Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНИТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory».

Редакционная коллегия
д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.** (*отв. редактор*),
к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.** (*отв. секретарь*),
д.т.н., профессор **Михайлов Г.Г.**, д.т.н., профессор **Гуревич С.Ю.,**
д.ф.-м.н., профессор **Менихес Л.Д.,** к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.,**
д.х.н., профессор **Лыкасов А.А.,** д.х.н., профессор **Рябухин А.Г.**

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

АНТОНОВ В.А., ЧЕКАНОВ С.Г. О конечных p-группах с автоморфизмом специального вида 4

ГЛАЗЫРИНА А.В. Непогружаемость метрик вращения в виде геликоидальной поверхности в *n*-мерное евклидово пространство 10

ДИЛЬМАН В.Л., ЕРОШКИНА Т.В. Математические модели напряженного состояния пластического слоя с сечением в форме кольцевого сектора 13

ЕМЕЛЬЯНЕНКО Н.Ю. Моделирование орбит комет с фиксированным положением апсидальных точек 21

ЕМЕЛЬЯНЕНКО Н.Ю. Моделирование орбит комет с фиксированным положением точек низкоскоростного касания 29

ЗАЛЯПИН В.И. Абрам Давидович Кацман – Ученый, Педагог, Человек 37

Содержание

КУДРЯВЦЕВ К.Н. Об одной модели рынка и ее гарантированном по выигрышам и рискам решении 46

МЕДВЕДЕВ Ю.А., РАСУЛОВ К.М. Об одной четырехэлементной краевой задаче типа Римана для бианалитических функций 53

ТЮРИНА И.А. Конечные неразрешимые группы с нетривиальным центром и малыми централизаторами нецентральных элементов 58

УШАКОВ А.Л. Моделирование итерационной факторизации для эллиптической краевой задачи второго порядка 64

Физика

БИРЮКОВ Е.Е. Особенности захвата комет галлеевского типа с почти параболических орбит 71

БИРЮКОВ Е.Е. Угасание комет из облака Оорта 79

ГУРЕВИЧ С.Ю., ПЕТРОВ Ю.В., БОЖКО В.Ф. Генерация нормальных акустических волн (волн Лэмба) в металлах с помощью импульсов лазерного излучения 86

КИСЕЛЁВА Е.Л. Резонансные транснептунные объекты как источник комет семейства Юпитера 94

КЛЕБАНОВ И.И., ГРИЦАЙ П.И., ГИНЧИЦКИЙ Н.Н. Уравнение состояния одномерной системы «коллапсирующих» твёрдых сфер 99

КОРЕНЧЕНКО А.Е., БЕСКАЧКО В.П. Колебания капли вязкой жидкости, ограниченной двумя плоскостями 104

КУЗНЕЦОВ Г.Ф. Распределение частиц в вертикальном вихревом потоке газа 109

ЛОПУШАН В.И., КРЫМСКИЙ В.В., КЛЕЩЕВ Д.Г. Воздействие наносекундных электромагнитных импульсов на кинетику фазового перехода γ-$Al(OH)_3 \rightarrow$ γ-AlOOH в гидротермальных условиях 112

МИРЗАЕВ Д.А., МИРЗОЕВ А.А. Термодинамический аспект выделения растворенного водорода в микропорах металла 117

МИРЗОЕВ А.А., КАБЛИМАН Е.А. Структурная устойчивость и фононные спектры в системе Ni-Al: расчет методом рекурсии 124

ОСТСЕМИН А.А., УТКИН П.Б. Упруго-пластическое разрушение труб с поверхностной трещиной 130

ПУМПЯНСКИЙ Д.А., СМИРНОВ М.А., ЖУРАВЛЁВ Л.Г., ПЫШМИНЦЕВ И.Ю. Влияние скорости охлаждения на структуру низкоуглеродистой трубной стали 137

САПОЖНИКОВА Т.С., МИРЗОЕВ А.А., ПЕСИН Л.А. Первопринципное моделирование электронной структуры ПВДФ и продуктов его дегидрофторирования 141

ТОЛИПОВ Х.Б. Точное решение задачи взаимодействия неоднородных волн с плоской границей 144

ЧЕГОДАЕВА Е.А. Метод параллельного симплектического интегрирования уравнений движения малых тел Солнечной системы 150

ШАБУРОВА Н.А. Воздействие наносекундных электромагнитных импульсов на расплавы цветных металлов 152

СКОРКИН Н.А., СТЕПАНОВ В.Ф., ШИСТИРИКОВА М.А. Конечно-разностная процедура случайной выборки численного решения уравнений механики сплошной среды 157

ШЕПОВАЛОВ Е.Н. Некоторые алгебраические аспекты метода системного анализа в общей теории сложных механических систем 164

ШЕПОВАЛОВ Е.Н. Построение частотной функции Грина для свободного упругого объекта, полости которого частично заполнены жидкостью 176

ШУЛЬГИНОВ А.А. Периодичность инфранизкочастотных флуктуаций электропроводности металлических плёнок 184
БЕСКАЧКО В.П., БОЛОТНИКОВА Н.А., ЦАПИН П.О. МГД-эффекты, возникающие в экспериментах с вращающимся диском в присутствии осевого магнитного поля 187
БЕСКАЧКО В.П., САПОЖНИКОВА Т.С., ВЯТКИН Г.П. Оценка механических свойств нанотрубок по данным квантовохимических расчетов....193
МИРЗАЕВ Д.А., КОРЯГИН Ю.Д., ОКИШЕВ К.Ю., ЕЛГИН В.М., ЗВОНКОВ А.А. Прогнозирование изменения предела текучести, обусловленного диффузионными превращениями, в сплаве МА21 в ходе многолетней выдержки....199
ЕЛЮХИНА И.В. Обратная задача крутильно-колебательной вискозиметрии для нелинейных жидкостей 203
ЕЛЮХИНА И.В., ВЯТКИН Г.П. Идентификация неньютоновского поведения жидкометаллических систем 204
ГУРЕВИЧ С.Ю., ПЕТРОВ Ю.В., ГОЛУБЕВ Е.В. Параметры импульсов рэлеевских волн, возбуждаемых лазерным импульсом в ферромагнитном металле....209

Химия

АВДИН В.В., ЛЫМАРЬ А.А., БАТИСТ А.В. Новый способ обработки данных дифференциального термического анализа....211
БЕЛАЯ Е.А., ВИКТОРОВ В.В. Кинетика образования твердых растворов в системе TiO_2 (рутил) – Cr_2O_3....215
БЕЛАЯ Е.А., ВИКТОРОВ В.В. Особенности взаимодействия и фазообразования в системе TiO_2 (анатаз) – Cr_2O_3....219
ГАВРИЛОВ С.В., САРАПУЛЬЦЕВ Б.И., БОЧАРНИКОВ В.А. ЯМР-спектроскопия качества воды при многомерном геоэкологическом анализе природно-технических систем 224
ГЛАДКОВ В.Е., АФЛЯТУНОВ Ж.З., ВИКТОРОВ В.В. Температурные условия начала формирования шлаковых отложений при их факельном сжигании....227
ПЕЧЕНЮК С.И., БУДНИКОВА Н.А. Адсорбция карбонат-ионов оксигидроксидами железа(III) и алюминия....233
РЯБУХИН А.Г., ИВАНОВ Е.И., ШАРЛАЙ Е.В. Исследование температурных зависимостей анодных максимумов окисления меди с использованием кольцевого микроэлектрода....239
СЕМУШИНА Ю.П., ПЕЧЕНЮК С.И. Кислотно-основные свойства поверхности гидрогелей оксигидроксидов железа (III), циркония (IV) и хрома (III) 244
СУХАРЕВ Ю.И., КРУПНОВА Т.Г., ОРЛОВА А.Ю. Стохастический шум как отражение конформерных изменений макромолекул оксигидрата циркония....248
ТОЛЧЕВ А.В., КЛЕЩЕВ Д.Г., ЛОПУШАН В.И., ЛАРИН Д.Д. Изучение морфологии микрокристаллов корунда, образующихся при термообработке гиббсита в замкнутом объеме 254
ТОЛЧЕВ А.В., ЛАРИН Д.Д. Рентгенографические исследования гиббсита с различной степенью дисперсности 257
КОРОБИЦЫН Б.А., ЯКШИНА Н.В. Нейросетевое моделирование динамики изменения уровня воды в водоеме-хранилище радиоактивных отходов …….. 260

© Издательство ЮУрГУ, 2006

Математика

УДК 512.54

О КОНЕЧНЫХ *p*-ГРУППАХ С АВТОМОРФИЗМОМ СПЕЦИАЛЬНОГО ВИДА

В.А. Антонов, С.Г. Чеканов

Условие С-замкнутости для нормальных подгрупп в конечных разрешимых группах позволяет выделить класс групп, которые допускают автоморфизм действующий регулярно и неприводимо на минимальных нормальных подгруппах. Получены необходимые и достаточные условия существования таких групп. Кроме того, доказано вспомогательное утверждение из алгебры матриц, имеющее самостоятельный интерес.

При исследовании конечных разрешимых групп с С-замкнутыми инвариантными подгруппами [1] возникли группы, имеющие следующее строение.

Пусть $p, q_1, q_2, ..., q_m$ – различные простые числа, n_i – показатель числа p по модулю q_i [2], n – показатель p по модулю $r = \prod_{i=1}^{m} q_i$. Тогда

$$G = (A \cdot B)\lambda \langle x \rangle,$$

где A и B – абелевы p-группы,

$$A \cap B = Z(A \cdot B) = (A \cdot B)' = \prod_{i=1}^{m} Z_i,$$

причем Z_i – элементарная абелева группа порядка p^{n_i}, $A / A \cap B$ и $B / A \cap B$ – минимальные нормальные подгруппы группы $G / A \cap B$, $|A / A \cap B| = |B / A \cap B| = p^n$, $|x| = r$, элемент x действует на каждой из подгрупп Z_i неприводимо, и $C(Z_i) = (A \cdot B)\lambda \langle x^{q_i} \rangle$.

В предлагаемой работе получены необходимые и достаточные условия существования таких групп.

Положим $A \cdot B = P$, $A \cap B = Z$, $k_i = n / n_i$, $r_i = r / q_i$, m_i – показатель p по модулю r_i и $l_i = n / m_i$. Тогда $m_i = НОК\{n_j \mid j \neq i\}$ и $l_i = НОД\{k_j \mid j \neq i\}$.

В дальнейшем нам потребуется следующее вспомогательное утверждение из алгебры матриц, имеющее и самостоятельный интерес.

ЛЕММА. *Пусть $p, q_1, q_2, ..., q_m$ – различные простые числа, $k \in N$, число $r = \prod_{i=1}^{m} q_i$ нечетно, n – показатель числа p по модулю r, L – аддитивная группа матриц порядка kn над полем $GF(p)$. И пусть A и B – матрицы из L вида*

$$A = \begin{pmatrix} X & 0 & ... & 0 \\ 0 & X & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & X \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} Y & 0 & ... & 0 \\ 0 & Y & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & Y \end{pmatrix},$$

где X и Y – матрицы порядка n, характеристические многочлены $f(x)$ и $g(y)$ которых являются минимальными многочленами первообразных корней r-й степени из единицы над полем $GF(p)$. Положим

$$C_L(A,B)=\{T\in L\mid A'TB=T\}.$$

и пусть $f(x)=x^n-\sum_{i=2}^{n}\alpha_i x^{i-1}-(-1)^{n+1}$ *и* $g(y)=y^n-\sum_{i=2}^{n}\beta_i y^{i-1}-(-1)^{n+1}$. *Тогда* $|C_L(A,B)|\neq 1$ *тогда и только тогда, когда* $\alpha_i=(-1)^n\beta_{n+2-i}$ *для всех* $i=2,3,...,n$, *или, что то же самое,* X^{-1} *является корнем многочлена* $g(y)$. *В этом случае* $|C_L(A,B)|=p^{k^2n}$.

Доказательство. Пусть $T\in C_L(A,B)$. Разобьем матрицу T на квадратные блоки порядка $n:T=(T_{ij})$, $i,j=1,2,...,k$. Условие $A'TB=T$ равносильно тому, что $X'T_{ij}Y=T_{ij}$ для всех i и j. Поэтому, если L_1 – аддитивная группа матриц порядка n, то в силу того, что матрица T состоит из k^2 блоков, $|C_L(A,B)|=|C_{L_1}(X,Y)|^{k^2}$. Поэтому в дальнейшем достаточно ограничится случаем $k=1$, т.е. $A=X$ и $B=Y$.

Проведем индукцию по числу m. Пусть $m=1$, $n_1=n$ и $q_1=q$. Заметим, что если U и V – невырожденные матрицы, $X_1=U^{-1}XU$ и $Y_1=V^{-1}YV$, то $|C_L(X_1,Y_1)|=|C_L(X,Y)|$. В самом деле, если $T\in C_L(X_1,Y_1)$, то из

$$T=X_1'TY_1=(U^{-1}XU)'TV^{-1}YV=U'X'(U^{-1})'TV^{-1}YV$$

следует, что

$$X'(U^{-1})'TV^{-1}Y=(U^{-1})'TV^{-1}$$

т.е. $(U^{-1})'TV^{-1}\in C_L(X,Y)$. Отображение $T\to(U^{-1})'TV^{-1}$ является, очевидно, биекцией $C_L(X_1,Y_1)$ на $C_L(X,Y)$, т.е. $|C_L(X_1,Y_1)|=|C_L(X,Y)|$. Поэтому можно считать, что матрицы X и Y являются циклическими матрицами, т.е.

$$X=\begin{pmatrix}0&0&...&(-1)^{n+1}\\1&0&...&\alpha_2\\...&...&...&...\\0&0&...&\alpha_n\end{pmatrix},\quad Y=\begin{pmatrix}0&0&...&(-1)^{n+1}\\1&0&...&\beta_2\\...&...&...&...\\0&0&...&\beta_n\end{pmatrix}.$$

Простая проверка показывает, что если $X'TY=T$, то в матрице T любой ряд, параллельный главной диагонали, состоит из одинаковых элементов. Поэтому $|C_L(X,Y)|\le p^{2n-1}$.

Обозначим через φ такой автоморфизм группы L, что $T^{\varphi}=X'TY$ для любого $T\in L$. Из $(p,q)=1$ и $|\varphi|=q$ следует, что $L=[L,\varphi]\oplus C_L(\varphi)$. Так как φ действует на $[L,\varphi]$ регулярно, то в силу теоремы Машке $[L,\varphi]$ разлагается в прямую сумму минимальных φ -допустимых подгрупп. Порядок каждой из них равен p^n. Поэтому $|L|=p^{n^2}=p^{sn}\cdot p^t$, где $p^t=|C_L(X,Y)|$. Из равенства $n^2=sn+t$ следует, что t делится на n. А так как $t\le(2n-1)$, то $t\in\{0,n\}$.

Пусть

$$T=\begin{pmatrix}a_1&a_2&...&a_n\\b_2&a_1&...&a_{n-1}\\...&...&...&...\\b_n&b_{n-1}&...&a_1\end{pmatrix}-$$

произвольная матрица из $C_L(X,Y)$. Равенство $X'TY=T$ равносильно однородной системе $(2n-1)$ уравнений с $(2n-1)$ неизвестными a_i и b_j вида

$$\sum_{i=1}^{n}t_ia_i+\sum_{j=2}^{n}s_jb_j=0,$$

причем в первых $(n-1)$ уравнениях, занумерованных числами $k=2,3,...,n$, выполняются равенства $t_k=-1$, $s_{n-k+2}=(-1)^{n+1}$, $t_i=s_j=0$ при $i>k$ и $j>n-k+2$, $t_i=\beta_{n-k+i+1}$ при $i<k$ и $s_j=\beta_{n-k-j+3}$ при $j<n-k+2$, в следующих $(n-1)$ уравнениях, занумерованных числами $n+k$, $k=2,3,...,n$, выполняются равенства $t_{n-k+2}=(-1)^{n+1}$, $s_k=-1$, $t_i=s_i=0$ при $i>n-k+2$ и $j>k$, $t_i=\alpha_{n-k-i+3}$ при $i<n-k+2$, $s_j=\alpha_{n-k+j+1}$ при $j<k$, а в последнем уравнении (с учетом первых $(n-1)$ уравнений) все ненулевые коэффициенты имеют вид $\pm(\beta_j-(-1)^n\alpha_{n+j-2})$.

Так как $|C_L(X,Y)|=p^n$, то ранг этой системы должен быть равен $(n-1)$. Вычитая из уравнения, занумерованного числом $(n+k)$, $k=2,3,...,n$, уравнение, занумерованное числом $(n+2-k)$, умноженное на $(-1)^n$, убеждаемся, что ранг системы равен $(n-1)$ тогда и только тогда, когда $\alpha_k=(-1)^n\beta_{n+2-k}$.

Предположим теперь, что $m>1$. Если $|C_L(X,Y)|\neq 1$, то $\left|C_L(X^{q_i},Y^{q_i})\right|\neq 1$. В силу предположения индукции $\left|C_L(X^{q_i},Y^{q_i})\right|=p^{k_i^2m_i}=p^{k_in}$.

Рассматривая действие φ на $C_L(X^{q_i},Y^{q_i})$, получим равенство $k_in=sn_i+t$, т.е. t делится на n_i. В силу произвольности i число t делится на $HOK\{n_i|i=1,2,...,m\}=n$. Но тогда из $t\le 2n-1$ получаем $t=n$.

Основным результатом данной работы является следующее утверждение.

ТЕОРЕМА. Группа G указанного выше строения существует тогда и только тогда, когда выполняются следующие условия:

a) если число r четно, то $r=2$ и $n=1$;

b) если число r нечетно, то $\sum_{i=1}^{m}n_i\le n^2$ и либо $m_i<n$ для любого $i=1,2,...,m$, либо найдутся такие числа $t,s_1,s_2,...,s_m$, что $tp^{s_i}\equiv -1(\mathrm{mod}\,r_i)$ для всех i, но $tp^s\not\equiv -1(\mathrm{mod}\,r)$ для любого числа s.

Доказательство. *a*). Необходимость. Предположим, что $q_1=2$ и $x=x_1\cdot x_2$, где $|x_1|=2$, а $|x_2|$ нечетен. Если элемент x_1 действует на A/Z и B/Z регулярно, то для любых $a\in A$ и $b\in B$ выполняются равенства $a^{x_1}=a^{-1}z_1$ и $b^{x_1}=b^{-1}z_2$ для некоторых $z_1,z_2\in Z$. Но тогда $[a,b]^{x_1}=\left[a^{x_1},b^{x_1}\right]=\left[a^{-1},b^{-1}\right]=[a,b]$, т.е. x_1 действует на Z тривиально, что невозможно в силу $C(Z_1)=P\lambda\left\langle x^2\right\rangle$. Поэтому можно считать, что $C_{A/Z}(x_1)\neq 1$. Из $A/Z=[A/Z,x_1]\times C_{A/Z}(x_1)$ и минимальности A/Z следует, что x_1 действует на A/Z тривиально. Если действие x_1 на B/Z тоже тривиально, то снова получим $[Z,x_1]=1$, что невозможно. Поэтому x_1 действует на B/Z регулярно, и для любых $a\in A$ и $b\in B$ будем иметь $[a,b]^{x_1}=\left[a^{x_1},b^{x_1}\right]=\left[a,b^{-1}\right]=[a,b]^{-1}$, т.е. x_1 действует на Z регулярно. Но тогда $Z=Z_1$, т.е. $m=1$ и $r=2$. Из $p\equiv 1(\mathrm{mod}\,2)$ следует, что $n=1$. Достаточность. Если $r=q_1=2$ и p – нечетное простое число, то группа $G=((\langle a\rangle\times\langle z\rangle)\lambda\langle b\rangle)\lambda\langle x\rangle$, где $|a|=|b|=|z|=p$, $|x|=2$, $[a,b]=z$, $[b,z]=1$, $a^x=a$, $b^x=b^{-1}$, и $z^x=z^{-1}$, искомая.

b). Необходимость. Так как $Z=P'=\left\langle\left[a_j,b_k\right]\,\middle|\,a_j\in A,b_k\in B\right\rangle$, а A/Z и B/Z элементарные абелевы группы порядка p^n, то $|Z|=\prod_{i=1}^{m}p^{n_i}\le p^{n^2}$.

Для $a \in G$ положим $\bar{a} = aZ$. Предположим, что $x = \prod_{i=1}^{m} x_i$, где $|x_i| = q_i$. Для удобства перейдем в группе Z и фактор-группе P/Z к аддитивной форме записи. Выберем в группах $A/Z, B/Z$ и Z_i, $i = 1,2,...,m$, циклические базисы, т.е. мы предполагаем, что

$$A/Z = \sum_{k=1}^{n} \langle \bar{a}_k \rangle, \quad B/Z = \sum_{k=1}^{n} \langle \bar{b}_k \rangle, \quad Z_i = \sum_{j=1}^{n_i} \langle z_{ij} \rangle$$

и $\bar{a}_k^x = \bar{a}_{k+1}$, $\bar{b}_k^x = \bar{b}_{k+1}$ и $z_{ij}^x = z_{i,j+1}$ при $k < n$ и $j < n_i$;

$$\bar{a}_n^x = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \bar{a}_k, \quad \bar{b}_n^x = \sum_{k=1}^{n} \beta_k \bar{b}_k, \quad z_{in_i}^{x_i} = \sum_{j=1}^{n_i} \gamma_{ij} z_{ij},$$

где $f(y) = (y^n - \sum_{j=1}^{n} \alpha_j y^{j-1})$ и $g(y) = (y^n - \sum_{j=1}^{n} \beta_j y^{j-1})$ – минимальные многочлены первообразных корней степени r из 1, а $h_i(y) = (y^{n_i} - \sum_{j=1}^{n_i} \gamma_{ij} y^{j-1})$ – минимальный многочлен первообразного корня степени q_i из 1 над полем $GF(p)$. Отметим, что $\alpha_1 = \beta_1 = (-1)^{n+1}$ и $\gamma_{i1} = (-1)^{n_i+1}$.

Пусть $[a_u, b_v] = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} t_{ijuv} \cdot z_{ij}$. Тогда $T_{ij} = (t_{ijuv})$ - квадратная матрица порядка n, и если через $[a]$ и $[b]$ обозначить координатные столбцы элементов $\bar{a}$ и $\bar{b}$ в базисах $\{\bar{a}_1, \bar{a}_2, ..., \bar{a}_n\}$ и $\{\bar{b}_1, \bar{b}_2, ..., \bar{b}_n\}$ соответственно, то

$$[a,b] = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} ([a]' T_{ij} [b]) \cdot z_{ij}.$$

Действуя элементом x на a и b, получаем

$$[a^x, b^x] = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} ([a]' (X' T_{ij} Y) [b]) \cdot z_{ij},$$

где X – матрица оператора x в базисе $\{\bar{a}_1, \bar{a}_2, ..., \bar{a}_n\}$, Y – матрица оператора y в базисе $\{\bar{b}_1, \bar{b}_2, ..., \bar{b}_n\}$, а штрих означает транспонирование. В то же время, из $x = \prod_{i=1}^{m} x_i$ следует, что

$$[a^x, b^x] = [a,b]^x = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} ([a]' T_{ij} [b]) \cdot z_{ij}^x = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} ([a]' T_{ij} [b]) \cdot z_{ij}^{x_i}.$$

Приравнивая коэффициенты при z_{ij}, получаем, что для любого $i = 1,2,...,m$ выполняются равенства

$$(X' T_{i1} Y, X' T_{i2} Y, ..., X' T_{in_i} Y) = (T_{i1}, T_{i2}, ..., T_{in_i}) \cdot X_i' = (\gamma_{i1} T_{in_i}, T_{i1} + \gamma_{i2} T_{in_i}, ..., T_{i(n_i-1)} + \gamma_{in_i} T_{in_i}).$$

Отсюда получаем

$$T_{in_i} = \gamma_{i1}^{-1} (X' T_{i1} Y), \quad T_{i(n_i-1)} = X' T_{in_i} Y - \gamma_{in_i} T_{in_i}, ..., \quad T_{i2} = X' T_{i3} Y - \gamma_{i3} T_{in_i} \quad (*)$$

и $(X^{q_i})' T_{i1} Y^{q_i} = T_{i1}$. А так как x действует на Z регулярно, то $X' T_{i1} Y \neq T_{i1}$. Это равносильно тому, что $C_L(X^{q_i}, Y^{q_i}) > C_L(X,Y)$ для любого номера i. Если $m_i = n$ для некоторого i, то из $|C_L(X^{q_i}, Y^{q_i})| = p^n > |C_L(X,Y)| \in \{1, p^n\}$ следует, что $|C_L(X,Y)| = 1$.

Каждое из расширений $GF(p)[X]$ и $GF(p)[Y]$ изоморфно полю $GF(p^n)$. Обозначим через x_1 и x_2 образы элементов X и Y при соответствующих изоморфизмах. Тогда $x_2 = x_1^t$ для неко-

торого числа t и если X^{-q_i} является корнем характеристического многочлена Y^{q_i}, то $x_1^{-q_i}$ является корнем минимального многочлена для $x_2^{q_i}$.

Так как $\left|C_L(X^{q_i},Y^{q_i})\right|\neq 1$, то в силу леммы элемент $x_1^{-q_i}$ является корнем минимального многочлена для $x_2^{q_i}$. Но все корни этого многочлена имеют вид $x_2^{q_i p^s}$, $s=1,2,...,m_i$. Поэтому $x_1^{-q_i}=x_2^{q_i p^{s_i}}=x_1^{tq_1 p^{s_i}}$ для некоторого числа s_i. Но тогда $tp^{s_i}\equiv -1(\mathrm{mod}\, r_i)$. А из $\left|C_L(X,Y)\right|=1$ аналогично следует, что x_1^{-1} не является корнем $g(y)$, т.е. $tp^s\not\equiv -1(\mathrm{mod}\, r)$ ни при каком s.

Достаточность. Пусть x_0 – первообразный корень r -й степени из 1 над полем $GF(p)$, а $f(y)=y^n-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i y^{i-1}$ – нормированный минимальный многочлен для x_0. Если все числа m_i меньше n, то через $g(y)$ обозначим нормированный минимальный многочлен элемента x_0^{-1}, а если выполняется вторая альтернатива из пункта *b)* условия теоремы, то через $g(y)$ обозначим нормированный минимальный многочлен элемента x_0^t. И пусть X и Y – циклические матрицы порядка n над полем $GF(p)$, у которых характеристические многочлены равны, соответственно, $f(y)$ и $g(y)$. Тогда $C_L(X^{q_i},Y^{q_i})>C_L(X,Y)$ для любого номера i и, следовательно, найдутся такие матрицы T_{i1}, $i=1,2,...,m$, что $(X^{q_i})'T_{i1}Y^{q_i}=T_{i1}$, но $X'T_{i1}Y\neq T_{i1}$. Матрицы T_{ij} для $j=2,3,...,n_i$ найдем по формулам $(*)$. Предположим, что $g(y)=y^n-\sum_{i=1}^{n}\beta_i y^{i-1}$ и если $x=\prod_{i=1}^{m}x_i$, где $\left|x_i\right|=q_i$, то $h_i(y)=y^{n_i}-\sum_{j=1}^{n_i}\gamma_{ij}y^{j-1}$ – минимальный многочлен для x_i. Тогда искомой является группа

$$G=((\prod_{k=1}^{n}\langle a_k\rangle\times\prod_{i=1}^{m}\prod_{j=1}^{n_i}\langle z_{ij}\rangle)\lambda\prod_{k=1}^{n}\langle b_k\rangle)\lambda\langle x\rangle,$$

где $\left|a_k\right|=\left|b_k\right|=\left|z_{ij}\right|=p$ для всех i,j,k, $\left|x\right|=r$, $a_k^x=a_{k+1}$, $b_k^x=b_{k+1}$ и $z_{ij}^x=z_{[(j+1)}$ при $k<n$ и $j<n_i$, соответственно,

$$a_n^x=\prod_{k=1}^{n}a_k^{\alpha_k},\quad b_n^x=\prod_{k=1}^{n}b_k^{\beta_k},\quad z_{in_i}^x=\prod_{j=1}^{n_i}z_{ij}^{\gamma_{ij}}\ \text{ и }\ [a_u,a_v]=\prod_{i=1}^{m}\prod_{j=1}^{n_i}z_{ij}^{t_{ijuv}},$$

где t_{ijuv} – элемент из u-й строки и v -го столбца матрицы T_{ij}. Теорема доказана.

