x}, \quad c = \frac{e^{3\pi} + e^{2\pi}}{2}.$$

На рис.1 приведены графики движения концов струны в точке разрыва при $x = \pm 0$ в моменты времени $6\pi < t < 13\pi$ (когда обратная волна подходит к точке $x = 0$ при $t = 2\pi$), где сплошная линия является графиком функции $u_2(+0,t)$, а пунктирная – графиком функции $u_1(-0,t)$.

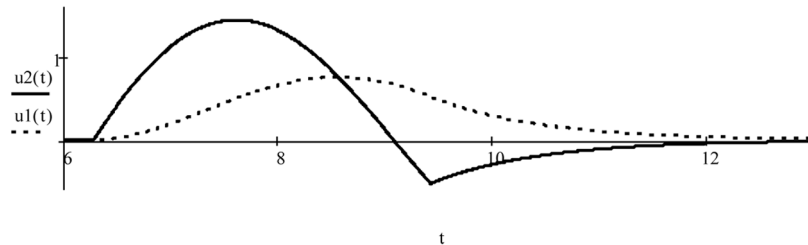
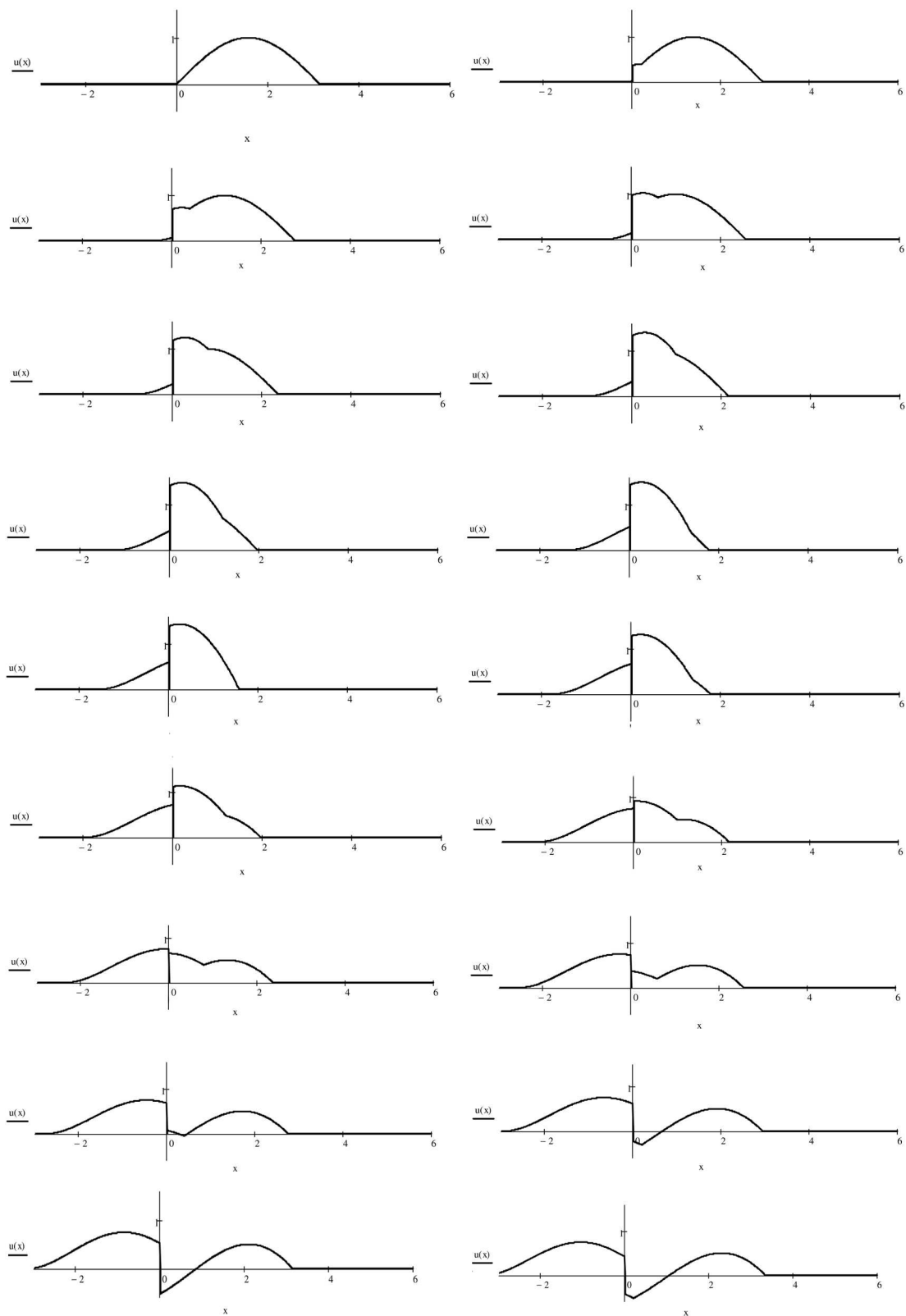
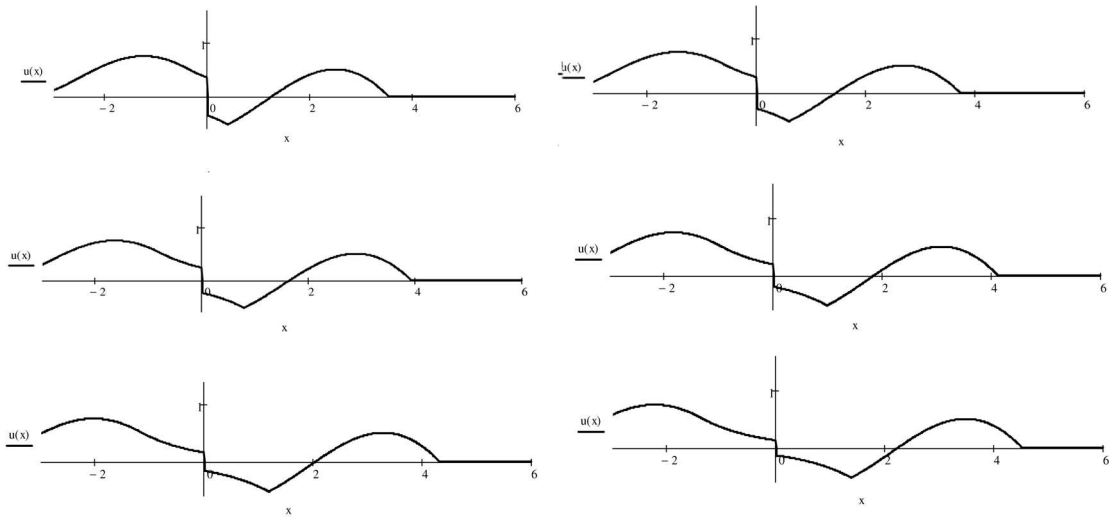


Рис. 1

Ниже приведены графики струны в моменты времени от $t = 2\pi$ до $t = \frac{13}{4}\pi$ с шагом $\Delta t = \frac{1}{16}\pi$.





Список литературы

1. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972.
2. Белоцерковский П. М. Неустановившиеся колебания бесконечной струны, несущей сосредоточенную массу и поддерживаемой упруговязкими подвесками // Прикладная математика и механика. 2011. Т. 75. № 5. С. 791–812.
3. Культербаев Х. П., Исламова О. В. Математическая модель колебаний подвешенной струны с сосредоточенной массой // Изв. высш. учеб. завед. «Северо-Кавказский регион». Технические науки. 2007. № 4. С. 41–46.
4. Миловидов А.-Е., Шаров Г.-С. Проблема устойчивости для замкнутой релятивистской струны с точечной массой // Вестник Тверского ГУ. Серия: Физика. 2005. № 9 (15). Вып. 2. С. 114–123.
5. Кац И. С. Описание множества спектральных функций регулярной струны, несущей сосредоточенную массу на конце, свободном от граничных условий // Известия вузов. Математика. 1974. № 7. С. 27–33.
6. Холодовский С. Е. Метод свертывания разложений Фурье в решении краевых задач с пересекающимися линиями сопряжения // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2007. Т. 47. № 9. С. 1550–1556.
7. Холодовский С. Е. Метод свертывания разложений Фурье. Случай обобщенных условий сопряжения типа трещины (завесы) в кусочно-неоднородных средах // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45. № 6. С. 855–859.
8. Арсенин В. Я. Методы математической физики и специальные функции. М.: Наука, 1974.

References

1. Tikhonov A. N., Samarsky A. A. Uravneniya matematicheskoy fiziki. M.: Nauka, 1972.
2. Belotserkovsky P. M. Neustanovivshiyesya kolebaniya beskonechnoy struny, nesushchey sosredotochennuyu massu i podderzhivayemoy uprugovyazkimi podveskami // Prikladnaya matematika i mekhanika. 2011. T. 75. № 5. S. 791–812.
3. Kulterbayev Kh. P., Islamova O. V. Matematicheskaya model kolebaniya podveshennoy struny s sosredotochennoy massoy // Izv. vyssh. ucheb. zaved. «Severokavkazsky region». Tekhnicheskkiye nauki. 2007. № 4. S. 41–46.