Приведем некоторые примеры. В дальнейшем через x обозначим первообразный корень степени r из 1 над полем $GF(p)$.

1. Пусть $p=2$, $q_1=3$, $q_2=7$ и $q_3=31$. В этом случае $m_1=15$, $m_2=10$, $m_3=6$, а $n=30$. Так как $m_i<n$ для любого i, то в этом случае группа G существует.

2. Если $p=2$, $q_1=3$ и $q_2=5$, то $m_2=2$ и $m_1=n=4$. Так как $x^{-3}=x^{3\cdot 2^2}$, $x^{-5}=x^{5\cdot 2}$ и $x^{-1}\neq x^{2^\alpha}$ ни для какого α, то условие теоремы выполняется для $t=1$ и, следовательно, группа G существует и в этом случае.

3. Предположим теперь, что $p=2$, $q_1=7$, $q_2=5$ и $q_3=3$. Тогда $m_1=4$, $m_2=6$, $m_3=n=12$. Если y – первообразный корень степени 105 из 1 над $GF(2)$, то $y\in\{x^{2^s},x^{11\cdot 2^s},x^{13\cdot 2^s}\mid s\in I=\{0,1,...,11\}\}$. Из $x^{-3}=y^{3\cdot 2^s}$ и $x^{-5}=y^{5\cdot 2^s}$ следует, что

$y \in \{x^{13\cdot 2^s}, x^{17\cdot 2^s} \mid s \in I\}$. А из $x^{-7} = y^{7\cdot 2^s}$ следует, что $y \in \{x^{11\cdot 2^s}, x^{13\cdot 2^s} \mid s \in I\}$. Поэтому $t = 13 \cdot 2^s$ для некоторого $s \in I$. Так как $x^{-1} = x^{13\cdot 2^3}$, то группа G в этом случае не существует.

Литература

1. Антонов В.А. Группы с С-замкнутыми нециклическими подгруппами // Сибирский математический журнал. – 1979. – Т. 20. – № 6. – С. 1171–1184.
2. Лидл Р., Нидеррайтер Г. Конечные поля – Т. 1. – М.: Мир, 1988. – 425 с.

Поступила в редакцию 3 апреля 2006 г.

УДК 513.74

НЕПОГРУЖАЕМОСТЬ МЕТРИК ВРАЩЕНИЯ В ВИДЕ ГЕЛИКОИДАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ В *n*-МЕРНОЕ ЕВКЛИДОВО ПРОСТРАНСТВО

А.В. Глазырина

В данной работе доказана невозможность изометрического погружения метрики вращения в *n*-мерное евклидово пространство в виде геликоидальной поверхности.

Непогружаемость плоскости Лобаческого в E^3 доказана Д.Гильбертом [1], а погружаемость в E^n при $n \geq 5$ установлена в работах [2, 3]. Вопрос о погружении плоскости Лобачевского в E^4 (без дополнительных ограничений на вид погружения, кроме его регулярности) остается открытым. В работе [4] Э.Р. Розендорн доказал невозможность погружения плоскости Лобачевского в E^4 в виде геликоидальной поверхности. Невозможность погружения в E^4 исследовалась также в работах [5–10].

В настоящей работе рассматривается вопрос о погружении в E^n двумерных метрик вращения

$$ds^2 = du^2 + B^2(u)dv^2 \tag{1}$$

в виде геликоидальной поверхности. Следуя Э.Р. Розендорну [4], назовем поверхность геликоидальной, если после приведения ее метрики к виду (1) коэффициенты вторых квадратичных форм и коэффициенты кручения не зависят от координаты v. Примером может служить прямой геликоид в пространстве E^3.

Теорема. Если $B_u(u)$ – неограниченная функция при $-\infty < u < +\infty$, то метрика $ds^2 = du^2 + B^2(u)dv^2$ не допускает изометрического погружения в E^n $(n \geq 3)$ в виде геликоидальной поверхности.

Доказательство: Пусть F – двумерная односвязная поверхность в E^n с внутренней метрикой неположительной кривизны. Будем считать для простоты, что на F введена единая система координат (u,v), а поверхность F задана вектор-функцией $r(u,v)$. Как обычно, $r_i = \dfrac{\partial r}{\partial u^i}$, $r_{ij} = \dfrac{\partial^2 r}{\partial u^i \partial u^j}$, $i,j = 1,2$, где $u^1 = u$, $u^2 = v$. Зафиксируем вдоль F ортонормированный базис нормалей $e_1,\ldots,e_{n-2}$. Хорошо известно, что коэффициенты первой и второй основных форм $g_{ij} = r_i r_j$, $i,j = 1,2$, $M_\alpha = r_{12}e_\alpha$, $L_\alpha = r_{11}e_\alpha$, $N_\alpha = r_{22}e_\alpha$, $\alpha = 1, 2,\ldots, n-2$; и так называемые коэффициенты кручения $A_{\alpha\beta k} = \dfrac{\partial e_\alpha}{\partial u^k}e_\beta$, $k = 1,2$, удовлетворяют нижеследующей системе уравнений (2)–(5).

Уравнения погружения двумерной поверхности в E^n имеют вид ($\alpha = 1, 2,\ldots, n-2$):

$$\sum_{\alpha=1}^{n-2}\left(L_\alpha N_\alpha - M_\alpha^2\right) = \left(EG - F^2\right)K \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial u}M_\alpha - \frac{\partial}{\partial v}L_\alpha = \Gamma_{11}^1 M_\alpha - \Gamma_{12}^1 L_\alpha + \Gamma_{11}^2 N_\alpha - \Gamma_{12}^2 M_\alpha + \sum_{\beta=1}^{n-2}\left(L_\beta A_{\alpha\beta 2} - M_\beta A_{\alpha\beta 1}\right), \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial v}M_\alpha - \frac{\partial}{\partial u}N_\alpha = \Gamma_{22}^1 L_\alpha - \Gamma_{12}^1 M_\alpha + \Gamma_{22}^2 M_\alpha - \Gamma_{12}^2 N_\alpha + \sum_{\beta=1}^{n-2}\left(N_\beta A_{\alpha\beta 1} - M_\beta A_{\alpha\beta 2}\right), \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial v}A_{\alpha\beta 1} - \frac{\partial}{\partial u}A_{\alpha\beta 2} = \sum_{\gamma=1}^{n-2}\left(A_{\alpha\gamma 1}A_{\beta\gamma 2} - A_{\alpha\gamma 2}A_{\beta\gamma 1}\right) + g^{11}\left(L_\alpha M_\beta - M_\alpha L_\beta\right) + g^{22}\left(M_\alpha N_\beta - N_\alpha M_\beta\right), \tag{5}$$

Уравнение погружения метрики вращения $ds^2 = du^2 + B^2(u)\cdot dv^2$ в E^n:

$$ds^2 = r_u^2 du^2 + 2r_u r_v du dv + r_v^2 dv^2,$$

где $r_u^2 = E = 1$, $2r_u r_v = F = 0$, $r_v^2 = G = B^2(u)$ и $K = -\frac{B_{uu}}{B}$ – кривизна метрики,

$EG - F^2 = B^2$, $\frac{\partial}{\partial v} L_\alpha = \frac{\partial}{\partial v} M_\alpha = \frac{\partial}{\partial v} A_{xy1} = 0$ и $g^{11} = 1$, $g^{22} = \frac{1}{B^2(u)}$,

коэффициенты Кристоффеля примут вид:

$\tilde{A}_{11}^1 = \frac{0{,}5E_u G - FF_u + 0{,}5E_v F}{EG - F^2} = 0$;

$\tilde{A}_{11}^2 = \frac{F_u E - 0{,}5EE_v - 0{,}5E_u F}{EG - F^2} = 0$;

$\tilde{A}_{12}^1 = \frac{0{,}5E_v G - 0{,}5G_u F}{EG - F^2} = 0$;

$\tilde{A}_{12}^2 = \frac{0{,}5G_u E - 0{,}5E_v F}{EG - F^2} = \frac{B_u}{B}$;

$\tilde{A}_{22}^1 = \frac{F_v G - 0{,}5G_u G - 0{,}5G_v F}{EG - F^2} = -B_u B$;

$\tilde{A}_{22}^2 = \frac{0{,}5G_v E - F_v F + 0{,}5G_u F}{EG - F^2} = 0$,

тогда наша система примет вид:

$$\sum_{\alpha=1}^{n-2}\left(L_\alpha N_\alpha - M_\alpha^2\right) = -\frac{B_{uu}}{B}B^2;$$

$$\frac{\partial}{\partial u} M_\alpha = -\frac{B_u}{B} M_\alpha + \sum_{\beta=1}^{n-2}\left(L_\beta A_{\alpha\beta 2} - M_\beta A_{\alpha\beta 1}\right);$$

$$\frac{\partial}{\partial u} N_\alpha = B_u B L_\alpha + \frac{B_u}{B} N_\alpha + \sum_{\beta=1}^{n-2}\left(M_\beta A_{\alpha\beta 2} - N_\beta A_{\alpha\beta 1}\right);$$

$$\frac{\partial}{\partial u} A_{\alpha\beta 2} = \sum_{\gamma=1}^{n-2}\left(A_{\alpha\gamma 2} A_{\beta\gamma 1} - A_{\alpha\gamma 1} A_{\beta\gamma 2}\right) + \left(M_\alpha L_\beta - L_\alpha M_\beta\right) + \frac{N_\alpha M_\beta - M_\alpha N_\beta}{B^2}.$$

Сделаем замену:

$M_x = m_x B(u)$; $\quad \frac{\partial}{\partial u} M_x = \frac{\partial}{\partial u} m_x B(u) + m_x B_u(u)$;

$N_x = n_x B^2(u)$; $\quad \frac{\partial}{\partial u} N_x = \frac{\partial}{\partial u} n_x B^2(u) + 2n_x B(u) \cdot B_u(u)$;

$L_x = l_x$; $\quad \frac{\partial}{\partial u} A_{\alpha\beta 2} = \frac{\partial}{\partial u} a_{\alpha\beta 2} B(u) + a_{\alpha\beta 2} B_u(u)$;

$A_{xy1} = a_{xy1}$; $\quad A_{xy2} = a_{xy2} B(u)$, где $x, y = \alpha, \beta$,

и первое, и третье уравнение разделим на $B^2(u)$, а второе и четвертое – на $B(u)$.

Система уравнений примет вид:

$$\sum_{\alpha=1}^{n-2}\left(l_\alpha n_\alpha - m_\alpha^2\right) = -\frac{B_{uu}}{B};$$

$$\frac{\partial}{\partial u} m_\alpha = -2m_\alpha \frac{B_u}{B} + \sum_{\beta=1}^{n-2}\left(l_\beta a_{\alpha\beta 2} - m_\beta a_{\alpha\beta 1}\right);$$

$$\frac{\partial}{\partial u} n_\alpha = -n_\alpha \frac{B_u}{B} + l_\alpha \frac{B_u}{B} + \sum_{\beta=1}^{n-2}\left(m_\beta a_{\alpha\beta 2} - n_\beta a_{\alpha\beta 1}\right);$$

$$\frac{\partial}{\partial u} a_{\alpha\beta 2} = -a_{\alpha\beta 2}\frac{B_u}{B} + \sum_{\gamma=1}^{n-2}\left(a_{\alpha\gamma 2} a_{\beta\gamma 1} - a_{\alpha\gamma 1} a_{\beta\gamma 2}\right) + m_\alpha l_\beta - l_\alpha m_\beta + n_\alpha m_\beta - m_\alpha n_\beta.$$

Умножим уравнения (2), (3) и (4) соответственно на m_α, n_α, $a_{\alpha\beta 2}$ и сложим полученные уравнения:

$$\sum_{\substack{\alpha=1 \\ \beta\neq\alpha}}^{n-2}\left(m_\alpha \frac{\partial}{\partial u} m_\alpha + n_\alpha \frac{\partial}{\partial u} n_\alpha + a_{\alpha\beta 2} \frac{\partial}{\partial u} a_{\alpha\beta 2}\right) = -2m_\alpha^2 \frac{B_u}{B} - n_\alpha^2 \frac{B_u}{B} + n_\alpha l_\alpha \frac{B_u}{B} - a_{\alpha\beta 2}^2 \frac{B_u}{B} + \sum,$$

ãääå $\sum = \sum_{\alpha=1}^{n-2} m_\alpha \sum_{\beta=1}^{n-2} \left(l_\beta a_{\alpha\beta 2} - m_\beta a_{\alpha\beta 1} \right) + \sum_{\alpha=1}^{n-2} n_\alpha \sum_{\beta=1}^{n-2} \left(m_\beta a_{\alpha\beta 2} - n_\beta a_{\alpha\beta 1} \right) + \sum_{\substack{\alpha=1 \\ \beta\neq\alpha}}^{n-2} a_{\alpha\beta 2} \sum_{\gamma=1}^{n-2} \left(a_{\alpha\gamma 2} a_{\beta\gamma 1} - a_{\alpha\gamma 1} a_{\beta\gamma 2} \right) +$

$+ \sum_{\substack{\alpha=1 \\ \beta\neq\alpha}}^{n-2} a_{\alpha\beta 2} \left(m_\alpha l_\beta - l_\alpha m_\beta + n_\alpha m_\beta - m_\alpha n_\beta \right) = 0.$

Можно заметить, что:

$$0{,}5 \frac{\partial}{\partial u} \left(\sum_{\substack{\alpha=1 \\ \beta\neq\alpha}}^{n-2} \left(m_\alpha^2 + n_\alpha^2 + a_{\alpha\beta 2}^2 \right) \right) = -\frac{B_u}{B} \cdot \left(\sum_{\substack{\alpha=1 \\ \beta\neq\alpha}}^{n-2} \left(m_\alpha^2 + n_\alpha^2 + a_{\alpha\beta 2}^2 \right) \right) + \frac{B_u}{B} \left(\sum_{\alpha=1}^{n-2} \left(l_\alpha n_\alpha - m_\alpha^2 \right) \right),$$

где $\sum_{\alpha=1}^{n-2} \left(l_\alpha n_\alpha - m_\alpha^2 \right) = -\frac{B_{uu}}{B}$ и обозначим $\sum_{\substack{\alpha=1 \\ \beta\neq\alpha}}^{n-2} \left(m_\alpha^2 + n_\alpha^2 + a_{\alpha\beta 2}^2 \right) = f^2$, тогда

$0{,}5 \frac{\partial}{\partial u} f^2 = -\frac{B_u}{B} \cdot f^2 - \frac{B_u \cdot B_{uu}}{B^2}$; $\quad 0{,}5 \frac{\partial}{\partial u} f^2 + \frac{B_u}{B} \cdot f^2 = -\frac{B_u \cdot B_{uu}}{B^2}$ (умножим на $2B^2$);

$B^2 \frac{\partial}{\partial u} f^2 + 2BB_u \cdot f^2 = -2B_u B_{uu}$; $\quad \frac{\partial}{\partial u} \left(B^2 f^2 \right) = -2B_u B_{uu}$.

В итоге мы получим: $f^2 B^2 (u) = -B_u^2 (u) + C$. Равенство не выполняется для всех значений u, если функция $B_u(u)$ не ограничена. Теорема доказана.

Следствие. Плоскость Лобачевского $L^2(-1)$ не допускает изометрического погружения в E^n $(n \geq 3)$ в виде геликоидальной поверхности.

Замечание. Если $B_u(u)$ ограничена, то метрика (1) допускает погружение в виде геликоидальной поверхности в E^3 $x_1 = \frac{1}{C} B(u) \cos Cv$, $x_2 = \frac{1}{C} B(u) \sin Cv$, $x_3 = \frac{1}{C} \int \sqrt{C^2 - B_u^2}\, du$, здесь x_1, x_2, x_3 – декартовы прямоугольные координаты в E^3, $|B_u| < C = \text{const}$.

Литература

1. Гильберт Д. Основания геометрии. – М.; Л.: ОГИЗ, 1948.

2. Blanuša D. Űber die Einbettung hyperbolischer Räume in euklidische Räume // Monatsh. Math. – 1955. – Bd. 59. – № 3. – S. 217–229.

3. Розендорн Э.Р. Реализация метрики $ds^2 = du^2 + f^2(u) dv^2$ в пятимерном евклидовом пространстве // ДАН АРМССР – 1960. – Т. 30. – № 4. – С. 197–199.

4. Оссерман Р. Минимальные поверхности // Успехи матем. наук. – 1967. – Т. 22. – Вып. 4(136). – С. 55–136.

5. Аминов Ю.А. Кручение двумерных поверхностей в евклидовых пространствах // Укр. геометр. сб. – 1974. – Вып.17. – С. 3–14.

6. Кадомцев С.Б. Невозможность некоторых специальных изометрических погружений пространств Лобачевского // Мат. сб. – 1978. – Т. 107. – Вып. 2. – С.175–198.

7. Розендорн Э.Р. К вопросу о погружении двумерных римановых метрик в четырехмерное евклидово пространство // Вестн. МГУ. Сер.1. Математика, механика. – 1979. – № 2. – С. 47–50.

8. Ефимов Н.В. Невозможность в трехмерном евклидовом пространстве полной регулярной поверхности с отрицательной верхней гранью гауссовой кривизны // Докл. АНСССР. – 1963. – Т. 150. – № 6. – С. 1206–1209.

Поступила в редакцию 15 мая 2006 г.

УДК 517.957:539.374.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ ПЛАСТИЧЕСКОГО СЛОЯ С СЕЧЕНИЕМ В ФОРМЕ КОЛЬЦЕВОГО СЕКТОРА[1]

В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина

Исследуется напряженное состояние в зоне пластических деформаций менее прочного, чем основной материал, слоя, имеющего форму кольцевого сектора, расположенного в расширяющемся под действием внутреннего давления кольце из более прочного основного материала, в условиях плоской деформации. Ранее такая задача не изучалась. Приближенным интегрированием системы уравнений пластического равновесия в полярной системе координат при использовании гипотезы разделения переменных для касательных напряжений получены аналитические выражения для компонент тензора напряжений и вычислена предельная нагрузка.

1. Введение и основные допущения. Задача определения напряженного состояния (НС) мягкой прослойки (МП), имеющей форму кольцевого сектора, расположенного в кольце из более прочного основного материала (ОМ), и находящейся под растягивающей нагрузкой в условиях плоской деформации, возникает при исследовании несущей способности продольных сварных соединений труб и других цилиндрических оболочечных конструкций. Такая задача рассматривается впервые, а точные либо приближенные, с оцениваемой погрешностью решения этой задачи, не противоречащие известным экспериментальным данным, в настоящий момент отсутствуют. В какой-то степени близкой по постановке является задача истечения пластического материала из клиновидной полости; известные [1] решения исходят из гипотезы о независимости касательных напряжений от одной из полярных координат (аналог гипотезы Л. Прандтля) что, хотя и позволяет проинтегрировать систему уравнений пластического равновесия, делает модель существенно не адекватной физическому процессу и значительно ограничивает возможности применения такой модели. Построение математических моделей напряженно-деформированного состояния (НДС) пластических сред в большинстве практически важных задач основано на частичном предугадывании внутреннего состояния среды в форме гипотез, формулирующих некоторые соотношения между напряжениями, деформациями, скоростями деформаций, смещениями, скоростями смещений и т.д., или накладывающих какие-то ограничения на соответствующие функции. В работе, при изучении НС МП растягиваемого кольца, материал которой переходит в состояние пластического течения раньше основного материала кольца, принята так называемая мультипликативная гипотеза для касательных напряжений, что позволило найти приближенные аналитические выражения для компонент тензора напряжений в любой момент нагружения во всех точках пластического слоя, вычислить предельную нагрузку и наибольшую толщину слоя, когда соединение (кольцо с мягкой прослойкой) равнопрочно однородному кольцу без мягкой прослойки. Используемый оригинальный подход позволяет свести задачу к исследованию и решению краевых задач для некоторых обыкновенных дифференциальных уравнений и, в результате, получить новые аналитические выражения для компонент тензора напряжений. Предполагается, что в процессе нагружения основной металл деформируется упруго, а при значительных напряжениях участки, расположенные вблизи пластического слоя, вовлекаются в пластическую деформацию. При выводе основных формул материал слоя и основной металл считаются идеально жесткопластическими и удовлетворяющими обычным в таких случаях допущениям [2]. В качестве уравнения пластичности принято условие Мизеса. Полученные результаты переносятся на упрочняемые материалы заменой в условии полной пластичности предела текучести материала слоя на пластическую постоянную, характеризующую момент потери устойчивости процесса пластического деформирования слоя (ПУППД).

[1] Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 05-08-18179-а).

2. Математическая постановка задачи. В односвязной области Ω («сечении мягкого слоя») с кусочно-гладкой границей $A_1BC_1D_1$, где кривые A_1B и C_1D_1 интерпретируются как «контактные» поверхности, а BC_1 и A_1D_1 – как «свободные от нагрузки», требуется найти решение краевой задачи для системы уравнений [2, с.54]

$$\frac{\partial\sigma_\rho}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial\tau_{\rho\theta}}{\partial\theta}+\frac{\sigma_\rho-\sigma_\theta}{\rho}=0; \tag{1}$$

$$\frac{\partial\tau_{\rho\theta}}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial\sigma_\theta}{\partial\theta}+2\frac{\tau_{\rho\theta}}{\rho}=0; \tag{2}$$

$$\sigma_\rho-\sigma_\theta=\pm2\sqrt{1-\left(\tau_{\rho\theta}\right)^2}. \tag{3}$$

Здесь $\sigma_\rho,\sigma_\theta,\tau_{\rho\theta}$ (безразмерные компоненты тензора напряжений) – функции двух переменных ρ и θ, где ρ, θ – полярные координаты точки МП (рис. 1).

Напряжение σ_θ инициировано внешней нагрузкой, напряжение σ_ρ в начальный момент нагружения отсутствует, а затем появляется в МП в результате сдерживающего влияния более прочного ОМ; очевидно: $\sigma_\rho<\sigma_\theta$ в любой момент нагружения, поэтому в (3) следует брать радикал со знаком плюс. Область Ω в работе считается симметричной относительно оси полярных координат ρ, линии AB и CD отрезками прямых, AC и BD - дугами концентрических окружностей с центром в начале координат. В качестве характеристики относительной толщины МП введем величину χ:

$$\chi=\frac{\left(\rho_н+\rho_в\right)\theta_к}{\rho_н-\rho_в}\approx\frac{\theta_к}{\rho_н-1}\approx\frac{2\theta_к}{s}, \tag{4}$$

где $\rho_{н,}\rho_в$ – наружный и внутренний радиусы кольца, $\theta_к$ – значение угла, соответствующего контактной поверхности, s – толщина оболочки (см. рис. 1). Из соображений симметрии ясно, что в процессе деформирования прослойки ось полярных координат переходит сама в себя и содержит неподвижную точку ρ_0 (см. рис. 1):

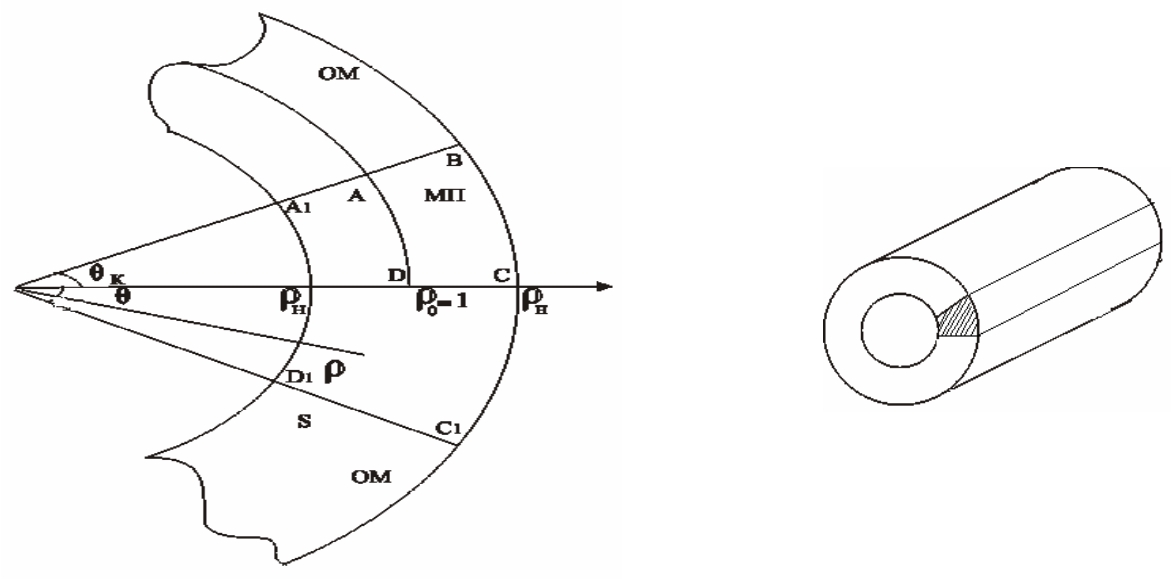


Рис. 1. Фрагмент кольца, содержащего пластический слой, и цилиндрическая оболочка с продольной мягкой прослойкой

Очевидно, выполняются граничные условия

$$\tau_{\rho\theta}\,|_{\rho=\rho_0}=0\,; \tag{5}$$

$$\tau_{\rho\theta}\,|_{\theta=0}=0\,; \tag{6}$$

$$\sigma_\rho\,|_{\rho=\rho_н}=\sigma_\rho\,|_{\rho=\rho_в}=0\,. \tag{7}$$

Для удобства дальнейших рассуждений будем использовать безразмерные координаты, считая $\rho_0=1$. В любой момент нагружения на контактной поверхности AB касательное напряжение $\tau_{\rho\theta}$ возрастает от 0 в точке A до некоторого наибольшего значения a в окрестности точки B:

$$\max_{\rho\in[\rho_в,\rho_н]}\tau_{\rho\theta}\,|_{\theta=\theta_к}=a\,. \tag{8}$$

В работе [3], в случае прямоугольной МП, получена оценка параметра a в момент ПУППД:

$$a=K-1, \tag{9}$$

где K – коэффициент механической неоднородности соединения, равный отношению пластических постоянных ОМ и МП. С точки зрения приложений задачи к исследованию напряженного состояния сварных труб большого диаметра, содержащих в продольном сварном соединении (шве, зоне термического влияния, зоне сплавления) мягкую прослойку, наиболее важным является диапазон значений $K\in[1{,}05;1{,}50]$, что принято в работе. Если угол $\theta_к$ мал, и прослойка по форме близка к прямоугольной, ее НС в окрестности точки B мало отличается от НС прямоугольной прослойки, поэтому оценка (9) применима и в данном случае. Недоопределенность краевой задачи (1)–(3), (5)–(8), как уже было замечено, приводит к необходимости использования, на основе экспериментальных данных, дополнительных гипотез, предугадывающих внутреннее состояние среды, в форме ограничений на классы функций, в которых разыскивается решение. Так, в работах [4; 5] при исследовании НС прямоугольной МП использовалась мультипликативная гипотеза (МГ) для касательных напряжений $\tau_{xy}(x;y)=X(x)Y(y)$, т.е. касательные напряжения, в соответствии с гипотезой, распадаются на произведение двух функций, одна из которых зависит только от *x*, а другая – только от *y*. В работе [5] принималась, как исходная, гипотеза плоских сечений, но было показано, что она по существу приводит к варианту МГ. В данной работе принято аналогичное предположение (МГ):

$$\tau_{\rho\theta}(\rho,\theta)=R(\rho)T(\theta). \tag{10}$$

В некоторой окрестности свободной поверхности (кривой *BC)* решение системы (1)–(3), в силу ее гиперболичности, полностью определяется формой кривой *BC*. Предполагается, что условие (10) имеет место в окрестности линии раздела течения *AD,* дополнительной к указанным приграничным областям. Жесткость условия (10) делает задачу переопределенной и оставляет возможность лишь приближенного решения. Условие (3) в работе заменяется приближенным равенством

$$\sigma_\theta-\sigma_\rho=2\left(1-\mu\left(\tau_{\rho\theta}\right)^2\right). \tag{11}$$

Здесь коэффициент μ определяется из соображений близости кривых (3) и (11) при ограничении (8). Подробности и различные формулы для вычисления коэффициента μ см. в работе [6]. При малых значениях a (a < 0,5) можно, не допуская заметной погрешности, считать μ =0,5.