4. Milovidov A. Ye., Sharov G. S. Problema ustoychivosti dlya zamknutoy relyativistskoy struny s tochechnoy massoy // Vestnik Tverskogo GU. Seriya. Fizika. 2005. № 9(15). Vyp. 2. S. 114–123.
5. Kats I. S. Opisaniye mnozhestva spektralnykh funktsiy regulyarnoy struny, nesushchey sosredotochennuyu massu na kontse, svobodnom ot granichnykh uslovy // Izvestiya vuzov. Matematika. 1974. № 7. S. 27–33.
6. Kholodovsky S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furiye s resheniyem krayevykh zadach s peresekayushchimisya liniyami. // Zhurnal vychislitelnoy matematiki i matematicheskoy fiziki. 2007. T. 47. № 9. S. 1550–1556.
7. Kholodovsky S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furiye. Sluchay obobshchennykh uslovy sopryazheniya tipa treshchiny (zavesy) v kusochno-neodnorodnykh sredakh // Differentsialnye uravneniya. 2009. T. 45. № 6. S. 855–859.
8. Arsenine V. Ya. Metody matematicheskoy fiziki i spetsialnykh funktsii. M.: Nauka, 1974.

Статья поступила в редакцию 15.03.2013

УДК 517.982.43
ББК В161.911

Святослав Евгеньевич Холодовский
доктор физико-математических наук,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: hol47@yandex.ru
Алексей Олегович Потехо
кандидат физико-математических наук,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: potehao@rambler.ru

Решение краевой задачи о движении полуограниченной струны с граничным условием третьего рода ¹

Рассмотрена краевая задача о движении полуограниченной струны со свободным концом, на который действует упругая сила, пропорциональная смещению (типа пружинки). С помощью метода свёртывания разложений Фурье решение задачи выражено в явном виде через решение классической задачи Коши для неограниченной струны. В предельных случаях из полученных решений следуют решения классических задач для полуограниченной струны со свободным и закрепленным концом.

Ключевые слова: полуограниченная струна, волновое уравнение, упругий контакт, метод свёртывания разложений Фурье.

Svyatoslav Evgen'evich Kholodovskiy
Doctor of Physics and Mathematics,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: hol47@yandex.ru
Aleksey Olegovich Potekho
Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: potehao@rambler.ru

Solution of a Boundary Value Problem on Semi-Bounded String Motion with the Boundary Condition of the Third Kind

The paper considers the boundary problem of motion of semi-bounded string with the free end operated by an elastic force, which is proportional to the displacement of the spring type. With the help of the method of convolution of Fourier expansions, solution of the problem is expressed in explicit form by means of the classical Cauchy problem solution for an unbounded string. In limiting cases, the obtained solutions result in the solutions of classical problems for semi-bounded strings with a free and a fixed end point.

Keywords: semi-bounded string, wave equation, elastic contact, method of convolution of Fourier expansions.

В работе рассматривается задача о движении полуограниченной струны в виде луча $0 < x < \infty$ с граничным условием третьего рода, что соответствует упругому контакту на конце струны $x = 0$. Решение данной задачи выражено через решение классической задачи Коши. Для вывода общих формул сначала рассматривается вспомогательная задача, допускающая применение метода свёртывания разложений Фурье. При этом полученная формула даёт решение целого класса краевых задач с граничными условиями третьего рода. В частности решение исходной задачи о струне также строится по выведенной формуле. Отметим, что непосредственно метод свёртывания разложений Фурье к исходной задаче о струне неприменим.

Рассмотрим вспомогательную третью краевую задачу в полуплоскости $x \geq 0$ вида

$$\Delta u = H(x, y), \quad \partial_x u - \gamma u|_{x=0} = 0, \quad (1)$$

¹Работа выполнена в рамках Усударственного задания вузу Минобрнауки РФ (код проекта 1.3985.2011).

где $\partial_x^n = \partial^n / \partial x^n$, Δ – оператор Лапласа, $\gamma = \text{const} > 0$, $H(x, y)$ – заданная непрерывная функция; x, y – декартовы координаты. Наряду с этой задачей рассмотрим на всей плоскости x, y классическую задачу

$$\Delta f = \begin{cases} H(x, y), & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad (2)$$

при соответствующем условии на ∞ , обеспечивающем корректность задачи (2). В частности, $f(x, y)$ является гармонической функцией, особые точки которой расположены в полуплоскости $x > 0$.

С помощью метода свёртывания разложений Фурье [1; 2] выразим решение задачи (1) через решение $f(x, y)$ классической задачи (2).

Пусть функция $f(0, y)$ разлагается в интеграл Фурье:

$$f(0, y) = \int_0^{\infty} g(y, \lambda) d\lambda, \quad g(y, \lambda) = f_1(\lambda) \sin \lambda y + f_2(\lambda) \cos \lambda y, \quad (3)$$

где

$$f_{(1/2)}(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(0, y) \begin{pmatrix} \sin \lambda y \\ \cos \lambda y \end{pmatrix} dy.$$

Отсюда функция $f(x, y)$ при $x < 0$, где она удовлетворяет уравнению Лапласа (2), представима в виде

$$f(x, y) = \int_0^{\infty} e^{\lambda x} g(y, \lambda) d\lambda, \quad x \leq 0. \quad (4)$$

Последняя формула выражает решение задачи Дирихле в полуплоскости $x < 0$ вида $\Delta v = 0$, $v|_{x=0} = f(0, y)$, полученное методом Фурье. Представляя решение задачи (1) в виде

$$u(x, y) = f(x, y) + \int_0^{\infty} a e^{-\lambda x} g d\lambda, \quad x \geq 0, \quad (5)$$

из граничного условия (1) получим

$$a(\lambda) = 1 - \frac{2\gamma}{\lambda + \gamma}.$$

Отсюда функция (5) с учётом (4) примет вид

$$u = f(x, y) + f(-x, y) - 2\gamma \int_0^{\infty} \frac{e^{-\lambda x} g(y, \lambda)}{\lambda + \gamma} d\lambda, \quad x \geq 0, \quad (6)$$

где функция $g(y, \lambda)$ определена в (3). Из разложения (4) следует формула [1; 2]:

$$\int_0^{\infty} e^{-\gamma z} f(x - z, y) dz = \int_0^{\infty} \frac{e^{\lambda x} g(y, \lambda)}{\lambda + \gamma} d\lambda, \quad x \leq 0, \quad \gamma > 0.$$

Отсюда решение (6) задачи (1) выражается непосредственно через решение классической задачи (2) без разложений Фурье:

$$u(x, y) = f(x, y) + f(-x, y) - 2\gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma z} f(-x - z, y) dz, \quad x \geq 0. \quad (7)$$

Интеграл (7) сходится для широкого класса функций $f(x, y)$, удовлетворяющих условию

$$|f(x, y)| < O(e^{\alpha|x|}), \quad x \rightarrow -\infty, \quad \alpha < \gamma.$$

Отметим, что выражение справа (7) является оператором, действующим на функцию $f(x, y)$ по одной переменной x (переменная y остаётся свободной). При этом функция $u(x, y)$ тождественно удовлетворяет граничному условию (1) для любой дифференцируемой функции $f(x, y)$. Отсюда по переменной y для функций $u(x, y)$ и $f(x, y)$ можно изменить уравнение и задать дополнительные краевые условия.

Рассмотрим для функции $u(x, t)$ краевую задачу на луче $0 < x < \infty$ для волнового уравнения с сохранением граничного условия (1):

$$\partial_x^2 u - \partial_t^2 u = H(x, t), \quad u|_{t=0} = \varphi(x), \quad \partial_t u|_{t=0} = \psi(x), \quad (8)$$

$$\partial_x u - \gamma u|_{x=0} = 0, \quad (9)$$

где

$$\gamma = \frac{B}{k} = \text{const} > 0, \quad (10)$$

$H(x, t)$, $\varphi(x)$, $\psi(x)$ – заданные непрерывные функции, $t \geq 0$ – время. Задача (8), (9) описывает движение полуограниченной струны со свободным концом при упругом контакте, т.е. на конце $x = 0$ имеет место пружинка с жёсткостью B . При этом в точке $x = 0$ (на левом конце) действует сила натяжения, пропорциональная смещению $k\partial_x u = Bu$ [3].

Непосредственно проверяется, что решение задачи (8), (9) строится по формуле (7):

$$u(x, t) = f(x, t) + f(-x, t) - 2\gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma z} f(-x - z, t) dz, \quad x \geq 0, \quad (11)$$

где $f(x, t)$ – решение классической задачи Коши при $-\infty < x < \infty$ вида

$$\partial_x^2 f - \partial_t^2 f = \begin{cases} H(x, t), & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases},$$

$$f|_{t=0} = \begin{cases} \varphi(x), & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}, \quad \partial_t f|_{t=0} = \begin{cases} \psi(x), & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}.$$

Из формулы (11) в предельном случае $B \rightarrow 0$ (10), когда сила возврата пружинки бесконечно мала, находим $u = f(x, t) + f(-x, t)$, что соответствует классическому случаю свободного конца $x = 0$ для полуограниченной струны без пружинки. В случае $B \rightarrow \infty$, когда сила возврата пружинки бесконечно большая, из формулы (11) с помощью интегрирования по частям получим $u = f(x, t) - f(-x, t)$, что соответствует движению полуограниченной струны с неподвижным концом $x = 0$.