3. Анализ математических моделей. После умножения обеих частей уравнения (2) на ρ и дифференцирования его по ρ, дифференцирования уравнения (1) по θ, и вычитания полученных уравнений, имеем:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial^2\tau}{\partial\theta^2}-\rho\frac{\partial^2\tau}{\partial\rho^2}+\frac{\partial^2\left(\sigma_\rho-\sigma_\theta\right)}{\partial\rho\partial\theta}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial\left(\sigma_\rho-\sigma_\theta\right)}{\partial\theta}-3\frac{\partial\tau}{\partial\rho}=0; \tag{12}$$

здесь и далее для упрощения записи вместо $\tau_{\rho\theta}$ пишем τ .Подставив (11) в (12), получим:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial^2\tau}{\partial\theta^2}-\rho\frac{\partial^2\tau}{\partial\rho^2}+2\mu\frac{\partial^2\tau^2}{\partial\theta\partial\rho}+2\mu\frac{1}{\rho}\frac{\partial\tau^2}{\partial\theta}-3\frac{\partial\tau}{\partial\rho}=0. \tag{13}$$

Последнее уравнение решается методом разделения переменных, если в (13) подставить выражение для касательных напряжений из (10), и разделить все на RT:

$$\frac{1}{\rho}\frac{T''}{T}-\rho\frac{R''}{R}+8\mu R'T'+\frac{4\mu}{\rho}RT'-3\frac{R'}{R}=0. \tag{14}$$

Возможны три варианта.

Первый случай: τ не зависит от ρ, т.е. $\tau = T(\theta)$, $R = 1$, тогда из (14) получается уравнение:

$$T'' + 4\mu TT' = 0, \tag{15}$$

где дифференцирование ведется по θ. На этом пути получается решение, аналогичное хорошо известному решению Л. Прандтля [7] для тонкой прямоугольной полосы, однако, в отличие от [7], зависимость касательных напряжений по толщине полосы здесь не линейна, а, как следует из уравнения (15) при начальном условии (6), имеет вид:

$$\tau = \begin{bmatrix} -\mathrm{Atg}\left(2\mu A\theta\right), \\ \mathrm{Ath}\left(2\mu A\theta\right), \end{bmatrix} \tag{16}$$

где постоянная A зависит от a. В случае растяжения касательные напряжения возрастают с увеличением угла θ, поэтому в формуле (16) нужно выбрать вариант $\tau = Ath\left(2\mu A\theta\right)$. Аналогичные задачи, в которых τ есть функция от одной независимой переменной, рассматривались в [1].

Второй случай: τ не зависит от θ; тогда $T = 1$, а из (14) получается уравнение:

$$\rho R'' + 3R' = 0, \tag{17}$$

где дифференцирование ведется по ρ, и которое следует решать при начальном условии

$$R\left(\rho_0\right) = 0. \tag{18}$$

Уравнение (17) при условии (18) имеет решение: $R = C\left(\frac{1}{\rho^2} - \frac{1}{\rho_o{}^2}\right)$, откуда получаем:

$$\tau_{\rho\theta} = C_1\left(\frac{1}{\rho^2} - \frac{1}{\rho_o{}^2}\right). \tag{19}$$

Физический процесс, при котором напряженное состояние прослойки в оболочке можно было бы моделировать на основе формулы (19), может быть получен вращением с трением внутренней и наружной поверхностей трубы с различной угловой скоростью.

Третий случай: τ линейно зависит от θ, т.е.

$$\tau = \theta R(\rho). \tag{20}$$

В этом случае уравнение (14) умножением на $R\rho$ сводится к уравнению:

$$\rho^2 R'' - 8\mu\rho R'R + 3R'\rho - 4\mu R^2 = 0.$$

Выполнив в нем замену независимой переменной по формуле

$$\rho = \rho_0 e^t = e^t, \tag{21}$$

получим уравнение:

$$R'' + 8\mu R'R + 3R' + 4\mu R^2 = 0,$$

в котором дифференцирование ведется по переменной t. После замены неизвестной функции по формуле

$$4\mu R = y, \tag{22}$$

это уравнение преобразуется к виду

$$y'' - 2y'y + 3y' - y^2 = 0, \tag{23}$$

а функция y должна удовлетворять, в силу условия (5) и формул (21) и (22), граничному условию:

$$y|_{t=0} = 0. \tag{24}$$

Второе граничное условие, соответствующее значению независимой переменной $\rho = \rho_н$ (либо $\rho = \rho_в$), будет определено позже через параметр a (условие (8)). Пока заметим, что различия в решениях граничной задачи для уравнения (23) и уравнения

$$y'' - 2y'y + 3y' = 0 \tag{25}$$

на отрезке $[0;\ \ t_н]$ незначительны (здесь $t_н = \ln \rho_н$); об этом свидетельствуют численные решения (рис. 2).

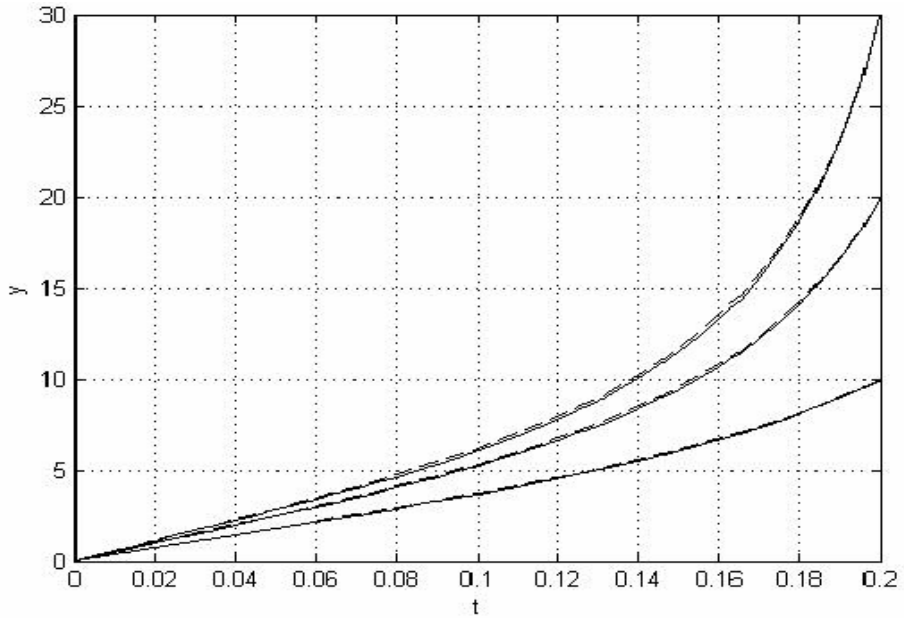


Рис. 2. Интегральные кривые уравнений (25) (сплошная) и (23) (пунктирная) для краевых задач $y|_{t=0} = 0$, $y|_{t=0,2} = y_0$, $y_0 =$ **10; 20; 30**

Это позволяет, не допуская большой ошибки, использовать вместо решений уравнения (23) решения уравнения (25), при условии (24). Рассмотрим технически несколько более удобное уравнение

$$u'' - 2u'u + 2u' = 0, \tag{26}$$

где дифференцирование неизвестной функции u ведется по x. От уравнения (25) к уравнению (26) можно перейти с помощью замен переменных:

$$u = \frac{2}{3} y;\ x = \frac{3}{2} t. \tag{27}$$

Условие (24), очевидно, приобретет вид:

$$u|_{x=0} = 0 \tag{28}$$

Задача (26), (28) решается в явном виде. Пусть

$$u'|_{x=0} = A\,. \tag{29}$$

Тогда

$$u = \begin{cases} A\left(1 - \dfrac{1-A}{1-A+\sqrt{1-A}\,\mathrm{th}\left(\sqrt{1-A}\,x\right)}\right), & A<1; \\ \dfrac{x}{x+1}, & A=1; \\ A\left(1 - \dfrac{A-1}{A-1+\sqrt{A-1}\,\mathrm{tg}\left(\sqrt{A-1}\,x\right)}\right), & A>1. \end{cases} \tag{30}$$

Переходя к переменным y и t по формулам (27), получим из (30) решение уравнения (25) при следующем из (27) и (29) условии

$$y'|_{t=0} = \frac{9}{4} A = B: \tag{31}$$

$$y=\begin{cases}\dfrac{2}{3}B\left(1-\dfrac{\sqrt{2,25-B}}{\sqrt{2,25-B}+1,5\,\mathrm{th}\left(\sqrt{2,25-B}\,t\right)}\right), & B<2,25\ ;\\ \dfrac{9t}{6t+4}, & B=2,25\ ;\\ \dfrac{2}{3}B\left(1-\dfrac{\sqrt{B-2,25}}{\sqrt{B-2,25}+1,5\,\mathrm{tg}\left(\sqrt{B-2,25}\,t\right)}\right), & B>2,25\ .\end{cases} \tag{32}$$

Заметим, что при стремлении параметра B к числу 2,25 первое и третье уравнение совокупности (32) примут вид второго уравнения этой совокупности. Раскладывая функции th и tg в степенной ряд и оставляя только первый член ряда, получим из (32) во всех случаях аппроксимацию Паде типа (1;1) решения $y=y(t)$ задачи (25), (24), (31):

$$y=\frac{Bt}{1+1,5t}. \tag{33}$$

4. Вычисление компонент тензора напряжений. В работе рассмотрен наиболее содержательный третий случай. Возвращаясь к переменным ρ и R по формулам (21) и (22), получим из (33) и (20) (по-прежнему оставляем только первые члены разложений)

$$\tau=\frac{B}{4\mu}\theta\frac{\ln\rho}{1+1,5\ln\rho}=\frac{B}{2\mu}\theta\frac{\rho-1}{3\rho-1}. \tag{34}$$

Для тонкостенных оболочек ошибка в равенстве $3\rho-1=2$ мала: так как $|\rho-1|<\frac{1}{2}s$, то $3\rho-1<2\left(1+\frac{3}{4}s\right)$, и если $s=0,04$, то ошибка не превышает 3%. Это позволяет использовать выражение (34) в упрощенном варианте (с этого момента, в целях упрощения записи, будем предполагать, что $\mu=0,5$):

$$\tau=\frac{B}{2}\theta(\rho-1). \tag{35}$$

Подставив (35) в (1), (2) и (11), и сделав необходимые преобразования, получим систему уравнений для вычисления напряжений σ_ρ и σ_θ, с точностью до неизвестных слагаемых $\varphi(\rho)$, $\psi(\theta)$, C и C_1:

$$\begin{cases}\tau=\dfrac{B}{2}\theta(\rho-1),\\ \sigma_\theta=\dfrac{B\theta^2}{2}\left(1-\dfrac{3}{2}\rho\right)+\varphi(\rho)+C_1,\\ \sigma_\rho=-\dfrac{B}{4}(1-\rho)^2-(2-\rho)^2-\dfrac{B^2\theta^2}{12}(\rho-1)^3+\psi(\theta)+C,\end{cases} \tag{36}$$

со следующими начальными условиями:

$$\begin{aligned}&\varphi(\rho)|_{\rho=1}=0,\\ &\psi(\theta)|_{\theta=0}=0.\end{aligned} \tag{37}$$

Подставляя в равенство (11) выражения для вычисления напряжений из системы (36) и используя условия (37), получим:

$$\begin{cases} \tau = \dfrac{B\theta}{2}\left(\rho - 1\right), \\ \sigma_\theta = \dfrac{B\theta^2}{2}\left(1 - \dfrac{3}{2}\rho\right) - \dfrac{B}{4}\left(1-\rho\right)^2 - \left(2-\rho\right)^2 + C + 2, \\ \sigma_\rho = -\dfrac{B}{4}\left(1-\rho\right)^2 - \left(2-\rho\right)^2 - \dfrac{B^2\theta^2}{12}\left(\rho-1\right)^3 - \dfrac{B\theta^2}{4} + C. \end{cases} \tag{38}$$

Существуют различные подходы для вычисления постоянной C. Можно, предполагая, что уравнения (38) распространяются на весь слой, и, используя принцип Сен-Венана, найти C из уравнения:

$$\int_{-\theta_k}^{\theta_k} \sigma_\rho \,|_{\rho=\rho_н}\, d\theta = 0, \tag{39}$$

утверждающего, что среднеинтегральное значение нормального напряжения σ_ρ равно нулю на свободной поверхности. Этот подход наиболее прост, но дает несколько завышенную оценку для критических напряжений. Применяя (39) и отбрасывая слагаемые порядка 2 и выше относительно S, получим:

$$C = \frac{B}{4}\left(1-\rho_н\right)^2 - \left(2-\rho_н\right)^2 + \frac{\theta_к^2}{3}\left(\frac{B^2\left(\rho_н - 1\right)^3}{12} + \frac{B}{4}\right). \tag{40}$$

Так как в предельном состоянии выполняется условие (8), можно, ссылаясь на (8) и (9), из равенства (35) получить:

$$\frac{B}{2}\theta_к \frac{s}{2} = K - 1. \tag{41}$$

Соотношения (4) и (41) позволяют в равенстве (40) исключить параметры B, $\rho_н$ и $\theta_к$, и записать выражение для постоянной C через основные геометрические и механические характеристики соединения:

$$C = \frac{\left(K-1\right)}{2\chi} + 1 - s + \frac{\left(K-1\right)\chi}{6}, \tag{42}$$

где K – коэффициент механической неоднородности, χ – относительная толщина слоя, s – относительная толщина оболочки.

5. Вычисление предельной нагрузки и условий равнопрочности однородному соединению. Считая, что формулы (38) для вычисления компонент тензора напряжений распространяются на весь слой, вычислим среднее предельное напряжение σ_θ по формуле:

$$\sigma_{ср} = \frac{1}{s}\int_{1-\frac{s}{2}}^{1+\frac{s}{2}} \sigma_\theta \,|_{\theta=\theta_к}\, d\rho = \frac{2}{s}\int_{1}^{1+\frac{s}{2}} \sigma_\theta \,|_{\theta=\theta_к}\, d\rho. \tag{43}$$

Используя выражение для вычисления σ_θ в (38) и формулу (42), получим после интегрирования по формуле (43) и отбрасывания заведомо малых слагаемых:

$$\sigma_{ср} = 2\left(1 + f\left(K,\chi,s\right)\right), \tag{44}$$

$$f\left(K,\chi,s\right) = \frac{K-1}{4\chi} - \frac{\left(K-1\right)\chi}{6} - \frac{s}{2}, \tag{45}$$

где слагаемое f характеризует величину контактного упрочнения МП, возникающего вследствие усложнения НС в МП в процессе ее деформирования. В случае, когда прослойка достаточно тонкая, упрочнение может оказаться настолько большим, что соединение с мягкой прослойкой (его сечение – кольцо с содержащимся в нем кольцевым сектором из менее прочного материала) станет равным по прочности однородному соединению из более прочного материала основной

части кольца. Для вычисления относительной толщины χ_p такой прослойки следует приравнять напряжение σ_{cp} напряжению σ_θ в однородном кольце из более прочного ОМ:

$$\sigma_{cp} = 2K.$$

Используя выражения (44) и (45), из последнего равенства получим уравнение для вычисления $\chi = \chi_p$:

$$\chi^2 + 3\left(2 + \frac{s}{K-1}\right)\chi - \frac{3}{2} = 0.$$

Из его решения

$$\chi_p = \frac{K-1}{4(K-1)+2s} \tag{46}$$

следует, что максимальная относительная толщина равнопрочной МП должна несколько уменьшаться с увеличением относительной толщины кольца (толщины стенки тонкостенной цилиндрической оболочки).

Литература

1. Теория пластических деформаций металлов / Е.П. Унксов, У. Джонсон, В.Л. Колмогоров и др. – М.: Машиностроение. – 1983. – 598 с.

2. Смирнов, В.С. Теория обработки металлов давлением / В.С. Смирнов. – М.: Металлургия, 1973. – 496 с.

3. Дильман, В.Л. Напряженное состояние и прочность неоднородных соединений, содержащие трещиноподобные поверхностные макродефекты на границе твердого и мягкого участков / В.Л. Дильман // Обозрение прикладной и промышленной математики.. – 2002. – Т.9. – Вып. 1. – С. 186–187.

4. Остсемин, А.А. О сжатии пластического слоя двумя шероховатыми плитами / А.А. Остсемин, В.Л. Дильман // Проблемы прочности. – 1990. – № 7. – С.107–113.

5. Дильман, В.Л. Об одной математической модели напряженного состояния пластического слоя при плоской деформации / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 6. – № 6. – С. 19–23.

6. Дильман В.Л. Напряженное состояние и статическая прочность пластичной прослойки при плоской деформации / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Проблемы машиностроения и надежности машин. – 2005. – № 4 – С. 38–48.

7. Прандтль Л. Примеры применения теоремы Генки к равновесию пластических тел /Л. Прандтль // Теория пластичности / Под ред. Ю.Н. Работнова. – М.: ГИИЛ. – 1948. – С. 102–113.

Поступила в редакцию 30 июня 2006 г.

УДК 521.73

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРБИТ КОМЕТ С ФИКСИРОВАННЫМ ПОЛОЖЕНИЕМ АПСИДАЛЬНЫХ ТОЧЕК

Н.Ю. Емельяненко

В работе исследуется кинематика касательного сближения малого тела с Юпитером. Предлагаются две модели комет с фиксированным положением апсидальных точек. Рассматривается возможность, и определяются условия низкоскоростного сближения этих комет с Юпитером. Анализируются особенности сближений модельных комет.

Введение

Рассмотрим апсидальные низкоскоростные сближения кометы и Юпитера с фиксированным положением апсидальных точек. Пусть апсидальные точки удалены от орбиты Юпитера на 1 а.е. и находятся за пределами (линия OA_4) или внутри орбиты Юпитера (линия OP_4). Одна астрономическая единица (1 а.е.) – это радиус сферы сближения в большинстве работ, в которых изучаются прохождения комет вблизи планет-гигантов. Итак в работе рассматриваются кометы, орбиты которых удовлетворяют условию:

$$Q - a' = 1 \bigcup a' - q = 1. \qquad (1)$$

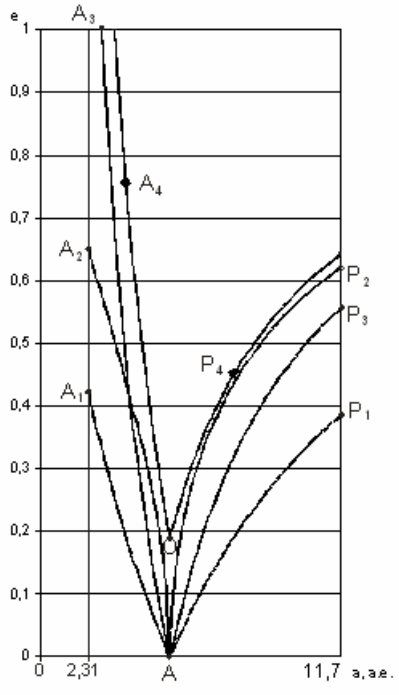


Рис. 1. Область комет с особенностями в сближениях

Нанесём изучаемые орбиты на плоскость (a,e), на которой ранее построена и изучена область комет ω [1–3]. Назовем область с верхней границей A_4OP_4 расширенной областью комет с особенностями в сближениях с Юпитером (ω_{EX}). На плоскости (a,e) эти орбиты образуют ломаную линию A_4OP_4 (рис. 1). Точки Q, X, q, b, I, F – опорные для комет с линии A_4OP_4. Точки M и R – особые.

Более подробное описание обозначений можно найти в работе [4].

В точках низкоскоростного касания орбит M и M′ выполнены условия:

$$\vec{V} \| \vec{V}', \qquad (2)$$

$$V = V'. \qquad (3)$$

Основные задачи исследования. В работе изучаются модельные кометы, орбиты которых расположены на ломаной линии A_4OP_4 области ω_{EX}.

1. Рассматривается эволюция орбит при продвижении вдоль линии A_4OP_4 (изменение элементов, характеризующих размеры и форму орбиты).

2. Оценивается возможность, и определяются условия синхронного движения Юпитера и кометы на периоде обращения вокруг Солнца, отмеченном апсидальным минимумом.

3. Выделяются и описываются возможные особенности сближения с Юпитером модельных комет.

В предлагаемых кинематических моделях низкоскоростных сближений предполагается, что при прохождении афелия (перигелия) комета $A_4(P_4)$ и Юпитер находятся на одном радиус-векторе.

1. Модель A_4 (невозмущенная орбита до и после сближения)

Это кометы, орбиты которых удовлетворяют условию:

$$\mathring{a}=\frac{a'+1}{a}-1, \qquad 3{,}52 \le a \le 5{,}20 \text{ а.е.} \tag{1.1}$$

Они расположены на верхней левой границе области ω_{EX}, линии OA_4. В дальнейшем изложении все эти кометы называются кометой A_4. Для кометы A_4 выполнено равенство:

$$Sb \le r_M < SI, \tag{1.2}$$

то есть на орбите этой кометы имеются две точки низкоскоростного касания орбит M_1 и M_2, расположенные между малой центральной (b_1b_2) и фокальной (I_1I_2) хордами (рис. 2).

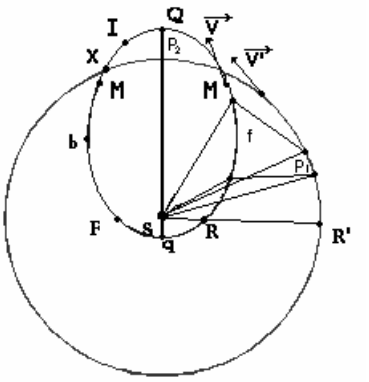


Рис. 2. Наименьшая орбита кометы A_4

Рассмотрим изменения размеров и формы орбит кометы A_4 при продвижении вдоль линии OA_4 области ω_{EX}. Точки O и A_4 на плоскости (a,e) имеют координаты: O (a =5,20 а.е., e = 0,19); A_4 (a =3,52 а.е., e =0,76).

Выразим элементы a, Q, q орбиты кометы A_4 через её эксцентриситет e и большую полуось орбиты Юпитера a':

$$a=\frac{a'+1}{1+e}, \quad Q=a'+1, \quad q=\frac{1-e}{1+e}(a'+1). \tag{1.3}$$

Исследование функций $a = a(e)$, $q = q(e)$ на экстремум показало, что при продвижении вдоль линии OA_4 области ω_{EX} они непрерывно убывают. Приведем элементы орбит наибольшей (точка O) и наименьшей (точка A_4) орбит кометы A_4:

$$A_4^{\max}: \quad a = 5{,}20 \text{ а.е.}, \; Q = 6{,}20 \text{ а.е.}, \; q = 4{,}20 \text{ а.е.}, \; e = 0{,}19. \tag{1.4}$$

$$A_4^{\min}: \quad a = 3{,}52 \text{ а.е.}, \; Q = 3{,}20 \text{ а.е.}, \; q = 0{,}85 \text{ а.е.}, \; e = 0{,}76. \tag{1.5}$$

На орбитах кометы A_4 всегда имеются точки пересечения орбит кометы и Юпитера – опорные точки X_1 и X_2. Точки низкоскоростного касания орбит M_1 и M_2 всегда расположены внутри орбиты Юпитера. В момент времени t_Q комета и Юпитер находятся на одном радиус-векторе. Так как на дуге $\cup M_1QM_2$ модули гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера связаны неравенством $V < V'$, а на дуге $\cup M_2qM_1$ – неравенством $V > V'$, на орбите комет A_4 всегда имеются особые точки R_1 и R_2, при прохождении которых комета и Юпитер еще дважды оказываются на одном радиус-векторе.

На рис. 2 изображена орбита $A_4^{\min}$ – это наименьшая орбита с линии OA_4. Все опорные точки нанесены только на левую часть рисунка. Особая точка R показана на правой его части. Там же приведены кратные минимумы (КМ), подробно рассмотренные в третьей части этой работы.

A_4 – единственная модельная комета из предложенных в наших работах, орбита которой пересекает орбиту Земли (при $e \ge 0{,}72$).

2. Модель P_4 (невозмущенная орбита до и после сближения).

Это кометы, орбиты которых удовлетворяют условию:

$$\text{å}=1-\frac{a'-1}{a}, \quad 5{,}20 \le a \le 7{,}68 \text{ а.е.} \tag{2.1}$$

Они расположены на верхней правой границе области ω_{EX}, линии OP_4. В дальнейшем изложении все эти кометы называются кометой P_4. Для кометы P_4 выполнено равенство:

$$SF < r_M \le Sb, \tag{2.2}$$

то есть на орбите этой кометы имеются две точки низкоскоростного касания орбит M_1 и M_2, расположенные между малой центральной (b_1b_2) и фокальной (F_1F_2) хордами (рис. 3).

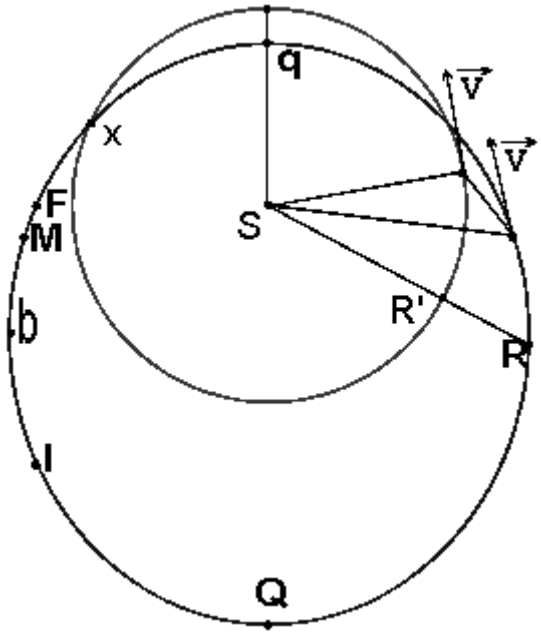


Рис. 3. Наибольшая орбита кометы P_4

Рассмотрим изменения размеров и формы орбит кометы P_4 при продвижении вдоль линии OP_4 области ω_{EX}. Точки O и P_4 на плоскости (a, e) имеют координаты:

O (a = 5,20 а.е., e = 0,19), P_4 (a = 7,68 а.е., e = 0,45).

Выразим элементы a, Q, q орбиты кометы через эксцентриситет e и большую полуось орбиты Юпитера a':

$$Q = \frac{1+e}{1-e}(a'-1),$$
$$a = \frac{a'-1}{1-e}, \tag{2.3}$$
$$q = a'-1.$$

Исследование функций $a = a(e)$, $Q = Q(e)$ на экстремум показало, что при продвижении вдоль линии OP_4 области ω_{EX} они непрерывно возрастают. Приведем элементы орбит наименьшей (точка O) и наибольшей (точка P_4) орбит кометы P_4.

$$P_4^{\min}: \quad \begin{matrix} a = 5{,}20 \text{ а.е.}, \\ Q = 6{,}20 \text{ а.е.}, \\ q = 4{,}20 \text{ а.е.}, \\ e = 0{,}19. \end{matrix} \tag{2.4}$$

$$P_4^{\max}: \quad \begin{matrix} a = 7{,}68 \text{ а.е.}, \\ Q = 11{,}16 \text{ а.е.}, \\ q = 4{,}20 \text{ а.е.}, \\ e = 0{,}45. \end{matrix} \tag{2.5}$$

Особая точка M на орбите кометы $P_4^{\min}$ совпадает с точками b и X; на остальных орбитах линии OP_4 она расположена между точками b и F. На периоде обращения, отмеченном перигелийным минимумом, комета и Юпитер три раза оказываются на одном радиус-векторе. Орбита $P_4^{\min}$ совпадает с орбитой $A_4^{\max}$, но рассматриваются разные модельные сближения: перигелийное у кометы P_4 и афелийное у кометы A_4.

На рис. 3 изображена орбита $P_4^{\max}$. Размещение всех опорных и особых точек совпадает с их размещением на орбите $A_4^{\min}$.

3. Особенности апсидальных сближений комет A_4 и P_4

Начальные условия низкоскоростного сближения (НУ). Найдем условия, необходимые для длительного низкоскоростного сближения кометы $A_4(P_4)$ и Юпитера. Рассмотрим синхронные движения Юпитера и кометы $A_4(P_4)$ на периоде ее обращения вокруг Солнца, отмеченном афелийным (перигелийным) минимумом (см. рис. 1, 2). В рамках решаемой задачи комета $A_4(P_4)$ и

Юпитер движутся по законам Кеплера. Ввиду симметрии движения тел относительно линии апсид опишем движение кометы на дуге $\cup Qq$.

Решения уравнения Кеплера были найдены аналитически в опорных точках и точке М. В табл. 1, 2 приводятся: α – угол между направлениями на комету и Юпитер (α = υ – υ′); r_j – йовицентрическое расстояние кометы; V/V' – отношение модулей гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера в опорных, особых точках, а также в точках минимумов величины r_j. Точки, попадающие в область сближения, отделены жирной ломаной линией. Число таких точек, зависит от эксцентриситета кометной орбиты *e*.

Согласно табл. 1, 2, в момент времени $t_м$ угол между направлениями на комету и Юпитер равен $\alpha_м$. Пусть $\vec{V}_м$ и $\vec{V}_{м'}$ – векторы гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера, соответствующие углу $\alpha_м$, β – угол между направлениями на комету, находящуюся в точке М, и Юпитер, находящийся в точке К, такой, что выполняется равенство (1).

Угол β для комет A_4 и P_4 находился аналитически, а затем табулировался. Сравнение углов $\alpha_м$ и β показывает, что они всегда имеют одинаковый знак и для кометы $A_4(P_4)$ при $0{,}25 \le e \le 0{,}59$ ($0{,}27 \le e \le 0{,}45$) отличаются не более чем на 7°. По мере продвижения вдоль линии орбит OA_4 к точке A_4 расхождения $\Delta = \alpha_м - \beta$ увеличиваются и в точке A_4 $\Delta_{max} = 14°{,}8$; в точке О $\Delta_{max} = 11°{,}2$.

Итак, в момент времени $t_м$ выполнено равенство (2), а равенство (1) выполнено приблизительно, что позволяет говорить о наличии низкоскоростных касательных участков на орбитах комет A_4 и P_4 в окрестностях точек M_1 и M_2.

Апсидальные сближения комет A_4 и P_4 – это длительные низкоскоростные сближения, так как они охватывают несколько опорных точек орбит.

Положения кометы A_4 и Юпитера с углом α_q ($e \le 0{,}27$), α_F ($0{,}28 \le e \le 0{,}43$), между направлениями на эти объекты, соответствующим табличному значению, назовем начальными условиями низкоскоростного касательного сближения кометы A_4. При $0{,}44 \le e \le 0{,}76$ точки M_1 и M_2 не принадлежат области афелийного сближения [5]. Сближения этих комет не будут низкоскоростными.

Положения кометы P_4 и Юпитера с углом α_Q ($e \le 0{,}23$), α_I ($0{,}24 \le e \le 0{,}35$), α_b($0{,}36 \le e \le 0{,}40$), $\alpha_м$($0{,}41 \le e \le 0{,}45$) между направлениями на эти объекты, соответствующим табличному значению, назовем начальными условиями низкоскоростного касательного сближения кометы P_4.

Заметим, что точки низкоскоростного касания орбит M_1 и M_2 принадлежат области сближения кометы P_4 для всех эксцентриситетов табл. 2.

Кратные минимумы (КМ). В работе Емельяненко [4] было показано, что йовицентрическое расстояние кометы в рамках парной задачи двух тел может быть вычислено по формуле:

$$r_j^2 = \left|a' - r\right|^2 + 4ra'\sin^2\frac{\alpha}{2}. \qquad (3.2)$$

Качественный анализ уравнения (3.2) не исключает КМ для комет A_4 и P_4. Минимумы возможны в точках $Q(q)$ и $R(\alpha = 0)$, в точке $X(r = a')$.

Исследование функции r_j на экстремум проводилось в два этапа. Сначала в опорных точках и точке М величина r_j вычислялась по аналитическим формулам (см. табл. 1, 2). Анализ значений r_j^k показал следующее. Для всех орбит кометы $A_4(P_4)$ функция йовицентрического расстояния имеет глобальный минимум в точке $Q(q)$. Затем она возрастает до значения $r_j^м$. После прохождения точки М величина r_j продолжает возрастать у кометы A_4 при $e_p \ge 0{,}48$ (у кометы P_4 при $e_p \ge 0{,}43$) сначала медленно, а затем (после прохождения точки F(I))очень быстро. При $e < e_p$ выполнено неравенство $r_j^м > r_j^b$. Первый этап исследования показал, что сближения кометы модели $A_4(P_4)$ и Юпитера могут сопровождаться вторичными минимумами.

Таблица 1

Значения угла α в опорных точках как функция эксцентриситета орбиты кометы модели A_4

e	r_j^Q	V^Q/V'	α_I	r_j^I	V^I/V'	α_x	r_j^x	V^x/V'	υ_x	$\alpha_{\rho 2}$	$r_j^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	β	α_M	r_j^M	υ_M	α_b	r_j^b	V^b/V'	α_F	r_j^F	V^F/V'	$\alpha_{\rho 3}$	$r_j^{\rho 3}$	$\upsilon_{\rho 3}$	υ_R	r_j^R	r_j^Q
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
0,19	1	0,82	-21,5	1,99	0,96	-22,1	2,00	1,00	79	–	–	–	-10,9	-22,1	2,00	79	-22,1	2,00	1,00	-21,9	1,95	1,04	-0,73	1,03	170	175	1,09	1,04
0,24	1	0,80	-21,3	1,94	0,96	-21,6	1,95	0,98	67	–	–	–	-13,8	-21,7	1,95	72	-21,7	1,93	1,02	-20,5	1,83	1,08	-6,81	1,25	130	150	1,30	1,61
0,27	1	0,78	-21,4	1,94	0,96	-21,5	1,94	0,97	61	–	–	–	-15,6	-21,7	1,94	68	-21,6	1,92	1,03	-19,6	1,79	1,11	-7,67	1,36	120	139	1,44	2,04
e	r_j^Q	V^Q/V'	α_I	r_j^I	V^I/V'	α_x	r_j^x	V^x/V'	υ_x	$\alpha_{\rho 2}$	$r_j^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	β	α_M	r_j^M	υ_M	α_b	r_j^b	V^b/V'	α_F	r_j^F	V^F/V'	$\alpha_{\rho 3}$	$r_j^{\rho 3}$	$\upsilon_{\rho 3}$	υ_R	r_j^R	r_j^Q
0,28	1	0,78	-21,4	1,94	0,96	-21,5	1,94	0,96	60	21,5	1,94	60	-16,1	-21,8	1,94	67	-21,6	1,91	1,04	-19,4	1,78	1,12	-6,83	1,39	120	136	1,49	2,18
e	r_j^Q	V^Q/V'	α_I	r_j^x	V^x/V'	α_x	r_j^I	V^I/V'	υ_x	$\alpha_{\rho 2}$	$r_j^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	B	α_M	r_j^M	υ_M	α_b	r_j^b	V^b/V'	α_F	r_j^F	V^F/V'	$\alpha_{\rho 3}$	$r_j^{\rho 3}$	$\upsilon_{\rho 3}$	υ_R	r_j^R	r_j^Q
0,30	1	0,77	-21,5	1,94	0,95	-21,5	1,94	0,95	57	21,7	1,94	60	-17,3	-21,9	1,95	65	-21,6	1,92	1,04	-18,8	1,77	1,14	-9,72	1,48	110	132	1,58	2,45
0,31	1	0,76	-21,5	1,94	0,95	-21,6	1,94	0,95	55	–	–	–	-17,9	-22,0	1,95	64	-21,6	1,92	1,05	-18,5	1,77	1,15	-9,09	1,51	110	129	1,63	2,57
e	r_j^Q	V^Q/V'	α_I	r_j^x	V^x/V'	α_x	r_j^I	V^I/V'	υ_x	β	α_M	r_j^M	α_b	r_j^b	V^b/V'	υ_M	$\alpha_{\rho 2}$	$r_j^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	α_F	r_j^F	V^F/V'	$\alpha_{\rho 3}$	$r_j^{\rho 3}$	$\upsilon_{\rho 3}$	υ_R	r_j^R	r_j^Q
0,39	1	0,72	-21,9	1,98	0,91	-22,2	1,99	0,93	46	-22,0	-22,9	2,02	-22,6	2,00	1,08	57	18,7	1,88	80	-16,1	1,88	1,26	-10,2	1,83	100	117	1,99	3,45
0,41	1	0,70	-22,1	1,99	0,90	-22,4	2,01	0,92	44	-23,2	-23,2	2,05	-23,8	2,03	1,09	55	18,3	1,92	80	-15,4	1,94	1,29	-9,28	1,91	100	115	2,09	3,62
e	r_1^Q	V^Q/V'	α_I	r_1^x	V^x/V'	α_x	r_1^I	V^I/V'	υ_x	β	α_M	r_1^M	υ_M	$\alpha_{\rho 2}$	$r_1^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	α_b	r_1^b	V^b/V'	$\alpha_{\rho 3}$	$r_1^{\rho 3}$	$\upsilon_{\rho 3}$	α_F	r_1^F	V^F/V'	υ_R	r_1^R	r_1^Q
0,43	1	0,69	-22,3	2,01	0,90	-22,6	2,03	0,91	42	-25,0	-23,6	2,08	54	23,1	2,06	60	-22,7	2,06	1,10	-17,9	1,96	80,0	-14,8	2,00	1,32	113	2,18	3,79
0,46	1	0,67	-22,6	2,04	0,88	-22,9	2,05	0,89	39	-26,8	-24,1	2,13	52	–	–	–	-23,3	2,12	1,11	-17,3	2,04	80,0	-13,9	2,11	1,37	110	2,32	4,01
0,47	1	0,67	-22,7	2,04	0,88	-23,0	2,06	0,89	38	-27,4	-24,3	2,15	51	–	–	–	-23,4	2,14	1,11	-20,6	2,06	70,0	-13,6	2,15	1,39	110	2,36	4,08
0,48	1	0,66	-22,8	2,04	0,89	-23,2	2,07	0,90	38	-28,1	-24,6	2,17	51	–	–	–	-23,6	2,18	1,11	-20,5	2,09	70,0	-13,2	2,19	1,41	109	2,41	4,15
0,54	1	0,62	-23,5	2,12	0,84	-23,5	2,12	0,84	33	-31,9	-26,0	2,28	46	–	–	–	-25,1	2,31	1,14	-19,7	2,24	70,0	-11,3	2,47	1,53	105	2,70	4,49
e	r_1^Q	V^Q/V'	α_I	r_1^I	V^I/V'	α_x	r_1^x	V^x/V'	υ_x	B	α_M	r_1^M	υ_M				α_b	r_1^b	V^b/V'	$\alpha_{\rho 2}$	$r_1^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	α_F	r_1^F	V^F/V'	υ_R	r_1^R	r_1^Q
0,59	1	0,59	-23,8	2,15	0,80	-24,2	2,18	0,82	30	-35,3	-27,4	2,40	43	–	–	–	-26,5	2,44	1,15	-23,7	2,39	60,0	-9,62	2,73	1,66	102	2,94	4,70
0,60	1	0,58	-23,8	2,16	0,79	-24,4	2,20	0,81	29	-36,0	-27,7	2,42	43	–	–	–	-26,9	2,47	1,16	-23,6	2,42	60,0	-9,28	2,78	1,69	101	2,98	4,74
0,61	1	0,57	-23,8	2,17	0,79	-24,5	2,21	0,81	29	-36,7	-28,0	2,45	42	–	–	–	-27,2	2,50	1,16	-23,5	2,45	60,0	-8,94	2,84	1,72	101	3,03	4,78
0,62	1	0,56	-23,8	2,17	0,78	-24,7	2,22	0,80	28	-37,5	-28,3	2,47	41	–	–	–	-27,6	2,53	1,17	-23,4	2,48	60,0	-8,60	2,89	1,75	100	3,08	4,81
0,66	1	0,53	-23,8	2,18	0,74	-25,4	2,28	0,78	26	-40,4	-29,6	2,58	39	–	–	–	-29,1	2,66	1,18	-23,1	2,62	60,0	-7,20	3,12	1,88	98,3	3,28	4,93
0,67	1	0,53	-23,7	2,18	0,73	-25,5	2,30	0,77	25	-41,2	-30,0	2,61	38	–	–	–	-25,5	2,45	1,18	-24,6	2,45	50,0	-6,84	3,18	1,92	97,9	3,33	4,95

e	r_1^Q	V^Q/V'	α_I	r_1^I	V^I/V'	α_x	r_1^x	V^x/V'	υ_x	β	α_M	r_1^M	υ_M	α_b	r_1^b	V^b/V'	$\alpha_{\rho 2}$	$r_1^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	α_F	r_1^F	V^F/V'	υ_R	r_1^R	r_1^Q
0,76	1	0,45	-22,8	2,16	0,63	-27,4	2,46	0,72	20	-48,5	-33,7	2,89	32	-33,9	3,01	1,22	-28,1	2,97	50,0	-3,53	3,72	2,35	93,8	3,79	5,12

Таблица 2

Значения угла α в опорных точках как функция эксцентриситета орбиты кометы модели P_4

e	r_j^q	V^q/V'	α_F	r_j^F	V^F/V'	α_x	r_j^x	V^x/V'	υ_x	β	α_M	r_j^M	υ_M	α_b	r_j^b	V^b/V'	α_I	r_j^I	V^I/V'	α_{ρ_2}	$r_j^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	υ_R	r_j^R	r_j^Q
1	2	3	4	5	6	7	8	9	14	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
0,19	1	1,21	21,9	1,94	1,04	22,1	2,00	1,00	102	11,0	22,2	2,00	101	22,3	2,00	0,99	21,6	1,99	0,97	0,62	1,02	176	175	1,07	0,98
0,23	1	1,23	21,4	1,92	1,03	21,4	1,93	1,02	92	13,2	21,2	1,94	97	20,7	1,94	0,98	18,7	1,86	0,93	6,61	1,26	140	153	1,30	2,05
e	r_j^q	V^q/V'	α_x	r_j^x	V^x/V'	α_F	r_j^F	V^F/V'	υ_x	β	α_M	r_j^M	υ_M	α_b	r_j^b	V^b/V'	α_I	r_j^I	V^I/V'	α_{ρ_2}	$r_j^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	υ_R	r_j^R	r_j^Q
0,24	1	1,24	21,2	1,92	1,03	21,2	1,92	1,03	90	13,8	20,0	1,93	97	20,3	1,92	0,97	17,8	1,82	0,92	4,98	1,28	140	149	1,36	2,44
e	r_j^q	V^q/V'	α_x	r_j^x	V^x/V'	α_F	r_j^F	V^F/V'	υ_x	β	α_M	r_j^M	υ_M	α_b	r_j^b	V^b/V'	α_{ρ_2}	$r_j^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	α_I	r_j^I	V^I/V'	υ_R	r_j^R	r_j^Q
0,32	1	1,28	20,5	1,85	1,08	20,1	1,91	1,02	78	18,0	19,7	1,91	93	15,9	1,85	0,92	10,0	1,74	120	7,28	1,78	0,83	132	1,86	6,53
0,34	1	1,29	20,4	1,84	1,09	19,8	1,92	1,02	76	19,0	19,4	1,92	93	14,4	1,85	0,90	8,19	1,79	120	3,57	1,94	0,80	130	2,02	7,79
0,35	1	1,29	20,4	1,84	1,09	19,7	1,92	1,01	75	19,6	19,3	1,92	93	13,6	1,86	0,90	7,23	1,84	120	1,52	2,06	0,79	130	2,10	8,45
e	r_j^q	V^q/V'	α_x	r_j^x	V^x/V'	α_F	r_j^F	V^F/V'	υ_x	β	α_M	r_j^M	υ_M	α_{ρ_2}	$r_j^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	α_b	r_j^b	V^b/V'	υ_R	r_j^R	α_I	r_j^I	V^I/V'	r_j^Q
0,36	1	1,30	20,3	1,74	1,10	19,6	1,97	1,01	74	20,1	19,2	1,93	92	16,6	1,86	100	12,7	1,88	0,89	129	2,17	-0,7	2,22	0,78	9,12
0,40	1	1,32	20,2	1,83	1,12	19,0	1,95	1,01	71	22,1	18,6	1,96	92	15,0	1,87	100	8,78	2,02	0,86	122	2,29	-11,0	3,18	0,73	12,0

e	r_j^q	V^q/V'	α_x	r_j^x	V^x/V'	υ_x	υ_{ρ_2}	α_{ρ_2}	$r_j^{\rho 2}$	α_F	r_j^F	V^F/V'	β	α_M	r_j^M	υ_M	α_{ρ_3}	$r_j^{\rho 3}$	υ_{ρ_3}	α_b	r_j^b	V^b/V'	υ_R	r_j^R	r_j^I	r_j^Q
0,42	1	1,32	20,2	1,83	1,13	69	70	20,2	1,83	18,8	1,97	1,01	23,1	18,3	1,98	92	14,1	1,83	100	6,45	2,16	0,85	120	2,38	3,88	13,4
0,45	1	1,33	20,2	1,82	1,12	68	70	20,0	1,82	18,4	2,01	0,98	24,6	17,8	2,02	92	12,8	1,92	100	2,43	2,45	0,79	118	2,56	5,23	15,4

Так как эти минимумы вызваны не гравитацией Юпитера, а специфическими размерами и формой кометных орбит, так же как и для кометы $A_2(P_2)$ [6], это – геометрические кратные минимумы (ГКМ) [1, 7].

Для уточнения положения ГКМ на втором этапе работы линейной интерполяцией между всеми опорными точками и точкой М через 10° по истинной аномалии υ кометы $A_4(P_4)$ были вычислены значения величин r_j, α и V/V'. Анализ результатов подтвердил наличие ГКМ у кометы $A_4(P_4)$ при всех значениях их эксцентриситетов. У кометы P_4 по крайней мере еще один минимум попадает в область сближения [5]. То есть, у этой модели в области ω_{EX} всегда есть ГКМ. Сначала ρ_2 находится вблизи точки R, затем он плавно смещается к точке X, а в окрестности точки R появляется третий минимум (см. табл. 2). У кометы A_4 при $e \geq 0{,}46$ ГКМ не принадлежат области сближения. Вторичный минимум кометы A_4 расположен в окрестности точки R при $e \leq 0{,}42$; между точками *b* и F $(0{,}43 \leq e \leq 0{,}76)$. При $0{,}28 \leq e \leq 0{,}30$ имеется очень слабый минимум в окрестности точки X. При $0{,}39 \leq e \leq 0{,}45$ опять появляется дополнительный слабый минимум. Он непрерывно смещается от точки F к точке М и не фиксируется при e > 0,46 (см. табл. 1).

Количественный анализ подтвердил наличие вторичных минимумов у кометы $A_4(P_4)$ в окрестности точки R. В окрестности точки X вторичный минимум обнаружен у кометы P_4 при всех значениях величины *e*. У кометы A_4 очень слабый минимум периодически появляется в окрестностях точек X, F, M.

Временный спутниковый захват (ВСЗ). Как уже было сказано ранее, у кометы $A_4(P_4)$ в окрестностях особых точек M_1 и M_2 выполнено условие (2) и приблизительно выполнено условие (1). Поэтому окрестности этих точек благоприятны для возникновения ВСЗ. У модельных комет оно возникает и за пределами области сближения (при $e > 0{,}46$), так как разность углов $\alpha_м - \beta \leq 11°$ для $0{,}19 \leq e \leq 0{,}67$(комета A_4); для $0{,}19 \leq e \leq 0{,}52$ (комета P_4). Окрестности апсидальных точек неблагоприятны для возникновения ВСЗ. В точке *Q* кометы A_4 (точке *q* кометы P_4) выполнено условие (1), но условие (2) сильно нарушается. Явление ВСЗ никогда не перейдет в ВГЗ (временный гравитационный захват), так как йовицентрическое расстояние комет в течение всего сближения слишком велико (см. значения r_j^Q, r_j^q, $r_j^м$ в табл. 1, 2). Йовицентрические траектории представляют собой замысловатые петли, вызванные изменением гелиоцентрической скорости (комета то догоняет Юпитер, то отстает от него). У кометы A_4 (P_4) при $e \leq 0{,}45$ кратные минимумы функции йовицентрического расстояния, не связанные с обращением кометы вокруг Юпитера принадлежат области апсидального сближения [6].

Заключение

Итак, сближения комет A_4, P_4 и Юпитера, удовлетворяющие начальным условиям, рассмотренным выше, – это низкоскоростные сближения. Особенности сближений:

1.Сближения комет A_4 и P_4 могут быть длительными. Для кометы A_4 сближение охватывает весь период ее обращения вокруг Солнца ($e \leq 0{,}27$); распространяется на дугу $\cup F_1QF_2$ ($e \leq 0{,}43$). Для остальных объектов с линии OA_4 комета не покидает области сближения на полупериоде, включающем афелий. Для кометы P_4 оно охватывает весь период ее обращения вокруг Солнца ($e \leq 0{,}23$); распространяется на дугу $\cup I_1qI_2$ ($e \leq 0{,}40$).Для остальных объектов с линии OP_4 комета не покидает области сближения на дуге $\cup M_1qM_2$.

2. Функция йовицентрического расстояния комет A_4 и P_4 имеет кратные минимумы. Глобальный минимум достигается в апсидальной точке: $\rho \equiv Q \cap \rho \equiv q$. Вторичные минимумы – это геометрические кратные минимумы. Они имеют место в окрестностях точек пересечения орбит кометы и Юпитера и (или) в окрестностях точек, в которых комета и Юпитер находятся на одном радиус-векторе. ГКМ принадлежат области сближения комет A_4 и P_4 при $e \leq 0{,}45$.

3. На орбитах комет A_4 и P_4 имеются две точки низкоскоростного касания орбит. Для комет с линии OA_4 точка М принадлежит области сближения при $e \leq 0{,}37$. Точки M_1 и M_2 – это центры низкоскоростных касательных участков, на которых вероятен временный спутниковый захват в смысле Эверхарта. На участках ВСЗ расположен максимум функции йовицентрического расстояния комет. ВСЗ модельных комет A_4 и P_4 не может перейти во временный гравитационный захват, так как во всех минимумах комета находится слишком далеко от Юпитера. ВСЗ комет A_4

и P_4 не может быть длительным, так как условия (1, 2) быстро нарушаются до и после прохождения кометой точки М.

Работа поддержана грантом РФФИ № 06–02–16–512.

Литература

1. Емельяненко Н.Ю. Кинематика низкоскоростных сближений комет с Юпитером. Модели орбит // Всерос. астр. конф. (ВАК-2001). СПбГУ. Тезисы докладов. – 2001. – С. 63.

2. Емельяненко Н.Ю. Короткопериодические кометы с высоким значением постоянной Тиссерана. 3. Кинематика низкоскоростных сближений // Астрономический вестник. − 2003. – Т. 37. – №1. – С. 66– 73.

3. Емельяненко Н.Ю. Моделирование орбит комет // Вестник ЮУрГУ, серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 4. – №8(24) – С. 99–106.

4. Емельяненко Н.Ю. Модели комет с неафелийным касанием орбиты Юпитера. Апсидальные точки расположены на орбите Юпитера // Вестник ЮУрГУ, серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 6. – №6(46). – С. 45–52.

5. Емельяненко Н.Ю. Динамика орбит комет при тесном сближении с Юпитером. Анализ длительности сближений // Астрономический вестник. – 2003. – Т. 37. – №2. – С. 153–160.

6. Емельяненко Н.Ю. Модели низкоскоростных сближений комет с Юпитером // Кинематика и физика неб. тел. – 2003. – № 4. – С. 113–116.

7. Емельяненко Н.Ю. Низкоскоростные сближения наблюдаемых комет с Юпитером // Всерос. астр. конф. (ВАК-2004). МГУ. ГАИШ. Тезисы докладов. – 2004. – С. 226.

Поступила в редакцию 22 мая 2006 г.

УДК 521.73

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРБИТ КОМЕТ С ФИКСИРОВАННЫМ ПОЛОЖЕНИЕМ ТОЧЕК НИЗКОСКОРОСТНОГО КАСАНИЯ

Н.Ю. Емельяненко

В работе исследуется кинематика касательного сближения малого тела с Юпитером. В рамках парной задачи двух тел (Солнце-Юпитер, Солнце-комета) предлагаются две модели комет, у которых точки низкоскоростного касания их орбит с орбитой Юпитера расположены на фокальной хорде. Рассматривается возможность, и определяются условия низкоскоростного сближения этих комет с Юпитером. Анализируются особенности сближений модельных комет.

Введение

Работа продолжает исследование кинематики апсидальных сближений. Необходимые сведения о низкоскоростных сближениях, введённых определениях, обозначениях и области ω (орбит комет с особенностями в сближениях с Юпитером) можно найти в работах Емельяненко [1–4].

Основные задачи исследования

В работе изучаются модельные кометы, орбиты которых расположены на ломаной линии A_2AP_2 области ω [3].

1. Рассматривается эволюция орбит при продвижении вдоль линии A_2AP_2 (изменение элементов, характеризующих размеры и форму орбиты).

2. Оценивается возможность и определяются условия синхронного движения Юпитера и кометы на периоде обращения вокруг Солнца, отмеченном апсидальным минимумом.

3. Выделяются и описываются возможные особенности сближения с Юпитером модельных комет.

В предлагаемых кинематических моделях низкоскоростных сближений предполагается, что при прохождении афелия (перигелия) комета $A_2(P_2)$ и Юпитер находятся на одном радиус-векторе.

Введём на эллиптической орбите кометы опорные точки Q, X, q, b, I, F и нанесём их на рисунки орбит рассматриваемых моделей (рис. 1, 2). Парная точка X – это точка пересечения орбит кометы и Юпитера. Остальные точки подробно описываются в работе Емельяненко [4].

Точки M и M′ – точки низкоскоростного касания орбит, в них векторы гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера равны:

$$\vec{V} \parallel \vec{V}' \qquad (1)$$

$$V=V', \qquad (2)$$

где V, V′ – абсолютные величины векторов $\vec{V}$, $\vec{V}'$. Равенство (1) означает коллинеарность и одинаковую направленность векторов.

Пусть $\vec{V}_j$ и V_j – вектор йовицентрической скорости кометы и его модуль; r_k, r_j^k, V^k, υ_k α_k (k = Q, X, M, I, b, F, R) – радиус-вектор гелиоцентрической и йовицентрической орбиты, модуль вектора её гелиоцентрической скорости, истинная аномалия и угол между направлениями на комету и Юпитер в опорных или особых (M,R) точках; t_k – момент прохождения кометой этих точек.

1. Модель A_2 (невозмущенная орбита до и после сближения).

Это кометы, орбиты которых удовлетворяют условию:

$$e=\sqrt{\frac{a'-a}{a'+a}}, \qquad 3{,}52 \le a \le 5{,}20 \text{ а.е.} \qquad (1.1)$$

Они расположены на верхней левой границе области ω, линии AA_2. В дальнейшем изложении все эти кометы называются A_2. Для кометы A_2 выполнено равенство:

$$r_м = SI, \qquad (1.2)$$

то есть на орбите этой кометы имеются две точки низкоскоростного касания орбит M_1 и M_2, расположенные на хорде, проходящей через мнимый фокус эллиптической орбиты кометы симметрично относительно линии апсид (рис. 1).