В качестве примера рассмотрим задачу (8), (9) для заданных функций вида

$$H(x, t) = 0, \quad \varphi(x) = \begin{cases} 2h(x), & x \in (a, b) \\ 0, & x \notin (a, b) \end{cases}, \quad \psi(x) = 0, \quad (12)$$

где $a > 0$, $3a > b$, $h(x) \geq 0$, $h(a) = h(b) = 0$. Отсюда решение задачи (8), (9) строится по формуле (11), где функция $f(x, t)$ определяется формулой Даламбера [3]:

$$f(x, t) = \begin{cases} h(x+t), & a-t < x < b-t \\ h(x-t), & a+t < x < b+t \end{cases}, \quad (13)$$

$f(x, t) = 0$ в остальных точках x .

Для моментов времени $0 < t < a$, когда обратная волна $h(x+t)$ не доходит до точки $x = 0$, из формулы (11) следует $u = f(x, t)$, где $f(x, t)$ имеет вид (13). Далее рассматривается движение струны в окрестности конца $x = 0$, при этом слагаемое $h(x-t)$, характеризующее прямую волну, которая уходит вправо и не пересекает точку $x = 0$, будем опускать.

Для моментов времени $a < t < (a+b)/2$, $(a+b)/2 < t < b$, $t > b$ функция $u(x, t)$ (11), (13) имеет соответственно вид

$$u = \begin{cases} h(x+t) + h(t-x) - \Phi(t-x), & 0 < x < t-a \\ h(x+t), & t-a < x < b-t \end{cases}; \quad (14)$$

$$u = \begin{cases} h(x+t) + h(t-x) - \Phi(t-x), & 0 < x < b-t \\ h(t-x) - \Phi(t-x), & b-t < x < t-a \end{cases}; \quad (15)$$

$$u = \begin{cases} -e^{\gamma(x-t)}c, & 0 < x < t-b \\ h(t-x) - \Phi(t-x), & t-b < x < t-a \end{cases}, \quad (16)$$

где

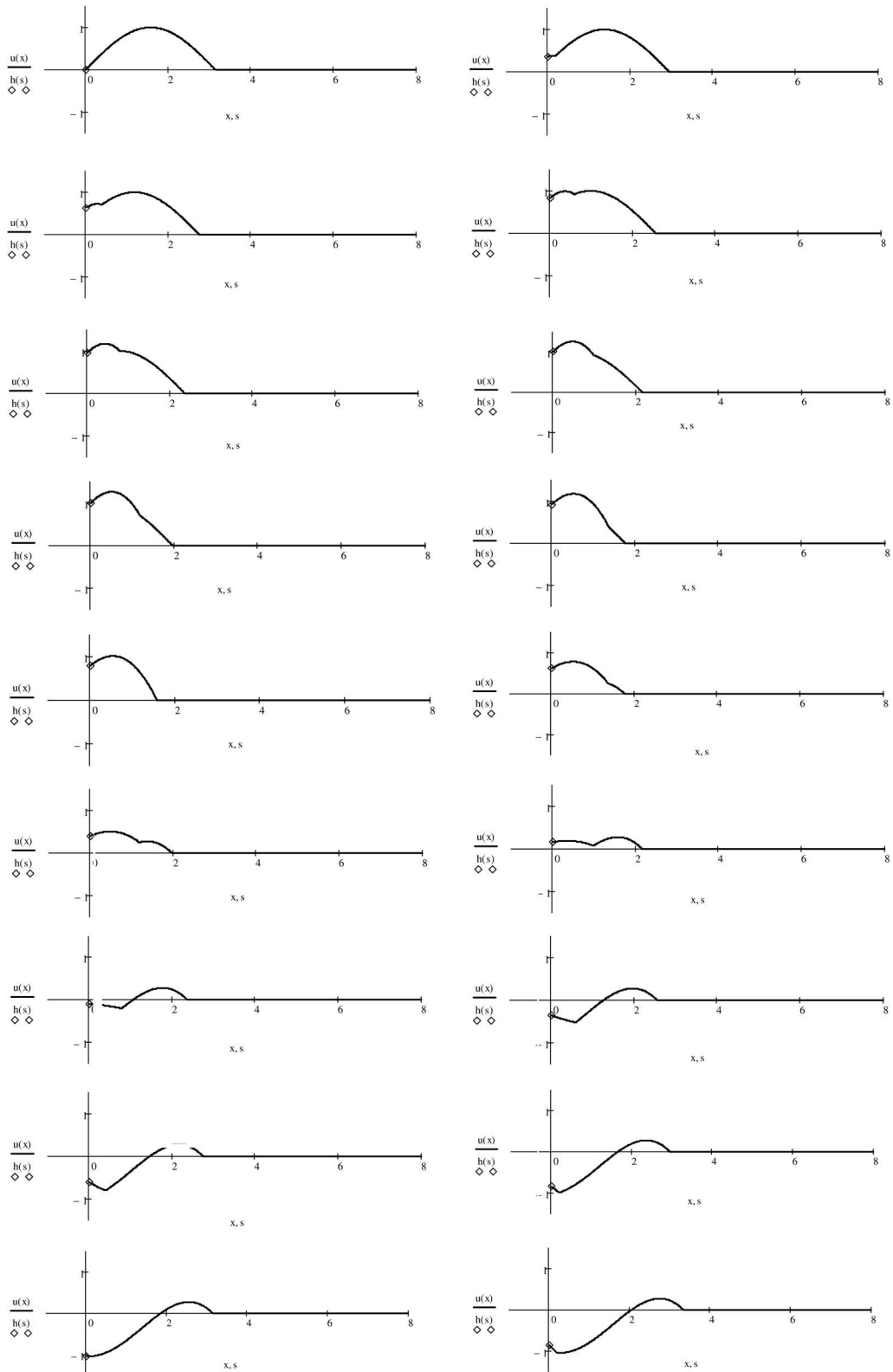
$$\Phi(x) = 2\gamma e^{-\gamma x} \int_a^x e^{\gamma z} h(z) dz, \quad c = 2\gamma \int_a^b e^{\gamma z} h(z) dz. \quad (17)$$

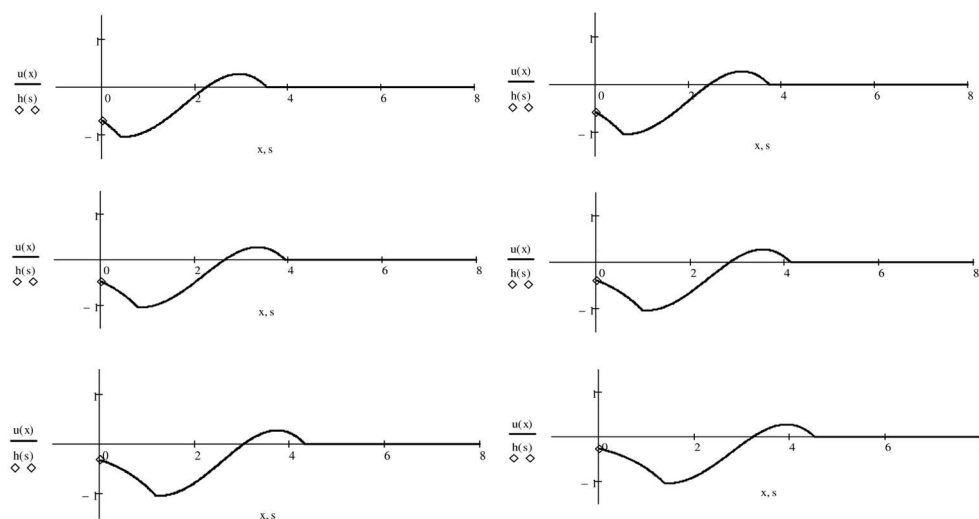
Закон движения конца струны $x = 0$ описывается функцией

$$u(0, t) = \begin{cases} 0, & 0 < t < a \\ 2h(t) - \Phi(t), & a < t < b \\ -e^{-\gamma t}c, & t > b \end{cases},$$

где $\Phi(x)$ и c имеют вид (17). Отсюда точка $x = 0$ до момента времени $t = a$ остается в покое. В промежутке времени $t \in (a, b)$ конец струны достигает максимального положительного, затем минимального отрицательного отклонения и при $t \rightarrow \infty$ экспоненциально стремится к нулю.

В качестве примера рассмотрим начальную функцию $h(x) = \sin x$ (12) при $a = 2\pi$, $b = 3\pi$, $\gamma = 1$. Решение задачи (8), (9) строится в конечном виде по формулам (14)–(16), где $\Phi(x) = \sin x - \cos x + e^{2\pi-x}$, $c = e^{3\pi} + e^{2\pi}$. Ниже приведены графики струны в окрестности точки $x = 0$ в моменты времени от $t = 2\pi$ (когда обратная волна подходит к точке $x = 0$) до $t = \frac{55}{16}\pi$ с шагом $\Delta t = \frac{1}{16}\pi$.





Список литературы

1. Холодовский С. Е. Метод свертывания разложений Фурье. Случай обобщенных условий сопряжения типа трещины (завесы) в кусочно-неоднородных средах // Дифференц. уравнения. 2009. Т. 45. № 6. С. 855–859.
2. Холодовский С. Е. Метод свертывания разложений Фурье. Случай трещины (завесы) в неоднородном пространстве // Дифференц. уравнения. 2009. Т. 45. № 8. С. 1204–1208.
3. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972.

References

1. Kholodovsky S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furye. Sluchay obobshchyonnykh uslovy sopryazheniya tipa treshchin (zavesy) v kusochno-neodnorodnykh sredakh // Differents. uravneniya. 2009. T. 45. № 6. S. 855–859.
2. Kholodovsky S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furye. Sluchay treshchin (zavesy) v kusochno-neodnorodnom prostranstvakh // Differents. uravneniya. 2009. T. 45. № 8. S. 1204–1208.
3. Tikhonov A. N., Samarsky A. A. Uravneniya matematicheskoy fiziki. M.: Nauka, 1972.

Статья поступила в редакцию 10.03.2013

УДК 53.096
ББК 22.3

Ксения Андреевна Щегрина

аспирант,

Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: lgc255@mail.ru

Олег Игоревич Петров

аспирант,

Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: lgc255@mail.ru

Сергей Дмитриевич Крылов

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник,

Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН
(Чита, Россия), e-mail: lgc255@mail.ru

Особенности микроволновых свойств льда с солевыми включениями в диапазоне температур -20°C – -190°C ¹

Выполнены исследования микроволновых свойств солёного льда с содержанием NaCl, Na₂CO₃ и природного льда из ледяного покрова оз. Доронинское в диапазоне температур -20°C – -190°C . Применялись следующие методики: диэлектрические измерения образцов льда, помещённых в волновод, на частоте 15 ГГц, а также измерение собственного радиотеплового излучения охлаждаемого льда на фоне безоблачного неба на частотах 5 ГГц, 13,5 ГГц и 37,5 ГГц. Впервые получены зависимости действительной ε' и мнимой ε'' частей относительной диэлектрической проницаемости образцов солёного льда для температур ниже -60°C . Экспериментально определена температура вымерзания жидкости в порах солёного льда -145°C .

Ключевые слова: микроволновая спектроскопия, солёный лёд.

Kseniya Andreevna Shchegrina

Postgraduate Student, Institute of Natural Resources,

Ecology and Cryology, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences
(Chita, Russia), e-mail: lgc255@mail.ru

Oleg Igorevich Petrov

Postgraduate Student,

Institute of Natural Resources, Ecology and Cryology,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences

(Chita, Russia), e-mail: lgc255@mail.ru

Sergey Dmitrievich Krylov

Candidate of Physics and Mathematics,

Senior Researcher, Institute of Natural Resources, Ecology and Cryology,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences

(Chita, Russia), e-mail: lgc255@mail.ru

Features of Microwave Properties of Ice with Salt Inclusions in the Temperature Range from -20°C to -190°C

The research of the microwave properties of salty ice containing NaCl, Na₂CO₃ and natural ice from the ice lake Doroninskoye at temperatures ranging from -20°C to -190°C was carried out. We used the following techniques: dielectric measurement of ice samples placed in a waveguide at a frequency of 15 GHz, as well as measuring the radio thermal radiation of ice against a cloudless sky at 5 GHz, 13.5 GHz and 37.5 GHz. Dependences of the real ε' and ε'' imaginary parts of the relative permittivity of the samples of salted ice for the temperatures below -60°C were found for the first time. The temperature of freezing liquid in the pores of the salty ice was experimentally determined as -145°C .

Keywords: microwave spectroscopy, salty ice.

¹Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №12-02-31237 и Интеграционного проекта СО РАН №56.

Введение. Микроволновый диапазон позволяет оценить фазовое состояние жидкости в капиллярах льда, в том числе при содержании в нём примесей в виде солей. При температурах ниже -40°C во льду начинаются процессы перехода жидких включений в новые фазовые состояния, которые могут привести к значительным изменениям диэлектрических свойств образцов [8]. Исследование микроволновых свойств соленого льда является актуальной задачей для решения проблем интерпретации данных дистанционного зондирования поверхности океана и внутренних солёных водоёмов в зимний период времени [4]. В соленом льду существуют капилляры, содержащие рассолы, которые оказывают существенное влияние на температуру и время процесса замерзания и таяния льда [9]. Радиофизические методы позволяют «взглянуть» на внутреннее строение таких образцов без непосредственного контакта с ними.

Методы исследования. В работе применялись следующие методики исследования льда: диэлектрические измерения образцов льда, помещённых в волновод, на частоте 15 ГГц, а также измерение собственного излучения охлаждаемого льда на фоне безоблачного неба на частотах 5 ГГц, 13,5 ГГц и 37,5 ГГц. Длина волновода при измерениях составляла 6 и 12 см. Совместное использование вышеуказанных методов позволяет подробно рассмотреть процессы, протекающие в порах образцов льда в лабораторных условиях в диапазоне температур -20°C – -190°C .

Образцы помещались в специальные кюветы и охлаждались с помощью паров азота от температуры -20°C до -190°C . После отключения охладителя образец постепенно нагревался до исходной температуры -20°C . Температура измерялась с помощью термопары с точностью $0,3^\circ\text{C}$ и частотой 100 записей в секунду. Весь цикл охлаждения – нагревания образца занимал 2 ч при волноводных измерениях и до 8 ч при экспериментах по радиометрии. Это связано с тем, что при радиометрических измерениях образцы льда медленнее изменяют температуру из-за их больших размеров.

Образцы льда для исследования извлекались из ледяного покрова содового озера Доронинское (Восточное Забайкалье) в зимний период 2012–2013 гг. Процентное содержание соды (Na_2CO_3 и NaHCO_3) в исходной воде в 3 раза выше, чем NaCl . Образцы с солевыми включениями NaCl и Na_2CO_3 изготавливались в лабораторных условиях. Содержание солей в образцах составляло 3 г/кг – 5 г/кг.

Экспериментальные данные. При лабораторных исследованиях образцов льда с содержанием хлорида натрия [7], соды и образцов, полученных из природного льда содового озера Доронинское (Забайкальский край), со сложным минеральным составом [3] в диапазоне температур -20°C ÷ -190°C , были выявлены некоторые особенности прохождения СВЧ-излучения на частотах 5 ГГц; 15,5 ГГц; 37,5 ГГц.

Состав воды и льда оз. Доронинское отличается от морской воды [2], хотя общая минерализация исходных морских вод и вод озера близка к 35 г/кг. Экспериментальные данные о диэлектрических свойствах льда (ε' – действительной и ε'' – мнимой части относительной диэлектрической проницаемости) с содержанием солей при более низких температурах ($\sim -60^\circ\text{C}$ ÷ -190°C) получены нами впервые при диэлектрической спектроскопии образцов, помещённых в волновод на частоте $f=15$ ГГц (рис. 1, 2).

Из графика, приведенного на рис. 1 для погонного затухания L , следует, что при достижении температуры образца -100°C в его порах еще остается остаточная жидкость, о чём свидетельствует $L=3,3$ дБ/м. Полное вымерзание жидкости зафиксировано при температуре -145°C на частоте $f=15$ ГГц. Небольшой перегиб графика при -22°C отмечает точку эвтектики хлорида натрия, который преобладает в составе солей во льду оз. Доронинское. Зависимость диэлектрической проницаемости ε' от температуры, приведенная на рис. 2, также свидетельствует о том, что полное вымерзание жидкости достигается при температуре -145°C , когда ε' достигает значения 2,4. Ниже этой температуры наклон графика не изменяется. Дальнейшее понижение температуры оказывает меньшее влияние на диэлектрические свойства исследуемых образцов.

Результаты радиометрических исследований образцов льда приведены на рис. 3.

В целом, для двух образцов с разным составом солевых включений температурный ход мощности теплового излучения P аналогичен. Выявлены некоторые особенности электромагнитных свойств льда с содержанием NaCl . При температуре -22°C зафиксирована точка эвтектики хлорида натрия. Некоторое падение мощности излучения при температуре -80°C , возможно, соответствует точке образования квазижидких плёнок в капиллярах льда [10]. В диапазоне температур -130°C ÷ -140°C для образца с хлоридом натрия наблюдается слабо выраженное снижение, а затем увеличение мощности излучения образца, которое также подтверждает возможное изменение

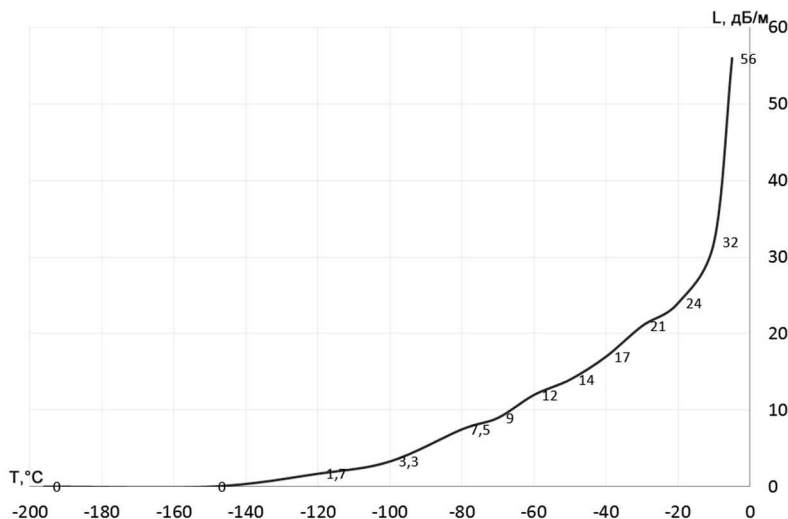


Рис. 1. Зависимость затухания мощности электромагнитного излучения в образце льда (L) из ледяного покрова озера Доронинского. Соленость образца $S=3$ г/кг. Частота $f=15$ ГГц. Отбор проб – февраль 2013 г