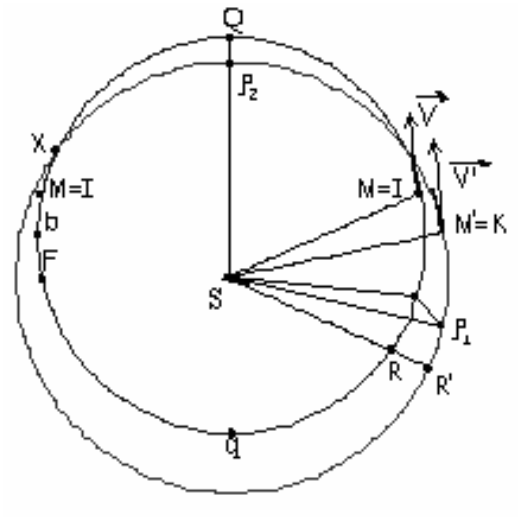


Рис. 1. Орбита кометы A_2 с наибольшим афелийным расстоянием

Рассмотрим изменения размеров и формы орбит кометы A_2 при продвижении вдоль линии AA_2 области ω. Точка А соответствует круговой орбите Юпитера радиуса $a' = 5{,}20$ а.е. Точка A_2 на плоскости *(a.e)* имеет координаты: $a = 3{,}52$ а.е., $e = 0{,}44$. Выразим элементы a, Q, q орбиты кометы через эксцентриситет e и большую полуось орбиты Юпитера a':

$$a = \frac{1-e^2}{1+e^2}a', \quad Q = \frac{1+e_k-e^2-e^3}{1+e^2}a', \quad q = \frac{1-e-e^2+e^3}{1+e^2}a'. \qquad (1.3)$$

Исследование функций $a = a(e)$, $q = q(e)$ на экстремум показало, что при продвижении вдоль линии орбит AA_2 области ω они непрерывно убывают от значений, совпадающих с радиусом круговой орбиты Юпитера (a') до наименьших, достигаемых в точке A_2. Функция $Q = Q(e)$ имеет экстремум – максимум: $Q^{max}(e = 0{,}21) = 5{,}76$ а.е., а затем непрерывно убывает до наименьшего значения $Q^{min}(e = 0{,}44) = 5{,}06$ а.е., достигаемого в точке A_2. Приведем элементы орбит двух комет с линии AA_2:

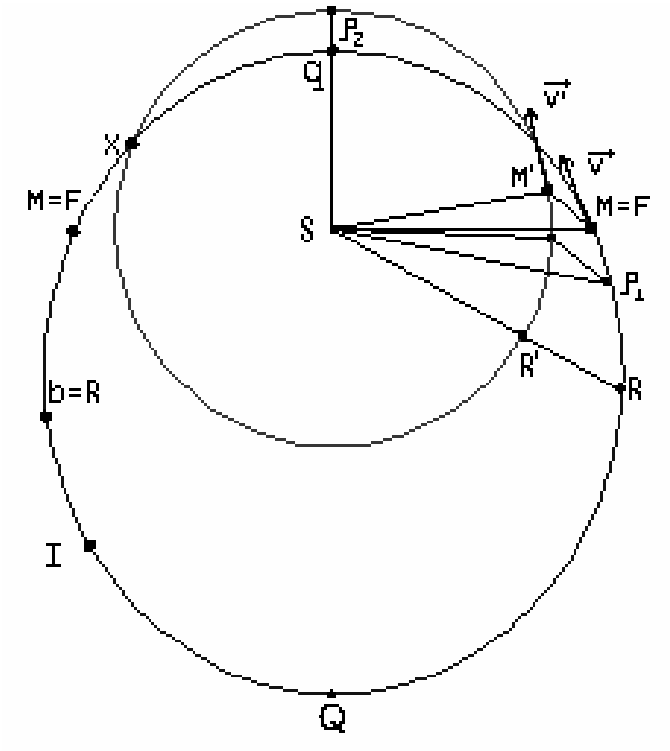


Рис. 2. Орбита кометы P_2 с наименьшим перигелийным расстоянием

$$A_2^{max}: \quad \begin{matrix} a = 4{,}77 \text{ а.е.}, \\ Q = 5{,}76 \text{ а.е.}, \\ q = 3{,}79 \text{ а.е.}, \\ e = 0{,}21. \end{matrix} \qquad (1.4)$$

$$A_2^{min}: \quad \begin{matrix} a = 3{,}52 \text{ а.е.}, \\ Q = 5{,}06 \text{ а.е.}, \\ q = 1{,}98 \text{ а.е.}, \\ e = 0{,}44. \end{matrix} \qquad (1.5)$$

Как видим, это существенно разные орбиты. При $e \le 0{,}41$ афелий кометы находится за пределами орбиты Юпитера. На орбитах таких комет имеются точки пересечения орбит кометы и Юпитера X_1 и X_2. При $e > 0{,}41$ орбита кометы находится внутри орбиты Юпитера. Все орбиты кометы A_2 имеют две пары особых точек. Точки низкоскоростного касания M_1 и M_2 всегда расположены внутри орбиты Юпитера. В момент времени t_Q комета и Юпитер находятся на одном радиус-векторе. Так как на дуге $\cup M_1QM_2$ модули гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера связаны неравенством $V<V'$, а на дуге $\cup M_2qM_1$ – неравенством $V>V'$, на орбите кометы A_2 всегда имеют-

ся особые точки R_1 и R_2, при прохождении которых комета и Юпитер еще дважды оказываются на одном радиус-векторе.

На рис. 1 изображена орбита A_2^{max} – это орбита с наибольшим афелийным расстоянием. Все опорные точки нанесены только на левую часть рисунка. Особая точка R изображена на правой его части. Там же показаны кратные минимумы (КМ), подробно рассмотренные в третьей части этой работы.

2. Модель P_2 (невозмущенная орбита до и после сближения)

Это кометы, орбиты которых удовлетворяют условию:

$$e = \sqrt{\frac{a-a'}{a+a'}}, \qquad 5{,}20 < a \le 7{,}68 \text{ а.е.} \tag{2.1}$$

Они расположены на верхней правой границе области ω, линии AP_2. В дальнейшем изложении все эти кометы называются кометой P_2. Для кометы P_2 выполнено равенство:

$$r_M = SF, \tag{2.2}$$

то есть на орбите этой кометы имеются две точки низкоскоростного касания орбит M_1 и M_2, расположенные на фокальной хорде.

Рассмотрим изменения размеров и формы орбит кометы P_2 при продвижении вдоль линии AP_2 области ω. Точка P_2 соответствует круговой орбите Юпитера радиуса $a' = 5{,}20$ а.е. Точка P_2 на плоскости (a, e) имеет координаты: $a = 7{,}68$ а.е., $e = 0{,}44$.Выразим элементы a, Q, q орбиты кометы через эксцентриситет e и большую полуось орбиты Юпитера a':

$$\begin{aligned} a &= \frac{1+e^2}{1-e^2}a', \\ Q &= \frac{1+e^2}{1-e}a', \\ q &= \frac{1+e^2}{1+e}a'. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Исследование функций $a = a(e)$, $Q = Q(e)$ на экстремум показало, что при продвижении вдоль линии орбит AP_2 области ω они непрерывно возрастают от значений, совпадающих с радиусом круговой орбиты Юпитера (a') до наибольших, достигаемых в точке P_2. Функция $q = q(e)$ имеет экстремум – минимум, но в пределах указываемой точности он совпадает с её значением в точке P_2.

На всех орбитах кометы P_2 имеются опорные точки X_1 и X_2. Точка перигелия q всегда расположена внутри, а точка афелия Q – за пределами орбиты Юпитера. Особые точки M_1 и M_2 совпадают с концами фокальной хорды и находятся за пределами орбиты Юпитера. Так же как и комета A_2, комета P_2 три раза оказывается на одном радиус-векторе с Юпитером (в точках R_1, q, R_2).

Приведем элементы наибольшей орбиты кометы P_2:

$$P_2^{max}: \quad \begin{aligned} a &= 7{,}68 \text{ а.е.}, \\ Q &= 11{,}06 \text{ а.е.}, \\ q &= 4{,}30 \text{ а.е.}, \\ e &= 0{,}44. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Орбита P_2^{max} изображена на рис. 2. Размещение на рисунке опорных, особых и точек минимумов совпадает с их размещением для кометы A_2^{max}.

3. **Особенности апсидальных сближений комет A_2 и P_2**

Начальные условия низкоскоростного сближения (НУ)

Найдем условия, необходимые для длительного низкоскоростного сближения кометы $A_2(P_2)$ и Юпитера. Рассмотрим синхронные движения Юпитера и кометы $A_2(P_2)$ на периоде ее обращения вокруг Солнца, отмеченном афелийным (перигелийным) минимумом (см. рис. 1, 2). В рамках решаемой задачи комета $A_2(P_2)$ и Юпитер движутся по законам Кеплера. Ввиду симметрии движения тел относительно линии апсид опишем движение комет на дуге $\cup Qq$.

Из уравнений Кеплера (см. [3]) определим угол α:

$$\alpha = \left| \upsilon - \left(E \pm e \sin E \right) \left(\frac{a}{a'} \right)^{\frac{3}{2}} \right| \qquad (3.1)$$

(величины E, υ отсчитываются от точки афелия для кометы A_2 и от точки перигелия для кометы P_2).

Как уже было сказано ранее, все углы уравнения (3.1) в опорных точках и точке M определяются аналитически, как функции эксцентриситета кометной орбиты. Решение уравнения Кеплера полностью определяет движение кометы в задаче двух тел. Оно было найдено в опорных точках и точке M. В табл. 1, 2 приводятся: α – угол между направлениями на комету и Юпитер ($\alpha = \upsilon - \upsilon'$); r_j – йовицентрическое расстояние кометы; V/V' – отношение модулей гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера в опорных, особых точках, а также в точках минимумов величины r_j.

В работе Емельяненко [5] было показано, что областью низкоскоростного сближения является сфера радиусом в 2 а.е., в таблицах точки, попадающие в область сближения, отделены жирной ломаной линией. Число таких точек зависит от эксцентриситета кометной орбиты *e*.

Согласно таблицам 1, 2, в момент времени $t_м$ угол между направлениями на комету и Юпитер равен $\alpha_м$. Пусть $\vec{V}_м$ и $\vec{V}_{м'}$ – векторы гелиоцентрических скоростей кометы и Юпитера, соответствующие углу $\alpha_м$, β – угол между направлениями на комету, находящуюся в точке M, и Юпитер, находящийся в точке K, такой, что выполняется равенство (1).

Угол β для комет A_2 и P_2 находился аналитически, а затем табулировался. Сравнение углов $\alpha_м$ и β показывает, что они всегда имеют одинаковый знак и для кометы $A_2(P_2)$ при $e \le 0{,}29$ ($e \le 0{,}42$) отличаются не более чем на 5°. По мере продвижения вдоль линии орбит $AA_2(AP_2)$ к точке $A_2(P_2)$ расхождения $\Delta = \alpha_м - \beta$ увеличиваются и в точке A_2 $\Delta_{max} = 12°{,}2$ (в точке P_2 $\Delta_{max} = 7°{,}5$).

Итак, в момент времени $t_м$ выполнено равенство (2), а равенство (1) выполнено приблизительно, что позволяет говорить о наличии низкоскоростных касательных участков на орбитах комет A_2 и P_2 в окрестностях точек M_1 и M_2.

Апсидальные сближения комет A_2 и P_2 – это длительные низкоскоростные сближения, так как они охватывают несколько опорных точек орбит.

Положения кометы A_2 и Юпитера с углом α_q ($e \le 0{,}19$), α_F ($0{,}20 \le e \le 0{,}39$), $\alpha_в$ ($0{,}40 \le e \le 0{,}44$) между направлениями на эти объекты, соответствующим табличному значению, назовем начальными условиями низкоскоростного касательного сближения кометы.

Положения кометы P_2 и Юпитера с углом α_Q ($e \le 0{,}17$), α_I ($0{,}18 \le e \le 0{,}36$), $\alpha_в$($0{,}37 \le e \le 0{,}40$), $\alpha_м$($0{,}41 \le e \le 0{,}44$) между направлениями на эти объекты, соответствующим табличному значению, назовем начальными условиями низкоскоростного касательного сближения кометы P_2.

Заметим, что точки низкоскоростного касания орбит M_1 и M_2 принадлежат области сближения комет A_2 и P_2 для всех эксцентриситетов в табл. 1, 2.

Кратные минимумы (КМ)

В работе Емельяненко [4] было показано, что йовицентрическое расстояние кометы в рамках парной задачи двух тел может быть вычислено по формуле:

$$r_j^2 = \left| a' - r \right|^2 + 4ra' \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \qquad (3.2)$$

Качественный анализ уравнения (3.2) не исключает КМ для комет A_2 и P_2. Минимумы возможны в точках Q(q) и R($\alpha = 0$), в точке X($r = a'$).

Исследование функции r_j на экстремум проводилось в два этапа. Сначала в опорных точках и точке M величина r_j вычислялась по аналитическим формулам (см. табл. 1, 2). Анализ значений r_j^k показал следующее. Для всех орбит кометы $A_2(P_2)$ функция йовицентрического расстояния имеет глобальный минимум в точке Q(q). Затем она возрастает до значения $r_j^м$. После прохождения точки M величина r_j продолжает возрастать у кометы A_2 при $e_p \ge 0{,}27$ (у кометы P_2 при $e_p \ge 0{,}34$) сначала медленно, а затем (после прохождения точки F(I)) очень быстро. При $e < e_p$ выполнено неравенство $r_j^м > r_j^в$. Сближения кометы модели $A_2(P_2)$ и Юпитера могут сопровождаться

Таблица 1

Значения угла α в опорных точках как функция эксцентриситета орбиты кометы модели A_2

e	r_1^Q	V^Q/V'	α_x	r_1^x	V^x/V'	β	α_M	r_1^M	υ_M	α_b	r_1^b	V^b/V'	α_F	r_1^F	V^F/V'	α_{F2}	$r_1^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	υ_R	r_1^R	V^R/V'	α_q	r_1^q	V^q/V'
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
0,01	0,05	0,99	-1,12	0,1	1	-0,57	-1,12	0,1	89	-1,12	0,1	1	-1,12	0,10	1	-0,08	0,05	170	176	0,05	1,01	0,05	0,05	1,01
0,10	0,41	0,91	-8,69	0,79	0,99	-5,71	-8,72	0,79	79	-8,64	0,78	1,01	-8,44	0,77	1,02	-2,33	0,50	130	145	0,54	1,10	5,32	0,76	1,12
0,20	0,56	0,85	-11,9	1,08	0,96	-11,3	-12,2	1,10	67	-11,5	1,08	1,04	-10,0	1,04	1,08	-3,26	0,93	110	120	1,01	1,18	20,4	2,09	1,27
0,22	0,56	0,84	-11,9	1,08	0,95	-12,4	-12,3	1,12	65	-11,4	1,10	1,05	-9,45	1,07	1,10	-5,70	0,99	100	115	1,09	1,20	24,3	2,39	1,31
e	r_1^Q	V^Q/V'	α_x	r_1^x	V^x/V'	β	α_M	r_1^M	υ_M	$\alpha_{\rho 2}$	$r_1^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	r_1^b	r_1^F	α_F	$\alpha_{\rho 3}$	$r_1^{\rho 3}$	$\upsilon_{\rho 3}$	υ_R	r_1^R	V^R/V'	α_q	r_1^q	V^q/V'
0,23	0,55	0,83	-11,9	1,08	0,94	-12,9	-12,3	1,12	64	70	-12	1,10	1,10	1,08	-9,07	-11,8	1,10	100	113	1,14	1,20	26,4	2,55	1,33
0,24	0,55	0,83	-11,8	1,07	0,94	-13,5	-12,2	1,12	63	70	-12	1,10	1,11	1,10	-8,61	-11,7	1,10	100	111	1,18	1,21	28,6	2,70	1,35
0,25	0,54	0,82	-11,6	1,06	0,93	-14,0	-12,2	1,12	62	70	-11	1,10	1,12	1,12	-8,09	-10,1	1,10	80	109	1,22	1,22	30,8	2,86	1,37
0,27	0,51	0,82	-11,2	1,02	0,92	-15,1	-11,9	1,11	60	60	-12	1,10	1,12	1,17	-6,84	-9,10	1,12	80	105	1,3	1,23	35,4	3,16	1,42
e	r_1^Q	V^Q/V'	α_x	r_1^x	V^x/V'	β	α_M	r_1^M	υ_M	$\alpha_{\rho 2}$	$r_1^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	α_b	r_1^b	V^b/V'	α_F	r_1^F	V^F/V'	υ_R	r_1^R	V^R/V'	α_q	r_1^q	V^q/V'
0,29	0,47	0,81	-10,6	0,96	0,90	-16,2	-11,5	1,09	58	-11,2	1,08	60	-9,65	1,14	1,09	-5,33	1,25	1,18	101	1,38	1,24	40,2	3,47	1,47
e	r_1^Q	V^Q/V'	α_x	r_1^x	V^x/V'	β	α_M	r_1^M	υ_M	$\alpha_{\rho 2}$	$r_1^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	α_b	r_1^b	V^b/V'	α_F	r_1^F	V^F/V'	υ_R	r_1^R	V^R/V'	α_q	r_1^q	V^q/V'
0,30	0,44	0,80	-10,3	0,93	0,9	-16,9	-11,2	1,08	57	-10,8	1,08	60	-9,22	1,15	1,09	-4,48	1,30	1,20	99	1,42	1,25	42,7	3,61	1,49
0,34	0,32	0,79	-8,38	0,76	0,86	-18,8	-9,98	1,04	52	-	-	-	-7,15	1,22	1,12	-0,49	1,56	1,26	91	1,57	1,27	52,9	4,17	1,60
e	r_1^Q	V^Q/V'	α_x	r_1^x	V^x/V'	β	α_M	r_1^M	υ_M	$\alpha_{\rho 2}$	$r_1^{\rho 2}$	$\upsilon_{\rho 2}$	α_b	r_1^b	V^b/V'	υ_R	r_1^R	V^R/V'	α_F	r_1^F	V^F/V'	α_q	r_1^q	V^q/V'
0,35	0,29	0,78	-7,79	0,71	0,85		-9,61	1,04	51	-	-	-	-6,55	1,25	1,13	88	1,59	1,27	0,65	1,64	1,28	55,6	4,3	1,63
0,39	0,12	0,77	-4,70	0,43	0,80	-21,3	-7,93	1,03	47	-	-	-	-3,89	1,41	1,17	76	1,63	1,25	5,69	2,00	1,36	66,4	4,77	1,76
0,41	0,02	0,77	-1,93	0,17	0,77	-22,3	-7,01	1,05	45	-	-	-	-2,42	1,51	1,18	71	1,65	1,23	8,48	2,20	1,4	71,8	4,98	1,83
0,44	-0,14	0,76	-	-	-	-19,8	-5,55	1,10	42	-	-	-	-0,08	1,69	1,22	64	1,69	1,22	13,0	2,52	1,48	80,0	5,24	1,95

Таблица 2

Значения угла α в опорных точках как функция эксцентриситета орбиты кометы модели P_2

e	r_J^q	V^q/V'	α_X	r_J^X	V^X/V'	β	α_M	r_J^M	α_b	r_J^b	V^b/V'	α_I	r_J^I	V^I/V'	α_{ρ_2}	$r_J^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	υ_R	r_J^R	V^R/V'	α_Q	r_J^Q	V^Q/V'
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
0,01	0,05	1,01	1,12	0,10	1,00	0	1,12	0,10	1,12	0,10	1,00	1,12	0,10	1,00	0,08	0,05	170	176	0,05	0,99	-0,05	0,05	0,99
0,06	0,28	1,05	5,97	0,54	1,00	3,44	5,97	0,54	5,94	0,54	1,00	5,88	0,54	0,99	0,87	0,32	150	159	0,33	0,94	-1,95	0,40	0,94
0,11	0,46	1,10	9,76	0,88	1,01	6,28	9,72	0,89	9,52	0,88	0,99	9,17	0,87	0,98	1,52	0,57	140	147	0,60	0,90	-6,65	0,96	0,89
0,17	0,63	1,15	13,1	1,19	1,03	9,63	13,0	1,20	12,3	1,18	0,97	10,9	1,14	0,94	2,96	0,86	130	138	0,92	0,87	-16,3	2,06	0,82
0,22	0,73	1,19	15,1	1,37	1,05	12,4	14,8	1,40	13,2	1,36	0,95	10,3	1,29	0,91	1,31	1,16	130	132	1,20	0,85	-28,2	3,44	0,76

e	r_J^q	V^q/V'	α_X	r_J^X	V^X/V'	υ_x	β	α_M	r_J^M	α_b	r_J^b	V^b/V'	α_{ρ_2}	$r_J^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	α_I	r_J^I	V^I/V'	υ_R	r_J^R	V^R/V'	α_Q	r_J^Q
0,27	0,81	1,22	16,6	1,50	1,07	74	15,0	16,0	1,55	12,9	1,50	0,93	7,30	1,45	120	7,2	1,45	0,86	129	1,51	0,83	-44,1	5,33
0,29	0,83	1,24	17,0	1,54	1,07	73	16,1	16,3	1,60	12,4	1,55	0,92	10,9	1,52	110	5,2	1,57	0,85	128	1,65	0,83	-51,8	6,25

e	r_J^q	V^q/V'	α_X	r_J^X	V^X/V'	υ_x	β	α_M	r_J^M	α_{ρ_2}	$r_J^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	$\alpha_в$	$r_J^в$	$V^в/V'$	α_{ρ_3}	$r_J^{\rho 3}$	υ_{ρ_3}	α_I	r_J^I	V^I/V'	υ_R	r_J^R
0,30	0,84	1,25	17,2	1,55	1,08	73	16,6	16,4	1,62	13,9	1,56	100	12,0	1,57	0,91	10,74	1,55	110	4,02	1,64	0,83	127	1,73
0,32	0,86	1,26	17,5	1,58	1,09	71	17,6	16,6	1,66	13,6	1,59	100	11,1	1,63	0,90	10,33	1,62	110	1,23	1,85	0,83	127	1,88

e	r_J^q	V^q/V'	α_X	r_J^X	V^X/V'	υ_x	β	α_M	r_J^M	α_{ρ_2}	$r_J^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	$\alpha_в$	$r_J^в$	$V^в/V'$	α_{ρ_3}	$r_J^{\rho 3}$	υ_{ρ_3}	υ_R	r_J^R	V^R/V'	α_I	r_J^I
0,33	0,87	1,26	17,6	1,59	1,09	71	18,1	16,6	1,68	13,5	1,61	100	10,6	1,66	0,90	10,11	1,66	110	126	1,95	0,81	-0,38	1,98

e	r_J^q	V^q/V'	α_X	r_J^X	V^X/V'	υ_x	α_{ρ_2}	$r_J^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	β	α_M	r_J^M	α_{ρ_3}	$r_J^{\rho 3}$	υ_{ρ_3}	$\alpha_в$	$r_J^в$	$V^в/V'$	υ_R	r_J^R	V^R/V'	α_I	r_J^I
0,36	0,88	1,28	17,9	1,62	1,11	69	17,8	1,62	70	19,6	16,6	1,73	12,8	1,66	100	8,53	1,78	0,88	122	2,05	0,81	-6,21	2,52
0,40	0,89	1,30	18,1	1,63	1,13	66	17,9	1,63	70	21,4	16,3	1,79	11,4	1,72	100	4,72	2,04	0,85	118	2,23	0,82	-16,6	3,67

e	r_J^q	V^q/V'	α_X	r_J^X	V^X/V'	υ_x	α_{ρ_2}	$r_J^{\rho 2}$	υ_{ρ_2}	β	α_M	r_J^M	α_{ρ_3}	$r_J^{\rho 3}$	υ_{ρ_3}	υ_R	r_J^R	V^R/V'	$\alpha_в$	r_J^b	V^b/V'	α_I	r_J^I
0,44	0,89	1,32	18,0	1,63	1,15	64	17,5	1,62	70	23,2	15,7	1,85	9,5	1,81	100	116	2,44	0,86	-0,57	2,50	0,83	-30,8	5,42

вторичными минимумами. Так как эти минимумы вызваны не гравитацией Юпитера, а специфическими размерами и формой кометных орбит, они были названы геометрическими кратными минимумами (*ГКМ*) [1, 2].

Для уточнения положения *ГКМ* на втором этапе работы линейной интерполяцией между всеми опорными точками и точкой M через 10° по истинной аномалии υ кометы $A_2(P_2)$ были вычислены значения величин r_j, α и V/V'. Анализ результатов подтвердил наличие *ГКМ* у кометы A_2 при $e_m^{A_2} \le 0{,}3$; у кометы P_2 при $e_m^{P_2} \le 0{,}44$. Еще один минимум у кометы A_2 расположен между точками F и R ($e \le 0{,}27; \Delta\upsilon_R(e = 0{,}25) = 29°$), где $\Delta\upsilon_R$ – наибольшее удаление этого минимума от точки R по истинной аномалии υ; между точками M и *в* ($0{,}28 \le e \le 0{,}3$). $\Delta\upsilon_M$ ($e = 0{,}3$) = 3°. При $0{,}23 \le e \le 0{,}27$ функция йовицентрического расстояния кометы A_2 имеет два вторичных минимума (см. табл. 1). Дополнительный минимум ρ_2 у кометы P_2 расположен между точками I и R ($e \le 0{,}26$; $\Delta\upsilon_R$ ($e = 0{,}07$) = 17°), между точками *b* и I ($0{,}27 \le e \le 0{,}29$; $\Delta\upsilon_R$ ($e = 0{,}28$) = 18°), при $e \ge 0{,}30$ функция йовицентрического расстояния кометы P_2 имеет два вторичных минимума. Один из них расположен между точками M и *b* ($0{,}30 \le e \le 0{,}34$; $\Delta\upsilon_x = 2{,}9°$) ,между точками X и M ($0{,}35 \le e \le 0{,}44$; $\Delta\upsilon_x = 6{,}0°$**).** Положение другого вторичного минимума тоже плавно изменяется (см. табл. 2) ($0{,}30 \le e \le 0{,}44$; $\Delta\upsilon_R$ ($e = 0{,}35$) = 23°).

В целом, количественный анализ подтвердил наличие вторичных минимумов у кометы $A_2(P_2)$ в окрестностях точек X и R.Относительно большие значения $\Delta\upsilon_x$, $\Delta\upsilon_R$ скорее всего вызваны неточностью интерполяции.

Временный спутниковый захват (ВСЗ)

Как уже было сказано ранее, у кометы $A_2(P_2)$ в окрестностях особых точек M_1 и M_2 выполнено условие (2) и приблизительно выполнено условие (1). Поэтому окрестности этих точек благоприятны для возникновения *ВСЗ*. При малых значениях эксцентриситета ($e \le 0{,}11$) окрестности апсидальных точек также благоприятны для возникновения *ВСЗ*. В точке Q кометы A_2 (точке *q* кометы P_2) выполнено условие (1) и приблизительно выполнено условие (2). Можно предположить, что при $e \le 0{,}11$ явление *ВСЗ* будет длительным по времени, сравнимым с полупериодом обращения кометы вокруг Солнца. Но оно никогда не перейдет в явление *ВГЗ* (временный гравитационный захват), так как йовицентрическое расстояние кометы в течение всего сближения слишком велико (см. значения r_j^Q, r_j^g, r_j^M в табл. 1, 2). Йовицентрические траектории представляют собой замысловатые петли, вызванные изменением гелиоцентрической скорости (комета то догоняет Юпитер, то отстает от него), при $e \le e_m$ имеют место кратные минимумы функции йовицентрического расстояния, не связанные с обращением кометы вокруг Юпитера.

Заключение

Итак, сближения комет A_2, P_2 и Юпитера, удовлетворяющие начальным условиям, рассмотренным выше, – это низкоскоростные сближения. Особенности сближений следующие.

1. Это длительные сближения. Для кометы A_2 сближение охватывает весь период ее обращения вокруг Солнца ($e \le 0{,}2$); распространяется на дугу $\cup F_1QF_2$ ($e \le 0{,}39$). Для остальных объектов с линии AA_2 комета не покидает области сближения на полупериоде, включающем афелий. Для кометы P_2 сближение охватывает весь период ее обращения вокруг Солнца ($e \le 0{,}17$); распространяется на дугу $\cup I_1qI_2$ ($e \le 0{,}33$). Для остальных объектов с линии AP_2 комета не покидает области сближения на дуге $\cup M_1qM_2$.

2. Функция йовицентрического расстояния комет A_2 и P_2 имеет кратные минимумы. Глобальный минимум достигается в апсидальной точке: $\rho \equiv Q \cap \rho \equiv q$. Вторичные минимумы – это геометрические кратные минимумы. Они имеют место в окрестностях точек пересечения орбит кометы и Юпитера и (или) в окрестностях точек, в которых комета и Юпитер находятся на одном радиус-векторе.