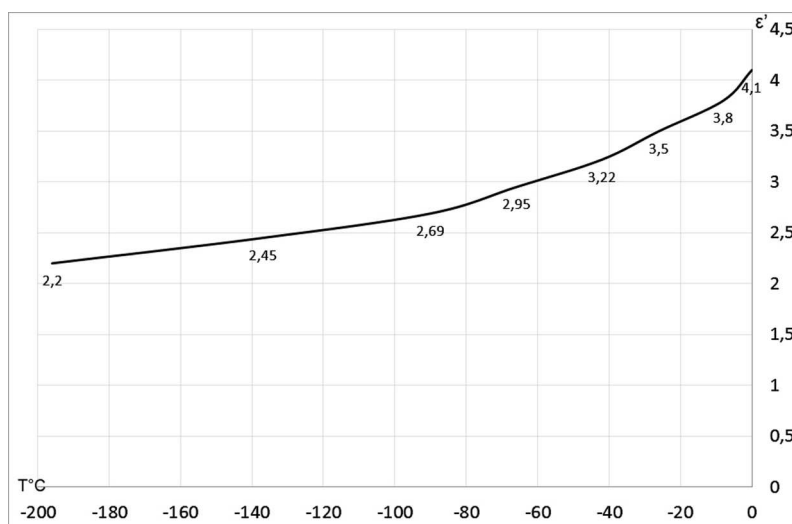


Рис. 2. Изменение действительной части относительной диэлектрической проницаемости ϵ' образца льда из ледяного покрова оз. Доронинское. Соленость образца $S=3$ г/кг. Частота $f=15$ ГГц. Отбор проб – февраль 2013 г.

фазового состояния жидкости в порах льда, которое может приводить к механической неустойчивости образцов льда под давлением [5; 6].

Выводы. Полученные данные диэлектрической спектроскопии о динамике действительной части относительной диэлектрической проницаемости ϵ' позволяют предположить, что рассол внутри капилляров льда не вымерзает в двухчасовом цикле охлаждения – нагревания образцов, сохраняя жидкую воду до температуры $-145^\circ C$. Эта температура отмечена в работах [5; 6] как температура механической неустойчивости для льда с содержанием хлористого натрия.

Зависимость диэлектрической проницаемости образцов льда содового озера от температуры совпадает с описанной в литературе для морского льда [1] до температур около $-40^\circ C$.

Данные радиометрии хорошо согласуются с данными диэлектрических волноводных измерений относительно области температур $-140^\circ C \div -145^\circ C$, а также выделяют температуру образования квазжидких плёнок внутри капилляров льда и их вымерзания. Зафиксированные процессы идут

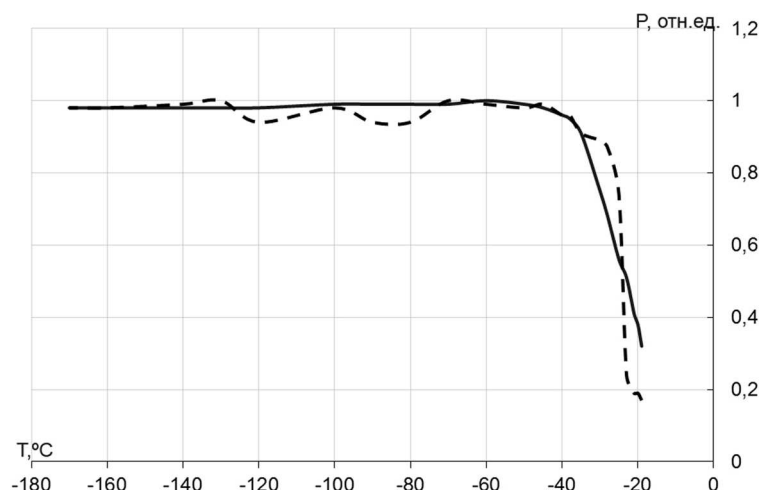


Рис. 3. Зависимость мощности теплового излучения (в относительных единицах) на частоте 13,5 ГГц от температуры. Сплошная линия соответствует образцу с содержанием хлорида натрия. Пунктирная линия соответствует образцу, изготовленному из ледяного покрова оз. Доронинское. (Февраль 2013 г.) Соленость образцов $S=5$ г/кг

при температурах гораздо ниже эвтектических для солевых включений исследуемого состава.

В условиях Земли экстремальные температуры могут наблюдаться в её холодных областях (Арктика и Антарктида). Также данные об электромагнитных свойствах загрязненного солями льда могут использоваться при дистанционном зондировании других планет, например, спутников Сатурна и Юпитера. Следовательно, полученные результаты о динамике мощности проходящего и собственного СВЧ-излучения представляют интерес для специалистов в области исследования разнообразных криогенных объектов.

Список литературы

1. Богородский В. В., Гаврило В. П. Лед. Физические свойства. Современные методы гляциологии. Л.: Гидрометиздат, 1980. 385 с.
2. Борзенко С. В. Формы сероводорода в минеральных содовых водах озера Доронинское (Восточное Забайкалье) // Вестник КРАУНЦ. Науки о Земле. 2009. № 1. Вып. 13. С. 54–57.
3. Гурулёв А. А., Харин Ю. В., Щегрина К. А., Лукьянов П. Ю. Особенности свойств ледяного покрова содового озера на частоте 13,7 ГГц // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. М.: ИКИ РАН. 2012. С. 289–293.
4. Репина И. А. Электродинамическая модель излучения арктического ледяного покрова для решения задач спутниковой микроволновой радиометрии / И. А. Репина, В. В. Тихонов, Т. А. Алексеева [и др.] // Исследование Земли из космоса. 2012. № 5. С. 29–36.
5. Фатеев Е. Г. Аномально низкая упругость $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ льда при низких температурах // ЖТФ. 2010. Т. 80. № 7. С. 46–52.
6. Фатеев Е. Г. Сверхнизкая упругая стабильность солёных льдов при низких температурах // ЖТФ. 2012. Т. 82. № 6. С. 35–43.
7. Щегрина К. А., Петров А. О., Крылов С. Д. Микроволновые свойства льда, легированного хлористым натрием // Сб. матер. XII Междунар. науч.-практ. конф. Чита. ЗабГУ, 2012. С. 67–70.
8. Щегрина К. А., Петров О. И. Влияние солевых включений на микроволновые свойства льда в диапазоне температур от 0°C до -190°C // Тез. док. VI конф. молодых ученых Тихоокеанского океанологического института им. В. И. Ильичёва ДВО РАН «Океанические исследования». 15–19 апреля 2013 г. Владивосток: ТОИ ДВО РАН. 2013. С. 34.

9. Kim J. S., Yethiraj A. The effect of salt on the melting of ice: A molecular dynamics simulation study // The Journal of Chemical Physics. 129. 2009. P. 124504.
10. Xing W., Miranda P.B., Shen Y.R. Surface Vibrational Spectroscopic Study of Surface Melting of Ice // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. № 8. P. 1554–1557.

References

1. Bogorodsky V. V., Gavrilov V. P. Led. Fizicheskiye svoystva Sovremennyye metody glyatsiologii. L.: Gidrometizdat, 1980. 385 s.
2. Borzenko S. V. Formy serovodoroda v mineralnykh sodovykh vodakh ozera Doroninskoye (Vostochnoye Zabaykalye) // Vestnik KRAUNTs. Nauka o Zemle. 2009 № 1. Vyp. S. 54–57.
3. Gurulev A. A., Kharin Yu. V., Shchegrina K. A., Lukyanov P. Yu. Osobennosti svoystv ledyanogo pokrova sadovogo ozera na chastote 13, 7 GGts // Sovremennyye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa. M.: IYEI RAN. 2012. S. 289–293.
4. Repina I. A. Elektrodinamicheskaya model izlucheniya arkticheskogo ledyanogo pokrova dlya resheniya zadach sputnikovoy mikrovolnovoy radiometrii / I. A. Repina, V. V. Tikhonov, T. A. Alekseyev [i dr.] // Issledovaniya Zemli iz kosmosa. 2012. № 5. S. 29–36.
5. Fateyeva Ye. G. Anomalno-nizkaya uprugost NaCl-H₂O lda pri nizkikh temperaturakh // ZhTF. 2010. T. 80. № 7. S. 46–52.
6. Fateyev Ye. G. Sverkh nizkaya uprugaya stabilnost solyonykh ldov pri nizkikh temperaturakh // ZhTF. 2012. T. 82. № 6. S. 35–43.
7. Shchegrina K. A., Petrov A. O. Krylov S. D. Mikrovolnovyye svoystva lda, legirovannogo khloristom natriyem // Sb. material. XII Mezhdunar. nauch.-prakt. konf. Chita. ZabGU, 2012. S. 67–70.
8. Shchegrina K. A., Petrov O. I. Vliyaniye solevykh vklyucheny na mikrovolnovyye svoystva lda v diapozone temperatur ot 0° C ai –190° C // Tez. dokl. VI konf. molodykh uchenykh Tikhookeanskogo okeanologicheskogo instituta im. V. I. Ilyichyova: DVO RAN «Okeanicheskiye issledovaniya». 15?19 aprelya 2013 g. Vladivostok. TOI DVO RAN. 2013. S. 34.
9. Kim J. S., Yethiraj A. The effect of salt on the melting of ice: A molecular dynamics simulation study // The Journal of Chemical Physics. 129. 2009. P. 124504.
10. Xing W., Miranda P. B., Shen Y. R. Surface Vibrational Spectroscopic Study of Surface Melting of Ice // Phys. Rev. Lett.

Статья поступила в редакцию 15.05.2013

УДК 517.956
ББК В 146

Галина Михайловна Яковлева
старший преподаватель,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: y.g.m@mail.ru

О решении краевых задач для уравнения Лапласа на кусочно-однородной плоскости с двумя параллельными трещинами¹

Рассмотрены краевые задачи в полуплоскости и полосе с двумя сильно проницаемыми трещинами, перпендикулярными границам областей. Решения указанных задач выражены через решения аналогичных краевых задач в однородных областях без трещин.

Ключевые слова: краевые задачи, кусочно-однородные области, сильно проницаемые плёнки, метод свёртывания разложений Фурье.

Galina Mikhailovna Yakovleva
Senior Lecturer,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: y.g.m@mail.ru

On Solution of Boundary-Value Problems for Laplace's Equation on a Piecewise-Homogeneous Plane with Two Parallel Cracks

Boundary value problems in the half-plane and strip with two highly permeable cracks perpendicular to the borders of the regions are considered. Solutions of these problems are expressed via the solution of similar boundary value problems in homogeneous areas without cracks.

Keywords: boundary value problems, piecewise-homogeneous areas, highly permeable film, method of convolution of Fourier expansions.

Статья является продолжением работы автора [1], в которой выведены общие формулы, выражающие особые точки потенциалов на кусочно-однородной анизотропной плоскости с двумя параллельными трещинами через особые точки гармонических функций. Другими словами, задавая гармоническую функцию на плоскости, по выведенным формулам получаем потенциалы на кусочно-однородной анизотропной плоскости с двумя трещинами при сохранении особых точек гармонической функции. В данной статье полученные формулы распространяются на решение краевых задач в кусочно-однородной изотропной полуплоскости и полосе с двумя трещинами.

Рассмотрим полуплоскость $y < 0$, состоящую из трёх однородных зон $D_1(x < 0)$, $D_2(0 < x < l)$ и $D_3(x > l)$, когда зоны D_i разделены сильно проницаемыми плёнками типа трещин $x = 0$ и $x = l$ с одинаковым параметром A [2, 3], где x, y – декартовы координаты. Пусть проницаемости крайних зон D_1 и D_3 одинаковы и равны k_1 , а проницаемость средней зоны D_2 равна k_2 , т.е. в полуплоскости $y < 0$ имеет место включение в виде полосы D_2 , окаймлённой трещинами.

Пусть на границе $y = 0$ заданы граничные условия первого рода, при этом рассмотрим случай однородных граничных условий в зонах D_2 и D_3 . Отсюда для функций $u_i(x, y)$ в D_i задача имеет вид (см. [1]):

$$\Delta u_i = 0, \quad u_{1|y=0} = h(x), \quad u_{j|y=0} = 0, \quad j = 2, 3, \quad (1)$$

$$x = 0: \quad u_2 = u_1, \quad k_2 \partial_x u_2 - k_1 \partial_x u_1 = A \partial_x^2 u_1, \quad (2)$$

$$x = l: \quad u_3 = u_2, \quad k_1 \partial_x u_3 - k_2 \partial_x u_2 = A \partial_x^2 u_2, \quad (3)$$

¹Работа выполнена в рамках государственного задания вузу Минобрнауки РФ, № 1.3985.2011.

где $\partial_x^n = \partial^n / \partial x^n$, $h(x)$ – заданная непрерывная функция, Δ – оператор Лапласа.

Наряду с задачей (1)–(3) рассмотрим аналогичную классическую задачу Дирихле в однородной полуплоскости $y < 0$ без трещин:

$$\Delta f = 0, \quad f|_{y=0} = \begin{cases} h(x), & x < 0 \\ 0, & x > 0 \end{cases}. \quad (4)$$

Отметим, что решение задачи Дирихле (1) строится по формуле Пуассона:

$$f(x, y) = -\frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{h(\xi) d\xi}{(x - \xi)^2 + y^2},$$

и для широкого класса граничных функций $h(x)$ последний интеграл вычисляется в конечном виде.

Покажем, что решение задачи (1)–(3) выражается через решение задачи Дирихле (4) по общим формулам, полученным в работе [1] методом свёртывания разложений Фурье [2, 3]:

$$u_1 = f(x, y) - f(-x, y) +$$

$$+ \frac{2k_1}{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \int_0^{\infty} e^{-\delta t} t^{2n} \left\{ \partial_t^{2n} [e^{-\nu t} f(\xi_1, y)] + \frac{t}{2n+1} \partial_t^{2n+1} [e^{-\nu t} f(\xi_2, y)] \right\} dt, \quad (5)$$

$$u_2 = \frac{2k_1}{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \int_0^{\infty} e^{-\delta t} t^{2n} \left\{ \partial_t^{2n} [e^{-\nu t} f(\xi_3, y)] + \frac{t}{2n+1} \partial_t^{2n+1} [e^{-\nu t} f(\xi_2, y)] \right\} dt, \quad (6)$$

$$u_3 = \frac{4k_1 k_2}{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \int_0^{\infty} e^{-\delta t} t^{2n+1} \partial_t^{2n} [e^{-\nu t} f(\xi_3, y)] dt, \quad (7)$$

где $\xi_1 = -x + 2nl + t$, $\xi_2 = -x + 2nl + 2l + t$, $\xi_3 = x + 2nl + t$,

$$\nu = \frac{k_1 - k_2}{A}, \quad \delta = \frac{2k_2}{A},$$

при этом, как показано в работах [4, 5], интегралы (5)–(7) сходятся при достаточно слабом условии на поведение функции $f(x, y)$ в бесконечности вида

$$|\partial_x^k [e^{-\nu x} f(x, y)]| < c \alpha^k e^{\alpha x},$$

где $x \rightarrow +\infty$, $k = 0, 1, \dots$, $0 < \alpha < \alpha_0$, $\alpha_0(1 + e^{(\alpha_0 + \nu)l}) = \delta$.

Действительно, выражения справа (5)–(7) являются операторами, действующими на функцию $f(x, y)$ по одной переменной x , при этом переменная y является свободной. Условия сопряжения (2), (3) также являются операторами, действующими на функции $f(x, y)$ по одной переменной x , при этом эти условия для функций (5)–(7) выполняются тождественно, что устанавливается интегрированием по частям. Уравнение Лапласа (1) для функций (5)–(7) выполняется, т.к. это уравнение выполняется для функции $f(\pm x, y)$.

Первые аргументы функции $f(x, y)$ в формулах (5)–(7), кроме первого слагаемого в формуле (5), положительны, причем для $x > 0$ выполняется однородное граничное условие $f(x, 0) \equiv 0$ (4). Первый аргумент в первом слагаемом формулы (5) отрицательный, при этом для $x < 0$ выполняется граничное условие $f(x, 0) = h(x)$. Отсюда граничные условия (1) для функций (5)–(7) выполняются.

Таким образом, решение задачи (1)–(3) на кусочно-однородной полуплоскости $y < 0$ с двумя параллельными трещинами строится по формулам (5)–(7).

Формулы (5)–(7) являются универсальными в следующем смысле. По этим формулам аналогично вышеизложенному решаются краевые задачи первого, второго и третьего рода в полуплоскости $y < 0$ и полосе $D(x \in R, a < y < b)$. Так, если в формулах (5)–(7) функция $f(x, y)$ является решением краевой задачи в однородной полуплоскости $y < 0$ с граничным условием второго (третьего) рода, т.е.

$$\Delta f = 0, \quad \partial_y f|_{y=0} = \begin{cases} h(x), & x < 0 \\ 0, & x > 0 \end{cases}, \quad \left(\partial_y f + \gamma f|_{y=0} = \begin{cases} h(x), & x < 0 \\ 0, & x > 0 \end{cases} \right), \quad (4)$$

то функции $u_i(x, y)$ (5)–(7) являются решением аналогичной задачи в кусочно-однородной полуплоскости, состоящей из зон D_i , с трещинами $x = 0$, $x = l$ вида

$$\begin{aligned} \Delta u_i &= 0, & \partial_y u_1|_{y=0} &= h(x), & \partial u_j|_{y=0} &= 0, & j &= 2, 3, \\ (\partial_y u_1 + \gamma u_1|_{y=0} &= h(x), & \partial_y u_j + \gamma u_j|_{y=0} &= 0, & j &= 2, 3), \\ x = 0: & & u_2 &= u_1, & k_2 \partial_x u_2 - k_1 \partial_x u_1 &= A \partial_x^2 u_1, \\ x = l: & & u_3 &= u_2, & k_1 \partial_x u_3 - k_2 \partial_x u_2 &= A \partial_x^2 u_2, \end{aligned}$$

($\gamma = const > 0$). Данное утверждение проверяется непосредственно.

Аналогично можно непосредственно показать, что если функция $f(x, y)$ является решением некоторой краевой задачи для уравнения Лапласа в полосе $D(x \in R, a < y < b)$ с произвольной комбинацией граничных условий 1-го, 2-го или 3-го рода (однородных при $x > 0$ и неоднородных при $x < 0$), то функции (5)–(7) являются решением аналогичной задачи для уравнения Лапласа в кусочно-однородной полосе, состоящей из зон D_i , с трещинами $x = 0$, $x = l$ при сохранении граничных условий.