3. На орбитах комет A_2 и P_2 имеются две точки низкоскоростного касания орбит. Точки M_1 и M_2 расположены на концах фокальной хорды; это центры низкоскоростных касательных участков, на которых вероятен временный спутниковый захват в смысле Эверхарта. При $e \le 0{,}11$ *ВСЗ* может распространиться на апсидальный минимум. На участках *ВСЗ* расположены максимум и вторичный минимум функции йовицентрического расстояния комет. *ВСЗ* модельных комет A_2 и

P_2 не может перейти во временный гравитационный захват, так как во всех минимумах комета находится слишком далеко от Юпитера.

Работа поддержана грантом РФФИ № 06–02–16–512.

Литература

1. Emel'yanenko N.Yu. Kinematics of the comets low-velocity encounters with Jupiter// Proceeding of the International conference CAMMAC. – 2000. – P. 35–40.

2. Емельяненко Н.Ю. Короткопериодические кометы с высоким значением постоянной Тиссерана. 3. Кинематика низкоскоростных сближений // Астрономический вестник – 2003. – Т. 37. – № 1. – С. 66–73.

3. Емельяненко Н.Ю. Моделирование орбит комет // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 4. – №8(24) – С. 99–106.

4. Емельяненко Н.Ю. Модели комет с неафелийным касанием орбиты Юпитера. Апсидальные точки расположены на орбите Юпитера // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 6. – №6(46) – С. 45–52.

5. Емельяненко Н.Ю. Динамика орбит комет при тесном сближении с Юпитером. Анализ длительности сближений // Астрономический вестник – 2003. – Т. 37. – №.2. – С. 153–160.

Поступила в редакцию 28 апреля 2006 г.

УДК 518:51(09)

АБРАМ ДАВИДОВИЧ КАЦМАН – УЧЕНЫЙ, ПЕДАГОГ, ЧЕЛОВЕК

В.И. Заляпин

Статья посвящена девяностолетию со дня рождения одного из основоположников математического образования на Южном Урале А.Д. Кацмана (1916 – 1989).



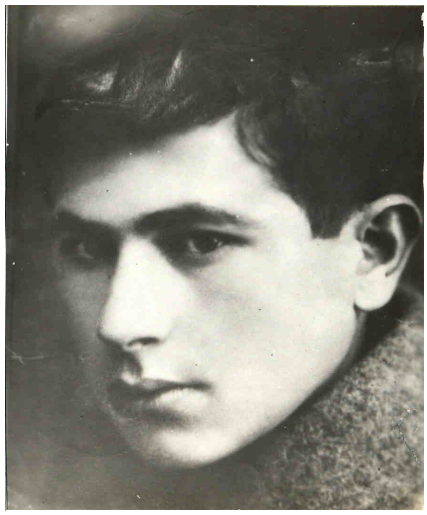
А.Д. Кацман

22 апреля 2006 года исполнилось 90 лет со дня рождения Абрама Давидовича Кацмана, выдающегося педагога и математика. Абрам Давидович проработал в ЧММИ-ЧПИ[1] с 1944 по 1989 год и внес значительный вклад в дело становления математического образования на Южном Урале. Кавалер девяти правительственных наград, ученый-алгебраист, прирожденный педагог, он до конца своих дней самой важной, самой главной заботой считал заботу о нравственном здоровье подрастающего поколения. Абрам Давидович не проходил равнодушно мимо хамства и грубости, был нетерпим к нечестности и моральной нечистоплотности. Он был добр – любой, нуждающийся в его помощи, получал ее. Но он не был добреньким – многим памятны и его крутой нрав, и бескомпромисность в вопросах, которые он считал принципиальными, которые отстаивал без оглядки на авторитеты и вышестоящие инстанции.

Он был талантлив во всем – талантливый математик, талантливый руководитель, талантливый педагог. Но самый главный его талант – он был талантливым человеком.

Абрам Давидович родился 22 апреля 1916 года в местечке Юзефполь Одесской области в небогатой многодетной (четверо сыновей и две дочери) еврейской семье. Его родители был кустарями-конфетчиками. В 1919 году отец его погиб в одном из многочисленных в то время на юге Украины петлюровских погромов и семья осталась на иждивении матери.

В 1924 году Абрам Давидович поступает в семилетнюю школу, которую заканчивает в 1931 году. В том же году умирает мать. Семья переезжает в г. Первомайск Одесской области, где Абрам Давидович поступает на работу в промартель «Молодняк» на должность счетовода, одновременно продолжая учиться в вечерней средней школе. Эта работа давала средства к существованию не только самого Абрама Давидовича, но и всей семьи, обязанности по обеспечению которой легли на плечи пятнадцатилетнего юноши и его старшего брата.



Абрам Кацман – студент Одесского университета

В 1937 году Абрам Давидович поступает на физико-математический факультет Одесского государственного университета – одного из авторитетнейших в то время университетов страны.

Окончание университета совпало с началом Великой Отечественной войны, и в конце июля 1941 года Абрам Давидович был мобилизован в действующую Красную Армию. Воевал на Закавказском, а позднее на Степном фронтах сначала башенным стрелком, позднее – командиром танка 32 танковой

[1] Челябинский механико-машиностроительный институт (1943–1951), Челябинский политехнический институт (1951–1990).

бригады 5 Гвардейской танковой армии. Северный Кавказ, Курская дуга – беспрерывные бои, порой позиционные, порой наступательные. В одном из таких боев под деревней Козырево-Тамаровка в 1943 году танк младшего лейтенанта Кацмана А.Д. был подбит, а сам он получил тяжелое ранение в голову. До января 1944 г. Абрам Давидович находился на излечении в госпитале в г.Челябинске и одновременно числился в офицерском полку запаса при Главном управлении бронетанковых войск.

Абрам Давидович редко публично вспоминал военные годы, фронт, вообще войну, никогда – кроме торжественных случаев – не носил своих наград. Вспоминает Александр Борисович Самаров[2]: «*…О войне А.Д. не любил рассказывать. Воевалось трудно… Но вот маленький штрих, история, запомнившаяся на всю жизнь.Однажды летним днем, когда не было боя, солдаты отдыхали, нежась на солнышке. А.Д. прилег под танком, в тени. Вдруг танк зашевелился и стал разворачиваться… Чудом А.Д. удалось выскочить из-под гусениц тяжелой машины…*»

Смерть на войне – не чудо, не редкость, а повседневность. Но вот – запомнился молодому танкисту именно этот случай – возможность погибнуть почти в мирных условиях в результате собственной неосторожности …

Характер полученных ранений не позволил ему вернуться в строй, да и война подходила к концу – Абрам Давидович был демобилизован из армии и получил назначение на должность преподавателя кафедры высшей математики недавно образованного (1943) Челябинского механико-машиностроительного института.

Кафедра высшей математики в то время была малочисленной. Всего 4 сотрудника, возглавляемые бывшим кадровым морским офицером доцентом Воскобойниковым В.Е. Выпускник Санкт-Петербургского университета, носитель классических традиций российской математической школы, идущих еще от П.Л. Чебышева, В.Е. Воскобойников заложил основы математической культуры и дал первые уроки образовательной деятельности молодому танкисту.

Это отмечает в своих воспоминаниях выпускник института, один из старейших его сотрудников Георгий Марьянович Купершляк. Он сопоставляет лекции В.Е. Воскобойникоцва, «*чёткие и строгие, как морской устав*», и «*эмоциональные лекции А. Д. Кацмана, которые демонстрировали, что математика – это увлекательная наука размышления и поиска*». И заканчивает:

«*…Сочетание Петербургской строгости и Одесской романтической эмоциональности – математическая база, на которой благодарный ученик этих прекрасных учителей вот уже более 50 лет решает различные инженерные задачи... »*

Требовательный к себе вчерашний фронтовик увлеченно взялся за работу. Организационные проблемы становления молодого коллектива, напряженная преподавательская деятельность, отсутствие научной математической среды не особо стимулировали самостоятельные научные исследования. Тем не менее, А.Д. Кацман уже тогда (сразу по окончании войны) начал искать научные контакты в Свердловске и приступил к самостоятельным исследованиям в области алгебры. Он активно занимается научной работой под руководством известного свердловского математика П.Г. Конторовича, получает интересные результаты, связывающие свойства группы без кручения с содержащимися в ней подполугруппами. Он изучает инвариантные подполугруппы в группе, образующие элементы подполугрупп, структуру групп, представимых в виде теоретико-множественной суммы чистых линейных подполугрупп. В 50-е годы интенсивно изучались группы без кручения, и результаты Абрама Давидовича явились существенным вкладом в теорию R-групп, частного случая групп без кручения. В 1955 году Абрам Давидович успешно защищает диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а в 1956 году получает ученое звание доцента. Одновременно А.Д. Кацман организует работу первого в институте (и в г. Челябинске) научно-исследовательского семинара по общей алгебре, функционировавшего, с небольшими перерывами, более 30 лет.

Вспоминает слушатель этого семинара, Михаил Михайлович Гольденберг[3]:

[2] Самаров А.Б., к.ф.-м.н., доцент, зам. заведующего кафедрой высшей математики №1 ЧПИ, впоследствии – заведующий кафедрой высшей математики ЧГАИУ, ныне – доцент кафедры математического анализа ЮУрГУ.

[3] Гольденберг М.М., к.ф.-м.н., доцент кафедры высшей математики №1 ЧПИ, доцент кафедры ПРИМА ЧГТУ, ныне – заведующий кафедрой политехнического института в г. Балтимор (Мериленд, США).

«. . .А.Д. вёл семинар по алгебре – я присоединился к этому семинару в начале 1964 года, когда его участники уже знали кое-что из теории групп. Семинар наряду с Дергачевой Е.И. посещали Брин Ф.Ш., Зибарева Н.П., Темнова Н.К., Лихачёва О.М., потом присоединился я, потом Вадим Анатольевич Могильницкий…»

А.Д. Кацман занимался научной работой в течение всей жизни, и даже после 1973 года, когда у него начались нелады со здоровьем, не прекращал научных исследований. Одна из последних научных работ А.Д. Кацмана выполнена совместно с его многолетней сотрудницей по энергетическому факультету Ф.Ш. Брин. Работа опубликована в 1986 году и посвящена обсуждению известной в теории групп проблемы П. Г. Конторовича.

В это время – время послевоенного восстановления страны – бурно растет институт (с 1951 года сменивший название на Челябинский политехнический институт). Множатся факультеты и специальности, а вместе с ними растет и расширяется кафедра высшей математики.

Вспоминает Елена Иосифовна Дергачева:

«…В 1958 году кафедра математики была небольшой – два доцента (Кацман А.Д. и Решетов М.Р.), два или три старших преподавателя, несколько ассистентов. Когда институт стал расширяться, и резко увеличили набор студентов, пришлось пополнять штат кафедры. Так на кафедре появилось несколько выпускников Челябинского пединститута. Кафедрой заведовал Б.Г. Литвиненко, но тон всему задавал Абрам Давидович. Он был непререкаемым авторитетом во всем, что касалось математики и ее преподавания.



Слева направо: А.Д.Кацман, А.Т. Полецкий, В.Г. Лашко

А.Д. Кацман был недоволен тем, что кафедра пополняется выпускниками пединститута, подготовленными в основном для работы в школе, а не в вузе. Когда с этим пришлось смириться, он настоял на том, чтобы новые преподаватели прошли «курс молодого бойца»: проработали университетские учебники, прослушали лекции ведущих преподавателей, сделали сообщения на заседании методического семинара и, тем самым, «приподнялись» над школьной математикой и приблизились к тому уровню преподавания математики, который Абрам Давидович считал приемлемым для вузовского преподавателя ….»

По словам Е.И. Дергачёвой, вновь прибывшие на кафедру побаивались А.Д. Тем не менее к нему обращались со многими научными и/или методическими вопросами, и он всегда охотно и незамедлительно отвечал на них[4].

В связи с ростом численности сотрудников кафедры и расширением сферы их преподавательской деятельности, общеинститутская кафедра высшей математики в 1963 году была разделена на кафедру высшей математики № 1 и кафедру высшей математики № 2.

Заведующим кафедрой высшей математики № 1 становится А.Д. Кацман.[5] Организационно кафедра была оформлена в структуре энергетического факультета – одного из самых «математикоемких» в институте, – на котором до самого конца читал лекции и вел многотрудную научно-методическую работу Абрам Давидович.

Перед новой кафедрой и ее заведующим вплотную встали проблемы совершенствования учебного процесса. А.Д. Кацман хорошо понимал, что только активная собственная научная деятельность сотрудников кафедры, рост их квалификации в области математики способны привести к повышению уровня преподавательской работы. Расхожая в те времена сентенция «*Матема-*

[4] Заметим, что в судьбе Е.И. Дергачёвой (как и в многих других), А.Д. сыграл решающую роль, «определив» (как он выражался) её в целевую аспирантуру в Москву. Она успешно закончила аспирантуру, защитила диссертацию и в течение многих лет была одним из ведущих преподавателей математики ЧПИ. В настоящее время проживает в г. Бостоне, США.

[5] Второй кафедрой стал заведовать В.А. Лезин, которого вскоре (1965) сменил на этом посту Л.М. Беляков.

тики этот преподаватель не знает, зато он прекрасный методист» отвергалась им с негодованием.

Наряду с привлечением к научной работе уже входящих в штат кафедры преподавателей, эффективным и естественным путем решения поставленной задачи было привлечение молодых выпускников ведущих университетов страны: Московского, Казанского, Новосибирского, Уральского, Ленинградского, Харьковского, Одесского и др.

Эта работа была трудной и продолжительной, но дала превосходные результаты. За сравнительно небольшой срок кафедра пополнилась высококвалифицированными математиками[6]. Они составили в дальнейшем костяк математических кафедр института и многих вузов Челябинска, в том числе и математического факультета Челябинского государственного университета (ЧелГУ).

А.Д. Кацман прилагал немалые усилия для создания подлинно творческой атмосферы на кафедре. Будучи широко эрудированным математиком, Абрам Давидович всячески стимулировал научную активность сотрудников кафедры, особенно её молодого пополнения. Абрам Давидович поддерживал личные контакты со многими видными математиками страны и на протяжении многих лет «пристраивал» сотрудников кафедры к ним на стажировку, в аспирантуру, на консультации. Для многих эти поездки становились началом их научного роста.

Не меньшее значение придавал Абрам Давидович и педагогической деятельности. Именно педагогическая, преподавательская составляющая являлась тем ядром, вокруг которого концентрировались все другие элементы деятельности заведующего, именно ей были подчинены его усилия, на нее была направлена его энергия.



Слева направо: М.Р.Решетов, С.Е. Езриль, А.Д. Кацман, Ю.Н. Катаргин, Н.А. Сенчищев

Уже говорилось, что с самого начала своей педагогической деятельности А.Д. Кацман был связан с энергетическим факультетом. Требования к математической подготовке инженера-энергетика всегда были достаточно высоки. В то время они диктовались не только потребностями специальности, но и квалификацией, профессиональной ответственностью специалистов, определявших лицо факультета. Абрам Давидович, глубоко и внимательно изучив специальные дисциплины, их потребности в математической идеологии и математическом аппарате, предложил факультету продуманную и взвешенную программу курса высшей математики и дополняющую эту программу систему специальных курсов, включая курсы для аспирантов. Эти программы покрывали все текущие потребности образовательных программ и предоставляли обучаемому возможность, при необходимости, легко и эффективно осваивать новые, ранее ему незнакомые, разделы. То, что впоследствии стали называть «системой непрерывной математической подготовки специалиста», было им предвосхищено и внедрено в реальный учебный процесс еще в шестидесятые годы.

[6] Бондарев В.Г., Брыскин И.Б., Быков В.М., Гойхман В.Э., Гольденберг М.М., Гольдшейд Н.К., Гольдшейд И.Я., Горбатенко В.Н., Дильман В.Л., Заляпин В.И., Катков М.Л., Кипнис М.М., Матвеева Л.В., Матвеев С.В., Марков Г.В., Менихес Л.Д., Могильницкий В.А., Муртазин Р., Нестеренко Ю.П., Распопова Н.С., Смекалина Л.А., Тарасова Г.К., Тарасова Т.А., Штраус В.А., Шарабурова Л.Г. и др.

Программа эта не была им придумана. Она созрела, с одной стороны, в результате тесного сотрудничества как самого Кацмана А.Д., так и его ближайших сотрудников и единомышленников с ведущими учеными энергетического факультета, а с другой – была обусловлена логикой развития математической составляющей образовательных программ энергетических специальностей. Было продумано все – вплоть до коллективного (т.е. коллективом преподавателей кафедры) приема экзаменов в «полуписьменной» форме – письменный экзамен с последующим собеседованием. Заметим что эта, т.н. «физтеховская», форма контроля качества усвоения материала студентами, практиковалась на кафедре математики № 1 ЧПИ еще в шестидесятые годы, когда министерские инструкции строго предписывали: экзамен должен и может принимать только лектор потока, в котором группа прослушала курс[7].

Вспоминает М.М. Гольденберг:

«*…у него была стройная концепция построения втузовского курса математики, который должен был, по его мысли, состоять из общего курса (анализ) и серии спецкурсов, варьируемых в зависимости от специальности. Эта идея Абрама Давыдовича осуществлялась в течение многих лет.*

Другая его идея касалась математической строгости. Он считал, что первые понятия анализа – предел, производная, интеграл – должны излагаться по возможности строго. Когда дело доходило до двойных и тройных интегралов, теории поля и т.д. А.Д. считал допустимыми некоторые вольности, исходя из того, что смысловая сторона, идеология вопроса уже усвоена большей частью аудитории и уровень ее мышления уже доведен до известного состояния, позволяющего отличать формально строгое доказательство от иллюстративного, условно говоря, от доказательства «на пальцах». Многие помнят, что Абрам Давидович шёл на эти вольности, скрепя сердце. Например, он бурно протестовал против термина "мера области", который должен был объединить понятия длины отрезка и дуги, площади плоской области и кривой поверхности и объёма трёхмерной области. Видимо, его коробила вульгаризация сакрального понятия меры…»

Вадим Анатольевич Могильницкий, долгие годы работавший вместе с Абрамом Давидовичем на том же факультете (сначала его ассистентом, а затем лектором на параллельном потоке) добавляет к этому следующее:

«*… Известные многим качества Кацмана-лектора, Кацмана-педагога – строгость и ясность изложения, избегание словесных вольностей, шуточных сравнений и аналогий из житейского опыта, вообще – малейшей вульгаризации, «упрощенчества» и т.п. приемов, которыми обычно пользуются иные лекторы – все это было прямым продолжением его личности, согласовывалось естественно и гармонично с чисто человеческими свойствами. Ни малейшей развязности, панибратства с собеседником, игривого легкомыслия по отношению к теме беседы, ничего такого никогда не бывало. Вместе с этим прикладная сторона рассматриваемого понятия (темы, определения, отдельной теоремы), как и инженерная направленность курса в целом всегда находились в поле его зрения. В многолетнем деловом и человеческом общении с А.Д. я очень многому научился, хотя (по отношению ко мне) он никогда не допускал «прямых» нравоучений, дидактических замечаний, наставлений и т.п., на которые, конечно, имел полное право, в силу возраста попросту, и громадного педагогического опыта.*

– Мало пользы от разговоров о пользе математики, о ее значении для каждой инженерной специальности, – говорил он, часто цитируя восточную поговорку: от того, что будешь часто говорить халва, халва, во рту слаще не станет. Студенту нужно показать много задач, начиная с самых элементарных, и учить их решать, не жалея на это времени, в том числе и на лекции – обязательно!, тогда он рано или поздно поймет на деле пользу и значение математики.

Этот принцип А.Д. проводил неукоснительно, прикладные задачи и методы их решения были неотъемлемой частью его лекций на протяжении всего курса и требовались на экзамене. И горе было тому студенту, который обнаруживал блаженное неведение закона Кулона (*Ома, Кирхгофа …*) *– в подобных случаях А.Д. бывал возмущен и нетерпим до крайности, хотя непонимание*

[7] Таким образом, если на производстве «личное клеймо качества» вручалось только избранным, лучшим из лучших, то в высшей школе СССР практиковалась система «сам сделал, сам оценил». Конечно, ведущие вузы страны (скажем МГУ, МФТИ, МИФИ и немногие другие) практиковали именно коллективные экзамены, но в провинции это не приветствовалось.

какого-нибудь чисто математического понятия, или неумение вывести формулу зачастую мог и простить…»

Важной особенностью педагогического таланта А.Д. Кацмана была уже упомянутая выше нацеленность на воспитание личности. Много лет работая на кафедре, обладая обширнейшими познаниями в смежных областях науки и техники, прекрасно владея собственно математическим аппаратом, А.Д. Кацман всегда тщательно готовился к лекциям и волновался перед каждой из них. На недоуменные вопросы молодых коллег, не понимавших – зачем готовиться к лекции, читая её в двадцатый или двадцать пятый раз, он пояснял, что «… они ведь будут слушать эту лекцию в первый раз, они совсем не такие, какими были их предшественники, и лекция эта должна быть прочитана так, чтобы они ощутили – это рассказывают именно им, это знание рождается вот здесь и сейчас…». Прекрасный лектор, умеющий так расставить акценты при изложении самого сложного для восприятия студентов материала, что он представлялся слушателям простым и понятным, он всегда во время лекции находил время и место для обсуждения тех направлений специальной инженерной подготовки, где только что изложенные им абстрактные математические конструкции будут необходимы. Может быть, многие из его слушателей уже забыли ту теорему Ролля или правило Крамера, которые он им втолковывал, но науку жизни, науку ответственности за свои поступки, науку преданности своему делу они не забудут никогда. И своего УЧИТЕЛЯ – тоже. Институтская газета «Политехнические кадры», в статье[8], посвященной 50-летию Абрама Давидовича, отмечала: *– Не случайно в ответ на вопросы анкеты, разосланной институтом своим выпускникам, «Лекции каких преподавателей оказали наибольшее влияние на Вашу инженерную деятельность», многие инженеры, выпускники энергетического факультета, ответили – лекции А.Д. Кацмана…*

Вспоминает выпускница Э-факультета 1966 года, ветеран ЮУрГУ Бабинкова Н.С.

«*…Я поступила в ЧПИ на энергетический факультет в 1961 году. Лекции по высшей математике у нас читал А.Д. Кацман, практические занятия вела Ф.Ш. Брин.*

По сей день в памяти первая встреча с лектором. Было это в ауд. 359 главного корпуса. Немедленно после звонка в аудиторию стремительно «влетел» невысокого роста человек, на ходу подхватил кусочек мела и очень энергично в быстром темпе начал излагать материал.

Мы уже были наслышаны от старшекурсников о стремительности и экспансивности нашего лектора, но такая динамика поведения, увиденная «вживую», ошеломила нас. Во все глаза мы смотрели на «порхающего» у доски преподавателя и старались зафиксировать как можно больше его изречений.

Уважали мы его очень – следы ранений на голове говорили о его жизненном пути больше, чем часы разговоров. Когда освоились со своим статусом студентов и стали смелее, обсуждали с ним на переменках все, что нас интересовало. Мы чувствовали, что мы ему интересны. Осталась в памяти его фраза, которую он произносил быстро-быстро, наклоняя голову, чтобы лучше слышать собеседника: «Что Вы говорите?»…

К концу первого семестра он уже знал нас всех по именам.

Когда мы закончили изучать высшую математику (в конце второго года обучения), Абрам Давидович на последнем экзамене каждому давал напутствия и пожелания, призывая отдавать максимум сил учебе, помогать друг другу и ценить предоставленную нам возможность учиться в этом прекрасном вузе – Челябинском политехническом институте.

Всегда приятный в общении, динамичный, подвижный, энергичный, он учил нас думать, общаться и рассуждать…»

Вспоминает М.М. Гольденберг:

«*…Мне пришлось побывать на лекции Абрама Давидовича всего только раз, давным-давно, в 1964 году. Я сидел в последнем ряду длинной узкой аудитории, видя перед собой спины студентов и лектора впереди – небольшого роста, крепкого сложения, с красиво вылепленной головой. Он рассуждал о степенных рядах, подчёркивая одновременно глубину и красоту предмета и его важность для приложений. Делалось это серьёзно, без скидок на аудиторию. Студенты внимали с ответной серьёзностью. Мне кажется, что подобная атмосфера могла сложиться на лекции, скажем, в морском училище году в 1900. И вспоминается заголовок первого российского учебника математики, написанного Л.Ф.Магницким – и, кстати, для будущих мореходов –*

[8] В номере 15(391), от 20 апреля 1966 года, статья «О старейшем преподавателе института».

«Арифметика, сиречь числительница, искусство честное и всем удобопонятное...». Далее следовало перечисление достоинств «арифметики». Абрам Давидович никогда явно не высказывал подобного отношения к математике и её преподаванию, но, мне кажется, оно было встроено в его организм. И потому он умел заразить своим отношением к делу многих и многих коллег и соратников.

Абрам Давидович никогда не говорил о том, какой он хотел видеть свою кафедру. Но он мог бы повторить слова директора школы, которую мне довелось закончить: «Я хотел собрать в своей школе красивых людей...». Моему директору это удалось

Абрам Давидович создал кафедру, которая вызывала восхищение столичных математиков.

Многое изменилось в России за последние два десятилетия, и кафедра, главное детище Абрама Давидовича, как мне кажется, далеко уже не та. Многие ценности, которые он отстаивал, преданы забвению. То, что он считал невозможным, стало заурядной повседневностью. Значит ли это, что усилия Абрама Давидовича, его общественный темперамент были потрачены впустую? Не думаю. Жизнь одна, она уникальна, неповторима, и важнее всего то, что происходит в ней самой. Абрам Давыдович прожил свою счастливо и плодотворно. И в том небольшом сообществе, центром которого он был, счастливы были и мы – его ученики, друзья и коллеги. И каждый из тех, кто соприкасался с ним, продолжает нести в себе частицу этой замечательной личности.»

Заметим здесь, что деятельность Абрама Давидовича, его «*общественный темперамент*» оставили свой след не только в умах и душах «*небольшого сообщества его коллег, друзей и единомышленников*». Лицо сегодняшнего сообщества челябинских математиков в немалой степени обусловлено теми ценностями, которые отстаивал А.Д. Кацман.

Его горячая увлеченность делом, принципиальность, требовательность в сочетании с благожелательностью и постоянной готовностью помочь снискали ему уважение и авторитет среди студентов и коллег.

Слово В. А. Могильницкому:

«…Много говорилось – еще при жизни Абрама Давидовича – о его принципиальности, бескомпромиссности, профессионализме и иных качествах, которые, по правде говоря, далеко не всем (в том числе и иным из говоривших) и не всегда были безоговорочно по душе (или «по нраву»), если не сами эти качества, то, как бы выразиться поточнее, их конкретные проявления в отдельных жизненных ситуациях. Известно, все мы считаем себя принципиальными и порядочными, пока… обстоятельства вдруг не сложатся так, что придется выбирать: или принципы, или собственное благополучие, житейские удобства. Только у Абрама Давидовича это все было не напоказ: да, он был принципиальным, порой и жестковатым (как руководитель, как педагог), был профессионалом высокого класса, но не гордился этим, а зачастую страдал и сострадал внутренне тем, кому случалось «пострадать» от этих его качеств. Меру его сострадания, доброты, готовности придти на помощь оценили далеко не все – я знал ее, и буду помнить всегда.

Но хочу сказать о самом важном: все это подчинено было у Абрама Давидовича одному началу: чувству и сознанию ответственности перед жизнью. За последние десятилетия, когда наша страна перестала жить «по лозунгам», мы увидели, что вместе с лозунгами, увы, утрачивалось понемногу и то самое чувство – сознание ответственности перед жизнью (и производные от него – принципиальность, профессионализм и т.п.). На смену ему пришел – прополз незаметно – так называемый «пофигизм»; не уверен, что сей термин, рожденный нашим «великим и могучим», был известен Абраму Давидовичу, но то, что он всей своей жизнью, работой и поступками противостоял той недостойной, поганенькой сущности, которая скрыта за этим термином, – несомненно...»

Абрам Давидович был нетерпим к разгильдяйству и необязательности своих подчиненных. И если сотрудник не проявлял должного старания, усердия и дисциплинированности, то он расставался с ним без сожаления.