Список литературы

1. Яковлева Г. М. О построении особых точек потенциалов на кусочно-однородной анизотропной плоскости с двумя параллельными трещинами // Математический анализ и его приложения. 2012. Вып. 11. ЗабГУ. Чита. С. 50–58.
2. Холодовский С. Е. Метод свёртывания разложений Фурье. Случай трещины (завесы) в неоднородном пространстве // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45. № 8. С. 1204–1208.
3. Холодовский С. Е. Метод свёртывания разложений Фурье. Случай обобщённых условий сопряжения типа трещины (завесы) в кусочно-неоднородных средах // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45. № 6. С. 855–859.
4. Холодовский С. Е. О решении краевых задач в цилиндрах с двумя параллельными трещинами // Математический анализ и его приложения. 2011. Вып. 10. ЗабГГПУ. Чита. С. 56–62.
5. Холодовский С. Е., Давиденко Г. М. О решении краевых задач в кусочно-однородных цилиндрах с двумя параллельными завесами // Учёные записки Забайкальского государственного гуманитарно-педагогического университета. Сер. «Физика, математика, техника, технология». 2012. № 3(44). Чита. С. 152–156.

References

1. Yakovleva G. M. O postroyenii osobykh tochek potentsialov na kusochno-odnorodnoy ploskosti s dvumya parallelnymi treshchinami // Matematichesky analiz i ego prilozheniya. 2012. Vyp. 11. Izd-vo ZabGU. Chita. S. 50–58.

2. Kholodovsky S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furrye. Sluchay treshchiny (zavesy) v neodnorodnom prostranstve // *Differentsialnye uravneniya*. 2009. T. 45. № 8. S. 1204–1208.
3. Kholodovsky S. Ye. Metod svyortyvaniya razlozheny Furrye. Sluchay obobshchennykh uslovy sopryazheniya tipa treshchiny (zavesy) v kusochno-neodnorodnykh sredakh // *Differentsialnye uravneniya*. 2009. T. 45. № 6. S. 855–859.
4. Kholodovsky S. Ye. O reshenii zadach v tsilindrakh s dvumya parallelnymi treshchinami // *Matematichesky analiz i ego prilozhenii*. 2011. Vyp. 10. ZabGGPU. Chita. S. 56–62.
5. Kholodovsky S. Ye., Davidenko G. M. O reshenii krayevykh zadach v kusochno-odnorodnykh tsilindrakh s dvumya parallelnymi zavesami // *Uchyonye zapiski Zabaykalskogo gosudarstvennogo gumanitarno-pedagogicheskogo universiteta*. Ser. «Fizika, matematika, tekhnika, tekhnologiya». 2012. № 3(44). Chita. S. 152–156.

Статья поступила в редакцию 15.04.2013

ДАТЫ. СОБЫТИЯ. ЛЮДИ

DATES. EVENTS. PEOPLE

УДК 51
ББК В1

Святослав Евгеньевич Холодовский
доктор физико-математических наук,
Забайкальский государственный университет
(Чита, Россия), e-mail: hol47@yandex.ru

К 110-летию юбилею Андрея Николаевича Колмогорова

Svyatoslav Evgen'evich Kholodovskiy
Doctor of Physics and Mathematics,
Zabaikalsky State University
(Chita, Russia), e-mail: hol47@yandex.ru

On the 110th Anniversary of the Birth of Andrey Nikolaevich Kolmogorov

По мировым рейтингам и данным многих научных журналов за всю историю развития царицы наук – математики – пять математиков названы самыми выдающимися, заложившими основы всех современных направлений математической науки. Это – Иссак Ньютон, Леонард Эйлер, Карл Гаусс, Анри Пуанкаре и наш соотечественник – академик Андрей Николаевич Колмогоров.

Текущий 2013 год оказался знаменательным на даты из жизни великих математиков. В 1643 году родился И. Ньютон. В 1783 году умер Л. Эйлер. И, главное – в 1903 году, т. е. 110 лет назад, родился Андрей Николаевич Колмогоров. Вся отечественная и мировая научная общественность отмечает эту знаменательную дату. Наш забайкальский журнал так же не может не отметить это событие. Любой творческий математик, занимающийся своим конкретным направлением, может сказать, что в его направлении есть результаты, полученные Андреем Николаевичем. Если перечислять решённые Колмогоровым математические проблемы, то нужно писать отдельный том. Существует Колмогорово пространство, Колмогорово уравнение, Колмогоровы аксиомы, неравенства, критерии, теоремы, интеграл и т. д. Колмогоров являлся членом многих академий наук в Европе, Азии и США.

В этом году будет написано множество статей, посвященных А. Н. Колмогорову, в которых люди, лично знавшие Андрея Николаевича, вспомнят его добрым словом, опишут его биографию, его заслуги.

Мне бы хотелось высказать своё субъективное представление об этом человеке. Моему отцу – Холодовскому Евгению Петровичу, преподававшему математику в Читинском пединституте со дня его основания, посчастливилось слушать лекции А. Н. Колмогорова в МГУ в шестидесятые годы, и отец мне много рассказывал об Андрее Николаевиче, говорил, что лекции Колмогорова полностью захватывали слушателей, появлялась иллюзия какого-то действия, драмы. Сначала излагалась постановка непростой задачи и попытки её решения стандартными приёмами, которые ни к чему не приводили, словно на пути возникла непреодолимая стена. Потом постепенно начинало что-то проясняться, стена начинала рушиться. И наконец – прорыв, всё разложено по кирпичикам. Когда Колмогоров излагал новые теории, создавалось впечатление, что из ничего, из простых вещей посредством чисто логических рассуждений, постепенно накручиваясь, начинала выстраиваться цельная стройная картина. В итоге получалась компактная теория – всё строго, симметрично, красиво!

Родился А. А. Колмогоров 12 апреля 1903 года в Тамбове. С детства хотел быть лесником, т. к. он очень любил природу, наши просторы, леса, поля, реки. Одно это уже о многом говорит. Он писал: «Первым серьёзным планом дальнейшей жизни и работы было намерение заняться лесным хозяйством – стать лесничим, сажать леса, растить их и охранять. Увлекала, конечно, и романтика жизни в лесу». Но судьба распорядилась иначе. Попробовав себя в математике, он уже не мог остановиться. Математика затягивает, тем более человека, одарённого от Бога. Колмогоров пишет:

«Радость математического открытия я познал рано, подметив в возрасте пяти-шести лет закономерность: $1 = 1^2$, $1 + 3 = 2^2$, $1 + 3 + 5 = 3^2$, $1 + 3 + 5 + 7 = 4^2$, и так далее... Многие школьники состязались между собой в самостоятельном изучении дополнительного материала». Хорошо бы современным студентам перенять эту традицию!

Колмогоров, несмотря на все свои звания и заслуги, оставался скромным, простым и доступным человеком. Он запросто мог разговаривать с академиками и школьниками. Он поддерживал любых, в том числе провинциальных математиков, всегда умел заметить рациональное зерно в оригинальных работах. Он всячески популяризировал математику, разрабатывал вопросы математического образования в средней и высшей школах, был организатором школ юных математиков, которые в семидесятые годы работали во многих городах, в том числе и в Чите.

Мы все – Россияне – должны гордиться тем, что Россия дала человечеству такого великого учёного – Колмогорова Андрея Николаевича.

Статья поступила в редакцию 15.05.2013

УДК 51
ББК В

Камиль Шейхович Хайруллин

*кандидат географических наук,
ведущий научный сотрудник, Главная геофизическая обсерватория им. А. И. Воейкова
(Санкт-Петербург, Россия)*

Фридман Александр Александрович: к 125-летию со дня рождения

Kamil Sheihovich Khairullin

*Candidate of Geography,
Leading Researcher, Voeikov Main Geophysical Observatory
(Saint Petersburg, Russia)*

On the 125th Anniversary of the Birth of Aleksandr Aleksandrovich Friedman

Фридман, жизнь которого связана с Петербургом, родился 16 июня 1888 года в артистической семье: отец – Александр Александрович, выпускник балетной школы, закончивший Петербургскую консерваторию, был автором музыки ряда балетов. Мать – Людмила Игнатьевна Воячек также воспитанница Петербургской консерватории по классу рояля.

В 1897 году он поступил во 2-ю гимназию Санкт-Петербурга, которая существует и поныне. Класс был сильный и 5 человек, в том числе и Фридман, получили золотые медали. В гимназии его увлекали математика и физика, и он знакомился с трудами выдающихся математиков и физиков: Лагранжа, Эйлера, Маркова, Чебышева, Пуанкаре, Римана. Поэтому после её окончания в 1906 году поступает на математическое отделение Санкт-Петербургского университета. На молодого студента обратил внимание выдающийся математик В. А. Стеклов (именем которого назван институт Математики РАН). Одной из первых студенческих работ Фридмана был доклад «О каналах на Марсе», известие об открытии которых появилось незадолго до этого. После смерти отца молодой аспирант, по ходатайству Стеклова, получил стипендию и серьёзно занялся вопросами гидродинамики и механики. По окончании университета в 1913 году Фридман направляется на работу в филиал Главной геофизической обсерватории в Павловске, где занимается проблемами физики атмосферы. Молодой учёный совершает полёты на дирижаблях, запускает шары-зонды и воздушные змеи, к которым крепятся самопишущие метеорологические приборы. В 1914 году директор ГФО академик Б. Б. Голицын командует Фридмана в Лейпциг, где он знакомится с видными метеорологами Бьеркнесом, Хессельбергом, Вегенером.

После начала I Мировой войны (1914 г.) идёт на военную службу, заканчивает курсы пилотов. Летаёт на боевые операции по разведке расположения противника и бомбит их с воздуха. На основании лётного опыта составляет таблицы точности бомбометания в зависимости от высоты и скорости самолета, а также плотности воздуха. В 1915 году Фридман направляется инструктором в школу авиаторов в Киеве, где составляет «Конспект лекций по аэронавигации». За воинскую доблесть награждается Георгиевским крестом и почётным Георгиевским оружием.

В 1917 году командирован в Москву, где становится директором завода «Авиаприбор». После Революции в 1918 рекомендован на работу в город Пермь во вновь созданный Университет, где создает технический кабинет, читает лекции по физике, механике и метеорологии, а также работает помощником ректора по административно-хозяйственной части. В 1920 году возвращается в Петроградский университет на преподавательскую деятельность, а также в качестве профессора преподаёт в Институте путей сообщения и в Политехническом институте, где работает по приглашению академика Крылова вместе с Капицей и Иоффе.

В этот период появляются его первые публикации по теории относительности и космологии. Результаты своих оригинальных исследований Фридман опубликовал на русском и немецком языках. В них он делает грандиозный вывод: галактики не могут быть в покое относительно друг друга – и предсказывает явление их нестационарности. На его работу о кривизне пространства реакция Эйнштейна была отрицательной, и лишь через год великий физик признал свою неправоту: «Я считаю результаты г-на Фридмана правильными и проливающими новый свет».

В последний год жизни (1925) Фридман становится директором Главной геофизической обсерватории (ныне ГГО им. А. И. Воейкова). На этом посту он основал Отдел динамической метеорологии, сформулировал задачи исследований по прогнозированию погоды. Фридман принял самое

активное участие в подготовке и проведении I Всесоюзного геофизического съезда. В этом же году 16 июня он совершает исследовательский полёт на аэростате с пилотом П. Ф. Федосеенко, позже погибшим во время установления рекорда высоты на стратостате, достигнув высоты 7400 м.

16 сентября 1925 года учёный скоропостижно скончался в возрасте 37 лет от брюшного тифа. Уже после смерти, в 1931 году за выдающиеся научные работы ему была присуждена премия Ленина. Широкая известность при жизни сменилась после смерти мировой известностью, как одного из крупнейших учёных XX века. С изложения теории Александра Александровича Фридмана начинаются книги по космологии и астрофизике. На Луне есть кратер, носящий имя учёного.

Статья поступила в редакцию 15.05.2013

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

RULES FOR AUTHORS

Редакция принимает **не опубликованные** ранее материалы объемом до 1 п. л. (40 000 знаков с пробелами), выполненные в жанрах:

Жанр	Минимальный объем
статья теоретического и эмпирического характера, содержащая основные научные результаты, полученные автором	0,5 п. л. (20 000 знаков)
научные доклады	0,3 п. л. (12 000 знаков)
научные обзоры рецензии	0,2 п. л. (8 000 знаков)

В редакцию НЕОБХОДИМО ПРЕДСТАВИТЬ:

1. Печатный и электронный вариант статьи на CD и других носителях. В имени файла и на электронном носителе указывается фамилия автора и название статьи. Печатный вариант статьи обязателен (белая бумага, формат А 4). Распечатка рукописи должна быть полностью идентична электронному варианту.
2. Договор на оказание услуг – в 2 экземплярах.
3. Рецензия на статью – внешний отзыв, заверенный печатью.
4. Отзыв научного руководителя с указанием новизны и достоверности исследования, *если автор статьи – аспирант, соискатель учёной степени кандидата наук.*
5. Личная карточка автора – сведения об авторе /авторах.

СТРУКТУРА СТАТЬИ, ПРЕДСТАВЛЯЕМОЙ В РЕДКОЛЛЕГИЮ ЖУРНАЛА

Отрасль науки (рубрика журнала)

Код: УДК и ББК

Инициалы, фамилия автора приводятся на русском и английском языках. Количество со-авторов в статье может быть не более 4.

Город

Страна

Название статьи приводится на русском и английском языках строчными буквами (не заглавными).

Аннотация (объём – 100–250 слов) – на русском и английском языках. Текст аннотации должен включать основные результаты статьи. Аннотация не должна содержать каких-либо ссылок.

Ключевые слова или словосочетания (5–7) отделяются друг от друга запятой. Приводятся на русском и английском языках.

Основной текст статьи с внутритекстовыми ссылками на цитируемые источники.

Список литературы даётся в алфавитном порядке, со сквозной нумерацией. Если в список входит литература на иностранных языках, она следует за литературой на русском языке.

ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ СТАТЬИ

Общие требования: формат А 4, ориентация книжная.

Параметры страницы: верхнее и нижнее – 2; левое и правое – 2,5. Шрифт Times New Roman, кегль 14, интервал полуторный. Отступ первой строки – 1,25. Текст без переносов, выравнивание по ширине.

При использовании дополнительных шрифтов при наборе статьи представить их в редакцию.

Статья должна быть со сквозной нумерацией. *На последней странице указывается, что «статья публикуется впервые», ставится дата и подпись.*

Рабочие языки: русский и английский.

Список литературы оформляется согласно ГОСТу Р. 7.0.5 - 2008. Для каждого источника обязательно указывается изд-во, общее количество страниц или номера страниц интересующего материала источника.

В тексте **ссылки** приводятся в квадратных скобках с указанием порядкового номера и страницы: [1, с. 25]. Несколько источников отделяются друг о друга точкой с запятой [1; 3; 4].

Комментарии и пояснения даются в виде концевых сносок (в конце текста). Маркер сноски – арабская цифра, нумерация сплошная.

Особенности набора слов, цифр, формул, единиц измерения:

Слова на латинице набираются курсивом.

Единицы измерения отбиваются от символов и цифр, к которым они относятся.

Делать чёткое различие О (буквы) и 0 (ноль), 1 (единицу) и I (римскую единицу или букву «и») и т.д. Необходимо различать дефис (-) и тире (–).

Не следует заменять букву «ё» на «е».

Таблицы оформляются в формате Word, должны быть озаглавлены и иметь сквозную нумерацию в пределах статьи, обозначаемую арабскими цифрами (например, таблица 1), в тексте ссылки нужно писать сокращенно (табл. 1). Содержание таблиц не должно дублировать текст. Слова в таблицах должны быть написаны полностью, верно должны быть расставлены переносы. В ячейке таблицы в конце предложения точка не ставится.

Черно-белые рисунки (графики, диаграммы – формат Excell, схемы, карты, фотографии) со сквозной нумерацией (арабскими цифрами) и везде обозначаются сокращённо (например: рис. 1). Представляются в формате jpg (разрешение не менее 300 т/д) отдельными файлами с указанием его порядкового номера, фамилии автора/ авторов и названия статьи. Размер рисунка 170 × 240 мм. Все детали рисунка при его уменьшении должны хорошо различаться. Все подрисовочные подписи прилагаются отдельным списком в конце статьи.

Объём рисунков не должен превышать 1/4 объёма статьи.

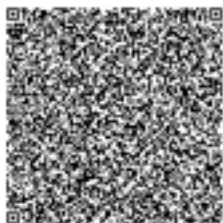
ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ К СТАТЬЯМ ПО НАПРАВЛЕНИЮ «ФИЗИКА, МАТЕМАТИКА, ТЕХНИКА, ТЕХНОЛОГИЯ»

Электронный вариант статьи предоставляется на CD и других носителях или по электронной почте. Предоставляемые файлы должны обладать расширением **.tex** и **.pdf**. Издательство использует систему вёрстки **mi $\kern-0.25ex\mu$ tex** для Windows версии не ниже 2.7. Перечень используемых подпакетов в файле-образце.

С сайта необходимо скачать образец оформления статьи (с готовыми настройками).

Материалы, не соответствующие предъявленным требованиям, к рассмотрению не принимаются.

Материалы публикуются в авторской редакции. За точность содержания цитат и ссылок ответственность несут авторы.



Пакет документов, необходимый для опубликования материалов, **отсылается по адресу:** 672007, г. Чита, ул. Бабушкина, 129, Забайкальский государственный университет, для «Объединенной редакционной коллегии научных журналов ЗабГУ».

Редактор Т. Р. Шевчук
Редактор перевода В. М. Ерёмина
Верстка: Г. А. Зенкова

Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная.
Гарнитура «Times». Сдано в печать 15.09.13.
Усл. печ. 9,8.
Усл. изд. л. 21,1.
Тираж 1000 экз.
Заказ № 08413
Забайкальский государственный
университет
672039, г. Чита, ул. Александрo-Заводская, 30

Managing editor N. R. Shevchuk
Translator V. M. Eremina
Make-up: G. A. Zenkova

Format 60×84 1/8. Offset paper
Headset "Times". Signed to print 15.09.13.
Con. quires 9,8.
Con. pub. quires 21,1.
Circulation 1000 copies.
Order # 08413.
Zabaikalsky State University
672039, Chita, 30 Aleksandro-Zavodskaya St.