Вот что рассказывает М. М. Гольденберг

«. . . Среди первых, принятых Абрамом Давидовичем на работу, оказался некто Ш., хороший математик, но абсолютно безответственный преподаватель. Ему ничего не стоило прийти на занятия неподготовленным, а то и вовсе пропустить «пару». «Я его немедленно уволю», негодовал Абрам Давидович по утрам в течение многих месяцев, пока подыскивал Ш. другую работу. В конце концов, он устроил его ассистентом в ЧВВАУШ. Так бывало всегда: если Абрам

Давидович считал, что кто-то не подходит для работы на кафедре, то, прежде всего он находил кандидату на «увольнение» другую работу…»

Абрам Давидович проявлял заботу не только о «пище духовной» своих подчиненных, сотрудников и друзей. Немалая доля его времени была посвящена улучшению их материального положения. Конечно, он был не в силах значительно увеличить их зарплату, но, будучи дружным со многими представителями научной инженерно-технической элиты института, работавшей над заказами крупных промышленных предприятий страны, А.Д. Кацман «внедрял» молодых математиков в качестве соисполнителей упомянутых заказов, и тем самым, давал им возможность заработать дополнительно 50–60 рублей в месяц, что было весомой добавкой к штатной зарплате, составлявшей в то время 105–125 рублей. Для некоторых эта деятельность из зарабатывания денег превращалась в серьезную научную работу над прикладными задачами[9].



А.Д. Кацман и А.Т. Полецкий

А.Д. Кацман был удивительно контактным и хлебосольным человеком. Круг его общения был необычайно широк – родственники, коллеги по работе на кафедре, сослуживцы-единомышленники, в первую очередь представители профессорско-преподавательского состава энергетического факультета, бывшие ученики, представители творческой интеллигенции Челябинска и многие другие. И каждый был принимаем и привечаем в его гостеприимном доме – независимо от рангов и занимаемых постов. В дни всенародных праздников он был неизменным участником институтской колонны демонстрантов – не потому, что являлся адептом властей, а потому, что это была лишняя возможность неформально пообщаться с коллегами и учениками, зазвать по окончании демонстрации всех к себе домой и продолжить «разговоры за жизнь» за щедро накрытым столом.

Вспоминает А.Б. Самаров:

«*…Человек необычайно общительный Абрам Давидович всегда ходил на демонстрации. Уж там общения с дорогими ему сослуживцами было «выше крыши». Чаще всего с утра я заходил за ним и через горсад мы выходили на проспект Ленина. Недалеко от института к нам присоединялся Александр Тимофеевич Полецкий*[10] *и все вместе мы подходили к институту к моменту формирования праздничной колонны…»*

В 1974 году руководство вуза, воспользовавшись тем, что срок полномочий заведования кафедрой А.Д. Кацмана истек, решило заменить его другим человеком. Это намерение вызвало резко отрицательную реакцию как сотрудников кафедры, так и самого Абрама Давидовича.

И дело было не в том, что он не хотел расставаться с постом «начальника». Просто кандидатура претендента была вопиюще «не той». Заведующим намеревался стать инженер по специальности, единственным достоинством которого было наличие степени доктора технических наук. Очевидная нелепость затеянного, тем не менее, не осознавалась руководством вуза, которое хотело видеть на этом посту доктора наук, и ректор, профессор Мельников В.В., настаивал на своем. Ни протесты сотрудников, ни позиция Ученого Совета энергетического факультета, ни выступление на Совете института двух молодых кандидатов физико-математических наук, представлявших точку зрения кафедры, не возымели должного действия. Кафедра, созданию и пестованию которой Абрам Давидович посвятил значительную часть своей жизни, была в одночасье уничтожена.

[9] Здесь уместно отметить, что в ЧПИ в шестидесятые–семидесятые годы XX века *наукой* именовалась преимущественно хоздоговорная деятельность – работа по договорам с промышленными, большей частью оборонными, предприятиями. Научная деятельность в области чистой математики, не приносящая материальных дивидендов, считалась неполноценной.

[10] А.Т. Полецкий, профессор, много лет заведовавший кафедрой теоретической механики.

То есть структурная единица под названием «Кафедра высшей математики № 1» продолжала существовать, но того коллектива педагогов-математиков, который Абрам Давидович долгие годы собирал по всей стране и который определял лицо кафедры, уже не было. Часть сотрудников перешла на кафедру высшей математики № 2, часть – на вновь созданную кафедру прикладной математики. Еще несколько человек сочли наилучшим для себя выбором уйти в создаваемый в это время Челябинский государственный университет, некоторые осели в ЧИМЭСХ.

Однако все они, куда бы ни ушли, унесли с собой частицу его взглядов на математику, на ее преподавание, на жизнь вообще. Кафедры как коллектива единомышленников не стало, но остались заветы, принципы и то оптимистически-ответственное отношение к жизни и работе, которые А.Д. Кацман пронес через всю свою жизнь.



Сам Абрам Давидович в первую очередь был математиком и педагогом, его авторитет основывался на глубоких знаниях, эрудиции и богатейшем опыте, а не на административном ресурсе. Несмотря на начавшиеся нелады со здоровьем, он продолжал много и плодотворно работать, по-прежнему определяя магистральные направления методической и педагогической деятельности той части коллектива преподавателей, которая продолжала с ним работать, и, по традиции, обращалась к нему за советом и поддержкой. И на кафедре прикладной математики, и на кафедре высшей математики № 2, (куда ее заведующий, Лев Михайлович Беляков пригласил Абрама Давидовича вместе с немногочисленными остававшимися к тому моменту времени в институте его коллегами), авторитет А.Д. Кацмана был непререкаем. Он продолжал читать лекции, готовить учебные и методические пособия. В повседневном деловом общении и на собраниях методического семинара, которым Абрам Давидович руководил в семидесятые годы, преподаватели уже нового поколения приобщались к его педагогическому опыту, получали уроки мастерства, приобретали драгоценные крупицы знания и умения – умения передать знания другим, научить уметь тех, кому это необходимо. Продолжал публикацию результатов своих научных исследований. Жил и работал в полную силу, и подошел к своему семидесятилетию (1986) как будто таким же, каким он был в начале своего пути. Однако годы и участившиеся болезни брали свое.

После длительного курса лечения, сопровождавшегося двумя тяжелейшими операциями, в марте 1989 года Абрам Давидович ушел из жизни.

* * *

Абрам Давидович Кацман был и остался для многих, знавших его, одним из лучших людей, которых они встречали в своей жизни. Из тех, о которых говорится – соль земли. Это не обязательно широко известные, публичные люди, чьими именами называют улицы и пароходы. Они могут быть простыми крестьянами и академиками, прославленными писателями и врачами или медсестрами поселковых больниц… Они живут среди нас и трудятся всю жизнь, истово, со смиренным достоинством, не напоказ миру, но на пользу делу.

Поступила в редакцию 10 июля 2006 г.

УДК 519.833.7

ОБ ОДНОЙ МОДЕЛИ РЫНКА И ЕЕ ГАРАНТИРОВАННОМ ПО ВЫИГРЫШАМ И РИСКАМ РЕШЕНИИ[1]

К.Н. Кудрявцев

Рассмотрена математическая модель рынка бесконечно делимого продукта с двумя товаропроизводителями и учетом возможности неожиданного появления импортера, представляющая собой кооперативную игру с побочными платежами и при неопределенности. Для данной игры найдено гарантированное по выигрышам и рискам решение.

1. Введение

Рассматривается кооперативная игра двух лиц с побочными платежами и при неопределенности, которая отождествляется с упорядоченной четверкой

$$\Gamma = \left\langle \{1,2\}, \{X_i\}_{i=1,2}, Y, \{f_i(x,y)\}_{i=1,2} \right\rangle. \qquad (1)$$

Здесь 1 и 2 – порядковые номера игроков. Стратегии *i*-го игрока x_i являются элементами множество стратегий $X_i \subseteq \mathbb{R}^{n_i}$. В экономических задачах стратегиями могут быть, например, цены и объемы поставок товара на рынок (определяемые продавцом), устанавливаемые руководством премии, штрафы и другие меры поощрения и наказания, внедрение ресурсосберегающих технологий и т.д. О неопределенности $y \in Y \subseteq \mathbb{R}^m$ игроки не имеют каких-либо статистических данных, известны только границы изменения неопределенности. В «роли» неопределенности могут выступать, например, непредсказуемые для игроков изменения погодных условий, конъюнктуры рынка, законодательства, неожиданные скачки курсов валют и т.п.

В результате согласованного выбора игроками своих стратегий $x_i \in X_i$ (i = 1, 2) складывается ситуация $x = (x_1, x_2) \in X = X_1 \times X_2 \subseteq \mathbb{R}^n$ $(n = n_1 + n_2)$. Независимо от действий игроков реализуется одна из неопределенностей $y \in Y$.

На образовавшихся в результате парах $(x,y) \in X \times Y$ определена скалярная функция выигрыша *i*-го игрока $f_i(x,y): X \times Y \to \mathbb{R}$ (i = 1, 2). Значение функции выигрыша $f_i(x,y)$ на реализовавшейся ситуации x и появившейся независимо неопределенности y есть *предварительный выигрыш* *i*-го игрока. Полученный таким образом суммарный выигрыш $f_1(x,y) + f_2(x,y)$ игроки предполагают в дальнейшем распределить между собой. Аналогично игроки поступают и с рисками.

Цель *i*-го игрока, на «содержательном уровне», состоит в совместном и согласованном с партнером выборе такой своей стратегии и такого перераспределения суммы выигрышей и суммы рисков, чтобы полученный в результате его окончательный выигрыш стал возможно *большим*, а окончательный риск (определенный ниже) возможно *меньшим*.

2. Гарантированное по выигрышам и рискам решение

Следуя принципу минимаксного сожаления Сэвиджа [1] и учитывая «кооперативный характер» игры (1) введем функцию риска *i*-го игрока $\Phi_i(x,y)$ (i = 1, 2) в виде [2]

$$\Phi_i(x,y) = f_i\left(x^P(y), y\right) - f_i(x,y) \ (i = 1, 2), \qquad (2)$$

где $x^P(y) \in X \quad \forall y \in Y$ - максимальная по Парето альтернатива в двухкритериальной задаче

$$\Gamma(y) = \left\langle X, \{f_i(x,y)\}_{i=1,2} \right\rangle, \qquad (3)$$

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 05-01-00419).

полученной из игры (1) при каждой фиксированной неопределенности $y \in Y$.

Согласно [3, с. 80]: Если существуют альтернатива $x^P(y)$ и число $\alpha \in (0,1)$ такие, что

$$\max_{x \in X} \left[\alpha f_1(x,y) + (1-\alpha) f_2(x,y) \right] = Idem\left[x \to x^P(y) \right] \quad \forall y \in Y, \tag{4}$$

то $x^P(y)$ является максимальной по Парето в задаче (3) при каждом $y \in Y$.

В (4) и далее $Idem\left[x \to x^P(y) \right]$ означает скобку […] в левой части тождества (4), где x заменено на $x^P(y)$.

Значение функции риска $\Phi_i(x,y)$ (i = 1, 2) называется [4, с.15] риском i-го игрока. Функция $\Phi_i(x,y)$ численно оценивает риск i-го игрока, связанный с тем, что он выбрал свою стратегию из ситуации x, а не из $x^P(y)$, хотя последняя и доставляет максимум по Парето в двухкритериальной задаче (3).

Для каждой функции выигрыша $f_i(x,y)$ (i =1, 2) введем следующие максимины

$$\begin{aligned} f_1^0[y] &= \max_{x_1 \in X_1} \min_{x_2 \in X_2} f_1(x_1, x_2, y), \\ f_2^0[y] &= \max_{x_2 \in X_2} \min_{x_1 \in X_1} f_2(x_1, x_2, y) \quad \forall y \in Y. \end{aligned} \tag{5}$$

Аналогично для каждой функции риска $\Phi_i(x,y)$ (i = 1, 2) далее используем следующие минимаксы

$$\begin{aligned} \Phi_1^0[y] &= \min_{x_1 \in X_1} \max_{x_2 \in X_2} \Phi_1(x_1, x_2, y), \\ \Phi_2^0[y] &= \min_{x_2 \in X_2} \max_{x_1 \in X_1} \Phi_2(x_1, x_2, y) \quad \forall y \in Y. \end{aligned} \tag{6}$$

Будем предполагать, что каждый игрок может передать партнеру часть своего выигрыша и часть риска. При этом считаем, что выигрыши суммируются только с выигрышами, а риски с рисками.

Ниже применяются вектора $f = (f_1, f_2)$, $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2)$ и полагаем, что все максимумы и минимумы в следующем определении достигаются, а функции $f_i(x,y)$ и $\Phi_i(x,y)$ непрерывны на произведении компактов $X \times Y$.

Определение 2.1. Гарантированным по выигрышам и рискам решением (ГВР) кооперативной игры двух лиц с побочными платежами и при неопределенности (1) называется [2] тройка $\left(x^*, f^*, \Phi^* \right)$, для которой существует неопределенность $y_P \in Y$ такая, что выполняются следующие три условия:

1⁰ *условие коллективной рациональности*

$$\max_{x \in X} \sum_{i=1}^{2} f_i(x, y_P) = Idem\left[x \to x^* \right]; \tag{7}$$

2⁰ условие *«неухудшаемости» суммарного выигрыша и риска*

$$\min_{y \in Y} \sum_{i=1}^{2} \left[f_i(x^*, y) - \Phi_i(x^*, y) \right] = Idem\left[y \to y_P \right]; \tag{8}$$

3⁰ *условие индивидуальной рациональности*:

$$\sum_{i=1}^{2} f_i(x^*, y_P) = \sum_{i=1}^{2} f_i^* \quad \wedge \quad \sum_{i=1}^{2} \Phi_i(x^*, y_P) = \sum_{i=1}^{2} \Phi_i^*,$$

и справедлива система из четырех неравенств

$$f_i^* \geq f_i^0\left[y_p \right], \ \Phi_i^* \leq \Phi_i^0\left[y_p \right] \ (i = 1, 2); \tag{9}$$

при этом пару $f^* = \left(f_1^*, f_2^*\right)$ назовем *гарантированным векторным дележом*, пару $\Phi^* = \left(\Phi_1^*, \Phi_2^*\right)$ – *гарантированным векторным риском* игры (1), а x^* - ситуацией, гарантирующей эти дележи и риски.

Замечание 2.1. [2] Пара $\left(x^*, y_P\right)$, найденная из требований 1^0 и 2^0 определения 2.1 является седловой точкой для антагонистической игры

$$\left\langle \mathrm{X}, Y, \sum_{i=1}^{2}\left[f_i(x,y) - \Phi_i(x,y)\right]\right\rangle,$$

то есть

$$\max_{x\in \mathrm{X}} \sum_{i=1}^{2}\left[f_i(x,y_P) - \Phi_i(x,y_P)\right] = \sum_{i=1}^{2}\left[f_i\left(x^*,y_P\right) - \Phi_i\left(x^*,y_P\right)\right] = \min_{y\in Y} \sum_{i=1}^{2}\left[f_i\left(x^*,y\right) - \Phi_i\left(x^*,y\right)\right].$$

В работе [2] установлены свойства гарантированного по выигрышам и рискам решения и предложен способ его построения. В настоящей статье найдено ГВР для модели рынка с двумя производителями и учетом в этой модели непредсказуемых «действий» импортера.

3. Модель рынка с двумя товаропроизводителями и учетом импорта

Рассматривается функционирование рынка бесконечно делимого продукта (например, рынок зерна, муки, сахара) с учетом возможности неожиданного появления еще одного продавца (импортера). Предполагается, что функция спроса на продукт известна. Спрос определяется следующим образом: «*спрос* показывает то количество продукта, на которое (при прочих равных условиях) будет предъявлен спрос при разных ценах» [5], т.е. спрос показывает количество продукта, которое потребители вынуждены покупать по разным возможным ценам. При рассмотрении величины спроса (а также предложения) здесь принимается условие неизменности всех влияющих факторов, кроме цены товара. Спрос представляется в виде невозрастающей функции, которая определена при положительных значениях аргумента и принимает только положительные значения. Будем рассматривать функцию спроса с постоянным коэффициентом эластичности. Такую функцию можно [5] представить в виде

$$\varphi(p) = b - \frac{b}{a}p,\ 0 < p < a,$$

где b/a – коэффициент эластичности спроса на данном рынке, $p \in (0,a)$ – цена товара, a – его максимально возможная цена, b – максимальное количество товара, которое может поглотить рынок.

«*Предложение* показывает, какое количество товара будет предъявлено к продаже по разным ценам» [5]. Предложение описывается неубывающей функцией цены. Эта функция также определена для положительных значений аргумента и принимает положительные значения.

Далее ограничимся случаем двух товаропроизводителей и линейными функциями предложений с постоянными коэффициентами эластичности $x_i\ (i = 1,2)$ и y:

$$\psi_i(p) = x_i p\ \ (i = 1, 2),\ \psi_3(p) = yp\ \ (0 < p < +\infty).$$

При этом предполагаем, что пределы изменения индивидуальных коэффициентов эластичности заданы

$$x_i \in \mathrm{X}_i = [k,K]\ \ (i = 1, 2),\ y \in Y = (0,M], \tag{10}$$

где постоянные $K > k > 0$ и $M > 0$.

Так как товаропроизводители предлагают один и тот же товар на одном и том же рынке (и поэтому находятся в одних и тех же условиях), то предполагаем, что пределы изменения их индивидуальных коэффициентов эластичности совпадают.

Совокупное предложение $\psi(p)$ всех поставщиков товара на рынок получаем суммированием всех индивидуальных функций предложения, включая и импортера $\left(\psi_3(p) = yp\right)$, т.е.

$$\psi(p)=\sum_{j=1}^{3}\psi_j(p)=(x_1+x_2+y)\,p\,.$$

Считается, что цена продукта $\overline{p}$ формируется в результате равновесия между спросом и предложением. Именно,

$$\overline{p}\in\mathbb{R}_+=(0,+\infty)$$

является равновесной ценой, если выполняется равенство

$$b-\frac{b}{a}\overline{p}=(x_1+x_2+y)\,\overline{p}\,.$$

Отсюда получаем

$$\overline{p}=\frac{b}{\dfrac{b}{a}+x_1+x_2+y}$$

– равновесную цену $\overline{p}$ в данной задаче.

Прибыль, получаемая *i*-м товаропроизводителем (*i* = 1, 2) с проданного товара определяется значением функции

$$f_i(x_1,x_2,y)=(x_i\overline{p})\,\overline{p}=\frac{x_i b^2}{\left(\dfrac{b}{a}+x_1+x_2+y\right)^2}\quad (i=1,\,2). \tag{11}$$

Увеличение прибыли *i*-го товаропроизводителя (*i* = 1, 2) достигается за счет подходящего выбора коэффициента эластичности x_i в пределах, установленных в (10).

Предполагается, что продавцы (например, в рамках одной торговой сети, или являясь членами одной этнической группы, семьи) могут совместно выбирать свои коэффициенты эластичности и передавать друг другу не только часть полученной прибыли, но и «делиться» рисками.

«Экономическая цель» *i*-го товаропроизводителя состоит в получении возможно большей прибыли и в меньшем риске после перераспределения общей прибыли и суммарного риска.

В качестве математической модели представленного выше взаимодействия товаропроизводителей и импортера рассматривается кооперативная игра двух лиц с побочными платежами и при неопределенности вида (1), именно,

$$\left\langle \{1,2\},\{X_i\}_{i=1,2},Y,\left\{f_i(x,y)=\left(\frac{b}{a}+x_1+x_2+y\right)^{-2}x_i b^2\right\}_{i=1,2}\right\rangle. \tag{12}$$

Здесь 1 и 2 – порядковые номера игроков (производителей); множества $\mathrm{X}_i=[k,K]$ стратегий *i*-го игрока x_i (*i* = 1, 2) и множество $Y=(0,M]$ неопределенностей y определены в (10); функция выигрыша $f_i(x,y)$ у *i*-го игрока имеет вид (11).

Упорядоченная четверка (12) является математической моделью рынка с двумя производителями и учетом «действий» импортера. Одновременно с тем, с «точки зрения» теории игр, упорядоченная четверка (12) есть кооперативная игра двух лиц при неопределенности и с побочными платежами.

Игра (12) происходит следующим образом. Игроки совместно, путем переговоров, выбирают свои стратегии (которые, напомним, представляют собой «их» коэффициенты эластичности). В результате образуется ситуация $x=(x_1,x_2)\in X=X_1\times X_2$. Независимо от такого выбора в игре (12) реализуется неопределенность $y\in Y$ (коэффициент эластичности импортера). На полученных в результате парах $(x,y)\in \mathrm{X}\times Y$ определена функция выигрыша *i*-го игрока $f_i(x,y)$ (*i* = 1, 2) из (11), оценивающая его предварительную прибыль. После этого игроки согласованно перераспределяют суммарную прибыль, исходя из условий индивидуальной рациональности (9).

На «содержательном уровне» цель *i*-го игрока состоит в согласованном с партнером выборе такой своей стратегии $x_i\in \mathrm{X}_i$ (*i* = 1, 2) и такого согласованного перераспределения предварительных выигрышей и рисков, при которых его окончательный выигрыш (прибыль) будет воз-

можно *большим*, а его перераспределенный риск возможно *меньшим*. Одновременно, оба игрока ориентируются на возможность реализации любой неопределенности $y \in Y$.

Далее, не оговаривая особо, будем предполагать выполненными ограничения из [6, с. 176]

$$0 < k < K < \frac{b}{2a}, \quad 0 < M. \tag{13}$$

Лемма 3.1. Функции риска вида (2) для функций выигрыша (11) имеют вид

$$\Phi_i(x,y) = \frac{Kb^2}{\left(\frac{b}{a} + 2K + y\right)^2} - \frac{x_i b^2}{\left(\frac{b}{a} + x_1 + x_2 + y\right)^2} \quad (i = 1, 2). \tag{14}$$

Доказательство. Используя (4), найдем максимальную по Парето альтернативу $x^P(y)$ в двухкритериальной задаче

$$\Gamma(y) = \left\langle X, \left\{ f_i(x,y) = \left(\frac{b}{a} + x_1 + x_2 + y\right)^{-2} x_i b^2 \right\}_{i=1,2} \right\rangle, \tag{15}$$

полученной из (12) при каждой фиксированной неопределенности $y \in Y$.

Считая в (4) постоянную $\alpha = 1/2$, построим функцию

$$\varphi(x,y) = \frac{1}{2} f_1(x,y) + \frac{1}{2} f_2(x,y) = \frac{b^2(x_1 + x_2)}{2\left(\frac{b}{a} + x_1 + x_2 + y\right)^2}. \tag{16}$$

Представим (16) как функцию одной переменной $u = x_1 + x_2$ при какой-либо фиксированной неопределенности $y \in Y$

$$\varphi(u,y) = \frac{ub^2}{2\left(\frac{b}{a} + u + y\right)^2}.$$

Найдем производные

$$\frac{d\varphi(u,y)}{du} = \frac{b^2}{2} \cdot \frac{\frac{b}{a} - u + y}{\left(\frac{b}{a} + u + y\right)^3} \quad \text{и} \quad \frac{d^2\varphi(u,y)}{du^2} = -\frac{b^2\left(2\frac{b}{a} - u + 2y\right)}{\left(\frac{b}{a} + u + y\right)^4}.$$

Отсюда получаем, что максимум функции $\varphi(u,y)$ на числовой оси $\{u\}$ достигается в точке $u = b/a + y$, а точка перегиба есть $u = 2(b/a + y)$.

На промежутке $\left(0, 2(b/a + y)\right]$ производная $\frac{d^2\varphi(u,y)}{du^2} < 0$ и поэтому $\varphi(u,y)$ является вогнутой по u; на $\left[2(b/a + y), +\infty\right)$ будет $\frac{d^2\varphi(u,y)}{du^2} > 0$ и поэтому $\varphi(u,y)$ выпукла по u.

Наконец, горизонтальной асимптотой функции $\varphi(u,y)$ при $u \to +\infty$ является положительная полуось $u \in (0, +\infty)$.

Таким образом, график функции $\varphi(u,y)$ имеет вид, представленный на рисунке. Согласно рисунку и ограничениям (13) $\max\limits_{u \in [2k, 2K]} \varphi(u,y)$ достигается при $u = 2K$ для каждого $y \in Y$.

Итак, максимальной по Парето альтернативой в двухкритериальной задаче (15) будет ситуация $x^P(y) = (K, K)$. При этом функция риска (2) принимает вид (14).

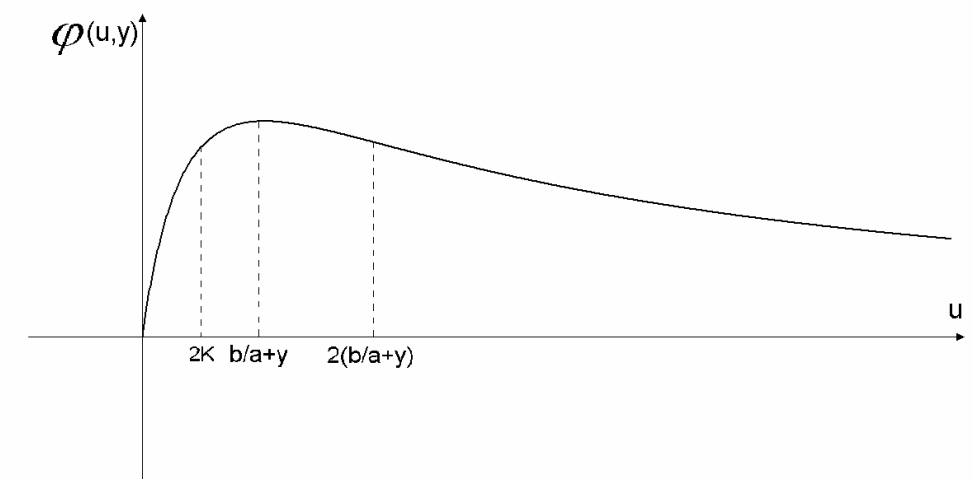


График функции $\varphi(u,y)$

Утверждение 3.1. Гарантированным по выигрышам и рискам решением кооперативной игры двух лиц при неопределенности и с побочными платежами (12) является тройка $\left(x^*, f^*, \Phi^*\right)$, где гарантированный векторный дележ

$$f^* = \left(\left(\frac{b}{a}+2K+M\right)^{-2} Kb^2, \left(\frac{b}{a}+2K+M\right)^{-2} Kb^2\right),$$

гарантированный векторный риск $\Phi^* = (0,0)$, а ситуация, гарантирующая эти дележи и риски, будет $x^* = (K,K)$.

Доказательство. Найдем пару $\left(x^*, y_p\right)$, отвечающую требованиям (7) и (8) определения 2.1. Поскольку, в силу выбора $\alpha = 1/2$,

$$\sum_{i=1}^{2} f_i\left(x, y_p\right) = 2\varphi\left(x, y_p\right),$$

то

$$x^* = x^p\left(y_p\right) = \left(x_1^p\left(y_p\right), x_2^p\left(y_p\right)\right) = (K,K).$$

Решим оптимизационную задачу (8) при условии, что $x^* = (K,K)$.

Следуя (8), построим

$$\omega(y) = \sum_{i=1}^{2}\left[f_i\left(x^*, y\right) - \Phi_i\left(x^*, y\right)\right]$$

или, с учетом (14),

$$\omega(y) = f_1\left(x^*, y\right) + f_2\left(x^*, y\right) = \frac{2Kb^2}{\left(\frac{b}{a}+2K+y\right)^2}.$$

Функция $\omega(y)$ строго убывает при возрастании $y \in \mathbb{R}_+ = (0,+\infty)$, следовательно минимум $\omega(y)$ при ограничениях (13) достигается на $y_p = M$.

Отсюда суммарный гарантированный выигрыш игроков

$$\sum_{i=1}^{2} f_i\left(x^*, y_p\right) = \frac{2Kb^2}{\left(\frac{b}{a}+2K+M\right)^2},$$

а суммарный гарантированный риск

$$\sum_{i=1}^{2}\Phi_i\left(x^*, y_p\right) = 0\,.$$

Далее, вычислим максимины $f_1^0[M]$ и $f_2^0[M]$, определенные в (5)

$$f_1^0[M] = \max_{x_1\in[k,K]}\min_{x_2\in[k,K]}\frac{x_1 b^2}{\left(\frac{b}{a}+x_1+x_2+M\right)^2},\ f_2^0[M] = \max_{x_2\in[k,K]}\min_{x_1\in[k,K]}\frac{x_2 b^2}{\left(\frac{b}{a}+x_1+x_2+M\right)^2}.$$

Поскольку функция

$$f_1(x_1, x_2, M) = \frac{x_1 b^2}{\left(\frac{b}{a}+x_1+x_2+M\right)^2}$$

строго убывает при возрастании x_2 от k до K при всех фиксированных x_1 и M, и строго возрастает при возрастании x_1 от k до K (удовлетворяющих ограничениям (13)) при всех фиксированных x_2 и M, то

$$f_1^0[M] = \frac{Kb^2}{\left(\frac{b}{a}+2K+M\right)^2}\,.$$

Аналогично

$$f_2^0[M] = \frac{Kb^2}{\left(\frac{b}{a}+2K+M\right)^2}\,.$$

Минимаксы (6) будут $\Phi_1^0[M] = \Phi_2^0[M] = 0$ в силу того, что $x^p(M) = x^*$.

Так как $f_i\left(x^*, y_p\right) = f_i^0\left[y_p\right]$ и $\Phi_i\left(x^*, y_p\right) = \Phi_i^0\left[y_p\right]$ (i = 1, 2), то

$$f_i^* = f_i\left(x^*, y_p\right) = Kb^2\left(\frac{b}{a}+2K+M\right)^{-2},\ \Phi_i^* = \Phi\left(x^*, y_p\right) = 0\ \ (i = 1\ ,2).$$

Автор благодарит профессора В.И. Жуковского за замечания.

Литература

1. Savage L.Y. The theory of statistical decusion // J. American Statistic Association. – 1951. – № 46. – P. 55–67.

2. Жуковский В.И., Кудрявцев К.Н. Одна кооперативная игра с побочными платежами и учетом рисков // Spectral and evolution problems: Proceedings of the Sixteenth Crimean Autumn Mathematical School-Symposium (KROMSH-2005). – Vol.16. – Simferopol, 2006.

3. Подиновский В.В., Ногин В.Д. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач. – М.: Наука, 1982.

4. Жуковский В.И., Жуковская Л.В. Риск в многокритериальных и конфликтных системах при неопределенности. – М.: Едиториал УРСС, 2004.

5. Макконелл К.Р., Брю С.Л. Экономикс. Принципы проблемы и политика. – М.: Республика, 1992. – Т. 1, 2.

6. Жуковский В.И. Введение в дифференциальные игры при неопределенности. – М.: МНИИПУ, 1997.

Поступила в редакцию 27 апреля 2006 г.

УДК 517.968

ОБ ОДНОЙ ЧЕТЫРЕХЭЛЕМЕНТНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧЕ ТИПА РИМАНА ДЛЯ БИАНАЛИТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

Ю.А. Медведев, К.М. Расулов

В работе получен алгоритм решения одной из основных четырехэлементных краевых задач типа Римана в классах кусочно-бианалитических функций, линией скачков которых является единичная окружность, указаны условия, при которых решение задачи может быть получено конструктивно и явно в интегралах типа Коши. Исследована картина разрешимости задачи и установлена ее нетеровость.

1. Постановка задачи. Пусть T^+ – конечная односвязная область на плоскости комплексного переменного $z = x + iy$, ограниченная простым гладким замкнутым контуром L. Область, дополняющую $T^+ \cup L$ до полной плоскости, обозначим через T^- и будем считать, что начало координат находится в T^+. В дальнейшем в основном пользуемся терминами и обозначениями, принятыми в [1]. Рассмотрим следующую краевую задачу.

Требуется найти все кусочно-бианалитические функции $F(z) = \left\{F^+(z), F^-(z)\right\}$ *класса* $A_2\left(T^{\pm}\right) \cap H^{(2)}\left(L\right)$, *исчезающие на бесконечности и удовлетворяющие на* L *условиям:*

$$A_{k1}(t)\frac{\partial F^+(t)}{\partial x^{2-k}\partial y^{k-1}} + (-1)^{k-1}A_{k2}(t)\overline{\frac{\partial F^+(t)}{\partial x^{2-k}\partial y^{k-1}}} = G_{k1}(t)\frac{\partial F^-(t)}{\partial x^{2-k}\partial y^{k-1}} + (-1)^{k-1}G_{k2}(t)\overline{\frac{\partial F^-(t)}{\partial x^{2-k}\partial y^{k-1}}} + i^{k-1}g_k(t), \quad (1)$$

где $k = 1, 2$, $A_{kj}(t), G_{kj}(t)$, $g_k(t)$ *(* $j = 1, 2$*) – заданные на контуре* L *функции класса* $H(L)$ *(Гёльдера),* i *– мнимая единица, причем для определенности будем предполагать, что выполняется следующее «начальное условие»*

$$F^+(0) = 0. \quad (2)$$

Сформулированную задачу будем называть *задачей* GR_4, а соответствующую однородную задачу $(g_k(t) \equiv 0,\ k = 1, 2)$ назовем *задачей* GR_4^0.

Отметим, что в частном случае, когда $A_{12}(t) \equiv A_{22}(t) \equiv G_{12}(t) \equiv G_{22}(t) \equiv 0$, $A_{11}(t) \equiv A_{21}(t) \equiv 1$, задача GR_4 представляет собой основную (*двухэлементную*) краевую задачу типа Римана для бианалитических функций, сформулированную Ф.Д. Гаховым в его известной монографии (см. [2], с. 319). Двухэлементная задача типа Римана (1) для бианалитических функций в случае произвольных конечносвязных областей с гладкими границами подробно исследована в работах одного из авторов (см. [1] и имеющуюся там библиографию).

В данной заметке задача GR_4 исследуется в сформулированной выше постановке в случае, когда контур L есть единичная окружность: $L = \left\{t : |t| = 1\right\}$.

2. О сведении задачи GR_4 к двум векторно-матричным задачам Римана для аналитических функций. Хорошо известно (см., например, [1], [2]), что всякую исчезающую на бесконечности кусочно-бианалитическую функцию $F(z)$ с линией скачков L можно представить в виде

$$F^{\pm}(z) = \varphi_0^{\pm}(z) + \overline{z}\varphi_1^{\pm}(z),\ z \in T^{\pm}, \quad (3)$$

где $\varphi_k^+(z)$, $\varphi_k^-(z)$ – аналитические соответственно в T^+ и T^- функции, причем $\prod\left\{\varphi_k^-, \infty\right\} \geq 1 + k$, $k = 0, 1$ (здесь $\prod\left\{\varphi_k^-, \infty\right\}$ означает порядок функции $\varphi_k^-(z)$ в точке $z = \infty$).

С учетом представления (3), известных соотношений

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \overline{z}}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = i\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial \overline{z}}\right)$$

и тождества $t\cdot\bar{t}=1$ ($t\in L$) краевые условия (1) можно переписать в следующем виде:

$$t^{-1}A_{k1}(t)\Phi_k^+(t)+tA_{k2}(t)\overline{\Phi_k^+(t)}=t^{-1}G_{k1}(t)\Phi_k^-(t)+tG_{k2}(t)\overline{\Phi_k^-(t)}+g_k(t),\quad k=1,2, \tag{4}$$

где приняты обозначения:

$$\Phi_k^{\pm}(z)=z\frac{d\varphi_0^{\pm}(z)}{dz}+\frac{d\varphi_1^{\pm}(z)}{dz}+(-1)^{k-1}z\varphi_1^{\pm}(z),\quad z\in T^{\pm}.$$

Из равенства (4), переходя к комплексно сопряженным значениям, получаем:

$$t^2\overline{A_{k1}(t)}\cdot\overline{t\Phi_k^+(t)}+t^{-1}\overline{A_{k2}(t)}\Phi_k^+(t)=t^2\overline{G_{k1}(t)}\cdot\overline{t\Phi_k^-(t)}+t^{-1}\overline{G_{k2}(t)}\Phi_k^-(t)+\overline{g_k(t)},\quad k=1,2. \tag{5}$$

Далее, введем в рассмотрение аналитические соответственно в T^+ и T^- функции $\psi_{kj}^+(z)$ и $\psi_{kj}^-(z)$ ($k=1,2;\ j=1,2$), которые определим так:

$$\psi_{k1}^{\pm}(z)=\Phi_k^{\pm}(z),\ \psi_{k2}^{\pm}(z)=\frac{1}{z}\cdot\overline{\Phi_k^{\mp}}\left(\frac{1}{z}\right),\quad z\in T^{\pm}. \tag{6}$$

Если предположить, что

$$\overline{A_{k1}(t)}G_{k1}(t)-A_{k2}(t)\overline{G_{k2}(t)}\neq 0,\quad t\in L,\quad k=1,2, \tag{7}$$

то равенства (4), (5) можно записать в следующей векторно-матричной форме:

$$\psi_k^+(t)=G_k(t)\psi_k^-(t)+Q_k(t),\quad t\in L,\quad k=1,2, \tag{8}$$

где

$$G_k(t)=\left(\overline{\delta_k(t)}\right)^{-1}\cdot\begin{pmatrix}|G_{k1}(t)|^2-|G_{k2}(t)|^2 & \beta_k(t)\\ -\overline{\beta_k(t)} & |A_{k1}(t)|^2-|A_{k2}(t)|^2\end{pmatrix},\ Q_k(t)=\begin{pmatrix}\dfrac{\overline{G_{k1}(t)}g_k(t)-G_{k2}(t)\overline{g_k(t)}}{\bar{t}\cdot\overline{\delta_k(t)}}\\ \dfrac{\overline{A_{k2}(t)}g_k(t)-A_{k1}(t)\overline{g_k(t)}}{t^2\overline{\delta_k(t)}}\end{pmatrix},$$

$$\delta_k(t)=\overline{A_{k1}(t)}G_{k1}(t)-A_{k2}(t)\overline{G_{k2}(t)},\ \beta_k(t)=t^3\left(\overline{A_{k1}(t)}G_{k2}(t)-A_{k2}(t)\overline{G_{k1}(t)}\right),$$

а $\psi_k^{\pm}(z)=(\psi_{k1}^{\pm}(z),\psi_{k2}^{\pm}(z))$ – неизвестный кусочно-аналитический вектор (при каждом фиксированном значении k) с линией скачков L.

Таким образом, при выполнении условий (7), решение задачи GR_4 сводится к решению двух обычных векторно-матричных задач Римана вида (8) относительно двумерных кусочно-аналитических векторов $\psi_k^{\pm}(z)=(\psi_{k1}^{\pm}(z),\psi_{k2}^{\pm}(z))$.

Замечание 2.1. Здесь важно отметить, что если выполняются условия (7), то $\det G_k(t)=\dfrac{\delta_k(t)}{\overline{\delta_k(t)}}\neq 0,\ t\in L$. Следовательно, условия (7) необходимы и достаточны для *нетеровости* обеих векторно-матричных задач вида (8) (см., например, [3], с. 51).

Из приведенных выше рассуждений видно, что в случае, когда $L=\{t:|t|=1\}$ и выполняются условия (7), проблема исследования задачи GR_4 в классах кусочно-бианалитических функций сводится в основном к проблеме исследования двух векторно-матричных задач Римана вида (8). Известно, что в общем случае решение векторно-матричных задач такого вида сводится к решению определенных систем интегральных уравнений Фредгольма второго рода (см., например, [3], гл. 1 или [4], гл. 1). Поскольку законченного решения метод интегральных уравнений не дает (как в смысле установления условий разрешимости, так и в смысле эффективного получения самих решений), то очень важно установление частных случаев, когда векторно-матричные задачи вида (8) допускают вполне конструктивные и эффективные решения.

Структура матриц $G_k(t)$ ($k=1,2$) в краевых условиях (8) позволяет получить конструктивные решения векторно-матричных задач Римана вида (8) (а значит, и поставленной задачи GR_4), например, в следующих трех случаях:

I. *Общий случай*, когда выполняются условия:

$$|A_{k1}(t)|\neq|A_{k2}(t)|\ \text{ и }\ |G_{k1}(t)|\neq|G_{k2}(t)|,\ t\in L,k=1,2; \tag{9}$$

II. *Вырожденный случай*, когда для каждого из двух значений параметра k выполняется одно из следующих условий:

$$|G_{k1}(t)| \equiv |G_{k2}(t)|,\ |A_{k1}(t)| \neq |A_{k2}(t)|,\ t \in L; \tag{10}$$

$$|A_{k1}(t)| \equiv |A_{k2}(t)|,\ |G_{k1}(t)| \neq |G_{k2}(t)|,\ t \in L; \tag{11}$$

$$|G_{k1}(t)| \equiv |G_{k2}(t)|,\ |A_{k1}(t)| \equiv |A_{k2}(t)|,\ t \in L; \tag{12}$$

III. *Полувырожденный случай*, когда при одном значении параметра k выполняется условие (9), а при другом значении этого параметра выполняется одно из условий (10)–(12).

Ниже покажем, что в каждом из указанных случаев задача GR_4 допускает вполне эффективное решение.

3. О решении задачи GR_4. Остановимся сначала на построении конструктивного алгоритма решения исследуемой задачи в случае I. Заметим, что при выполнении условий (7) коэффициент $G_k(t)$ каждой векторно-матричной задачи Римана вида (8) (т.е. задачи, получаемой из (8) при каждом фиксированном значении параметра k) обладает следующим важным свойством: *все главные миноры матрицы $G_k(t)$ отличны от нуля на L*. Но при выполнении этого условия известно (см., например, [1], §18), что векторно-матричная задача Римана для аналитических функций допускает вполне конструктивное решение. В самом деле, перепишем в развернутом виде матричное равенство (8):

$$\psi_{k1}^{+}(t) = \frac{|G_{k1}(t)|^2 - |G_{k2}(t)|^2}{\overline{\delta_k(t)}}\psi_{k1}^{-}(t) + \frac{\beta_k(t)}{\overline{\delta_k(t)}}\psi_{k2}^{-}(t) + \frac{\overline{G_{k1}(t)}g_k(t) - G_{k2}(t)\overline{g_k(t)}}{t\overline{\delta_k(t)}}, \tag{13}$$

$$\psi_{k2}^{+}(t) = -\frac{\overline{\beta_k(t)}}{\overline{\delta_k(t)}}\psi_{k1}^{-}(t) + \frac{|A_{k1}(t)|^2 - |A_{k2}(t)|^2}{\overline{\delta_k(t)}}\psi_{k2}^{-}(t) + \frac{\overline{A_{k2}(t)}g_k(t) - A_{k1}(t)\overline{g_k(t)}}{t^2\overline{\delta_k(t)}}. \tag{14}$$

Вводя обозначения

$$Q_{k1}(t) = \frac{\beta_k(t)}{\overline{\delta_k(t)}}\psi_{k2}^{-}(t) + \frac{\overline{G_{k1}(t)}g_k(t) - G_{k2}(t)\overline{g_k(t)}}{t\overline{\delta_k(t)}}, \quad k = 1, 2, \tag{15}$$

равенства (13), в свою очередь, можно записать так:

$$\psi_{k1}^{+}(t) = \frac{|G_{k1}(t)|^2 - |G_{k2}(t)|^2}{\overline{\delta_k(t)}}\psi_{k1}^{-}(t) + Q_{k1}(t), \quad k = 1, 2. \tag{16}$$

Далее, если временно рассматривать $Q_k(t), t \in L$ (при фиксированном значении k) как известную функцию, то равенство (16) будет представлять собой краевое условие скалярной задачи Римана относительно неизвестной кусочно-аналитической функции $\psi_{k1}^{\pm}(z)$, исчезающей на бесконечности.

Пусть

$$Ind\left(\frac{|G_{k1}(t)|^2 - |G_{k2}(t)|^2}{\overline{\delta_k(t)}}\right) = Ind\,\delta_k(t) = \chi_k, \quad k = 1, 2.$$

Тогда, как известно (см., например, [2], с. 113), при $\chi_k \geq 0$ скалярная задача Римана вида (16) (при каждом фиксированном k) безусловно разрешима и ее общее решение задается так:

$$\psi_{k1}^{\pm}(z) = \mathrm{X}_k^{\pm}(z)\left(\frac{1}{2\pi i}\int_L \frac{Q_{k1}(\tau)}{\mathrm{X}_k^{+}(\tau)}\frac{d\tau}{\tau - z} + P_{\chi_k - 1}(z)\right), z \in T^{\pm}, \tag{17}$$

где $\mathrm{X}_k^{\pm}(z)$ – каноническая функция задачи, $P_{\chi_k - 1}(z)$ – полином степени $\chi_k - 1$ с произвольными комплексными коэффициентами. Если же $\chi_k < 0$, то решение задачи Римана (16) также дается формулой (17), где нужно положить $P_{\chi_k - 1}(z) \equiv 0$, при соблюдении следующих $-\chi_k$ условий разрешимости:

$$\int_L \frac{Q_{k1}(\tau)}{X_k^+(\tau)}\tau^{j-1}d\tau = 0, \quad j = 1,2,...,-\chi_k .$$

Подставив граничное значение функции $\psi_{k1}^-(z)$, найденной по формуле (17), в равенство (14), получим краевое условие *обобщенной* скалярной задачи Римана относительно исчезающей на бесконечности кусочно-аналитической функции $\psi_{k2}^{\pm}(z)$:

$$\psi_{k2}^+(t) - \frac{|A_{k1}(t)|^2 - |A_{k2}(t)|^2}{\overline{\delta_k(t)}}\psi_{k2}^-(t) + \int_L B_{k2}(t,\tau)\psi_{k2}^-(\tau)d\tau = Q_{k2}(t), \quad t \in L, \quad k = 1,2, \qquad (18)$$

где $B_{k2}(t,\tau)$ – фредгольмово ядро, $Q_{k2}(t)$ – функция класса $H(L)$, вполне определенным образом выражаемые через известные функции $A_{kj}(t), G_{kj}(t), g_k(t)$ $(j = 1,2)$.

Ясно, что при выполнении условий (7) и (9) обобщенная скалярная задача Римана (18) является задачей нормального типа и в этом случае она допускает конструктивное решение (см., например, [1], § 2).

Наконец, решая (при каждом фиксированном значении параметра k) обобщенную задачу Римана (18), например, пользуясь методом, предложенным в [1], определим функции $\psi_{k2}^{\pm}(z)$. Затем, подставив граничные значения найденной функции $\psi_{k2}^-(z)$ в выражение для свободного члена краевого условия (16) и решив обычную задачу Римана (16), определим кусочно-аналитическую функцию $\psi_{k1}^{\pm}(z)$. По найденным функциям $\psi_{k1}^{\pm}(z)$ и $\psi_{k2}^{\pm}(z)$, пользуясь формулами (6), определим кусочно-аналитические функции $\Phi_k^{\pm}(z), k = 1,2$. Тогда, с учетом начального условия (2), нетрудно восстановить аналитические компоненты искомой кусочно-бианалитической функции $F^{\pm}(z)$:

$$\varphi_1^{\pm}(z) = \frac{1}{2z}\left(\Phi_1^{\pm}(z) - \Phi_2^{\pm}(z)\right), \ \varphi_0^{\pm}(z) = \int_{\Gamma^{\pm}} \frac{1}{2\zeta}\left(\Phi_1^{\pm}(\zeta) + \Phi_2^{\pm}(\zeta) - 2\frac{d\varphi_1^{\pm}(\zeta)}{d\zeta}\right)d\zeta ,$$

где Γ^+ (Γ^-) – произвольная гладкая кривая, лежащая в T^+ (T^-) и соединяющая точки 0 и z (∞ и z). Следовательно, в силу (3), решение искомой задачи GR_4 можно получить по формуле:

$$F^{\pm}(z) = \frac{1}{2z}\left(\Phi_1^{\pm}(z) - \Phi_2^{\pm}(z)\right) + \bar{z}\int_{\Gamma^{\pm}} \frac{1}{2\zeta}\left(\Phi_1^{\pm}(\zeta) + \Phi_2^{\pm}(\zeta) - 2\frac{d\varphi_1^{\pm}(\zeta)}{d\zeta}\right)d\zeta , \ z \in T^{\pm} .$$

Таким образом, справедливо следующее утверждение.

Теорема 3.1. *Если на* $L = \{t : |t| = 1\}$ *выполняются условия* (7) *и* (9)*, то решение задачи* GR_4 *сводится к последовательному решению двух обобщенных скалярных задач Римана вида* (18) *и двух обычных скалярных задач Римана вида* (16) *в классах исчезающих на бесконечности кусочно-аналитических функций с линией скачков* L.

Очевидно, что в *вырожденном* (II) и *полувырожденном* (III) случаях можно применить тот же алгоритм решения задачи GR_4, что и в рассмотренном *общем случае*. Например, если коэффициенты поставленной задачи обладают одним из свойств (10), (11) или (12) (случай II), то решение каждой векторно-матричной задачи Римана вида (8) будет сводиться к решению двух скалярных задач Римана в классах кусочно-аналитических функций, исчезающих на бесконечности (см. формулы (13), (14)). Соответственно, с учетом рассуждений п. 2, для решения задачи GR_4 потребуется решить четыре обычные скалярные задачи Римана. Аналогично, в случае III решение искомой задачи GR_4 сводится к решению четырех скалярных задач Римана в классах аналитических функций, исчезающих на бесконечности: одной обобщенной задачи вида (18) и трех обычных задач вида (16).

Замечание 3.1. Так как в вырожденном случае (II) решение задачи GR_4 редуцируется к решению четырех обычных скалярных задач Римана, то в этом случае решение задачи GR_4 (в случае ее разрешимости) можно получить явно в интегралах типа Коши, т.е. при выполнении усло-

вия (7) и одного из условий (10)–(12) исследуемая задача допускает решение в замкнутой форме (в квадратурах).

4. О качественном исследовании задачи GR_4. Картину разрешимости задачи GR_4 и вывод о ее нетеровости несложно установить основываясь на теореме 3.1. Действительно, из теоремы 3.1 видно, что картина разрешимости задачи GR_4 определяется на основании картин разрешимости двух обобщенных скалярных задач Римана вида (18) и двух обычных задач Римана вида (16). При этом важно заметить, что индексы этих задач (для каждого фиксированного значения k) совпадают:

$$Ind\left(\frac{|G_{k1}(t)|^2-|G_{k2}(t)|^2}{\overline{\delta_k(t)}}\right)=Ind\left(\frac{|A_{k1}(t)|^2-|A_{k2}(t)|^2}{\overline{\delta_k(t)}}\right)=Ind\delta_k(t)=\chi_k,\quad k=1,2.$$

Следовательно, для полного изучения картины разрешимости задачи GR_4 на основании картин разрешимости краевых задач Римана вида (18) и (16), следует рассмотреть следующие четыре различных случая, которые полностью охватывают все возможные ситуации:

1) $\chi_1\ge 0,\ \chi_2\ge 0$; 2) $\chi_1<0,\ \chi_2\ge 0$; 3) $\chi_1\ge 0,\ \chi_2<0$; 4) $\chi_1<0,\ \chi_2<0$.

Далее, пользуясь схемой исследования картины разрешимости обобщенной задачи Римана вида (18), приведенной в монографии [1], нетрудно установить справедливость следующего утверждения.

Теорема 4.1. *Если на* $L=\{t:|t|=1\}$ *выполняются условия* (7) *и* (9)*, то число линейно независимых решений однородной задачи* GR_4^0 *и число условий разрешимости неоднородной задачи* GR_4 *конечны, то есть задача* GR_4 *является нетеровой.*

Литература

1. Расулов К.М. Краевые задачи для полианалитических функций и некоторые их приложения. – Смоленск: СГПУ, 1998. – 343 с.
2. Гахов Ф.Д. Краевые задачи. – М.: Наука, 1977. – 640 с.
3. Литвинчук Г.С. Краевые задачи и сингулярные интегральные уравнения со сдвигом. – М.: Наука, 1977. – 448 с.
4. Векуа Н.П. Системы сингулярных интегральных уравнений. – М.: Наука, 1970. – 379 с.

Поступила в редакцию 23 июня 2006 г.

УДК 512.54

КОНЕЧНЫЕ НЕРАЗРЕШИМЫЕ ГРУППЫ С НЕТРИВИАЛЬНЫМ ЦЕНТРОМ И МАЛЫМИ ЦЕНТРАЛИЗАТОРАМИ НЕЦЕНТРАЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

И.А. Тюрина

Получено описание конечных неразрешимых групп с нетривиальным центром, удовлетворяющих условию: порядки централизаторов нецентральных элементов группы в своем представлении в виде произведения простых чисел имеют не более пяти сомножителей.

1. Введение и основные допущения. Через $w(n)$ условимся обозначать количество множителей в представлении натурального числа n в виде произведения простых чисел. Если H – подгруппа конечной группы G, то $w(H)=w(|H|)$ и

$$v(G)=\max\left\{w(C(g))\,\middle|\, g\in G\setminus Z(G)\right\}. \qquad (1)$$

В работах [1] и [2] исследованы конечные неабелевы группы с условием $v(G)=2$ и $v(G)=3$ соответственно. В [3, 4] описаны конечные группы с условием $v(G)=4$, а в работах [5] и [6] изучены неразрешимые группы без центра с условием $v(G)=5$. В предлагаемой работе исследуется строение неразрешимых групп с нетривиальным центром и с условием $v(G)=5$.

Если p – нечетное простое число, то положим

$$l(p^n)=\begin{cases}\max\left\{w(p^n-1),\ w\left(\dfrac{p^n+1}{2}\right)\right\}, & \text{если } p^n\equiv 1(4),\\ \max\left\{w(p^n+1),\ w\left(\dfrac{p^n-1}{2}\right)\right\}, & \text{если } p^n\equiv -1(4).\end{cases} \qquad (2)$$

Кроме того, положим

$$l^*(p^n)=\max\left\{w(p^n-1), w(p^n+1)\right\}. \qquad (3)$$

Через E_{p^n} условимся обозначать элементарную абелеву группу порядка p^n. В дальнейшем p – всегда нечетное простое число.

Пусть G – неразрешимая группа, $v(G)=5$ и $Z(G)\neq 1$. Предположим, что $Z_2(G)>Z(G)$. Если $x\in Z_2(G)\setminus Z(G)$ и $\varphi: g\to[g,x]$, то $\mathrm{Ker}(\varphi)=C(x)$ и $G/C(x)$ – абелева группа. Но тогда подгруппа $C(x)$ неразрешима. Так как $C^2(x)=C(C(x))$ – абелева группа, то фактор-группа $H=C(x)/C^2(x)$ неразрешима. Из условий $w(C(x))\le 5$ и $w(C^2(x))\ge 2$ следует, что $w(H)\le 3$, что противоречит неразрешимости группы H. Поэтому $Z_2(G)=Z(G)$ и $G/Z(G)$ – группа без центра. Отметим еще, что $v(G/Z(G))\le v(G)$. Это следует из того, что

$$\left|C_{G/Z(G)}(xZ(G))\right|=\frac{|C(x)|\cdot\left|Z(G)\cap\left\{[x,g]\,\middle|\, g\in G\right\}\right|}{|Z(G)|}. \qquad (4)$$

В самом деле, пусть $H/Z(G)=C_{G/Z(G)}\left(xZ(G)\right)$. Рассмотрим гомоморфизм $\varphi: H\to Z(G)$, заданный формулой $h^{\varphi}=[h,x]$. Тогда $\mathrm{Ker}(\varphi)=C(x)$ и $\mathrm{Im}\,\varphi=\left\{[x,h]\middle|h\in H\right\}=$ $=\left\{[x,g]\middle|g\in G\right\}\cap Z(G)$. Поэтому $|H|=|C(x)|\cdot\left|Z(G)\cap\left\{[x,g]\middle|g\in G\right\}\right|$.

Из работ [1–6] следует, что неразрешимые конечные группы без центра с условием $v(G)=n\le 5$ исчерпываются группами следующих типов.

A. Простые группы.

1) $n=2$: $PSL(2,5)$;

2) $n=3$: $PSL(2,q)$, $q\in\left\{2^3,3^2,3^3,5^3,p\right\}$, где $l(p)=3$;

3) $n=4$: A_7; $PSL(2,q)$, $q\in\left\{2^4,5^2,7^3,p\right\}$, где $l(p)=4$;

4) $n=5$: M_{11}; J_1; $PSL(3,3)$; $PSL(2,q)$, $q\in\left\{3^4,7^2,11^2,13^2,p\right\}$, где $l(p)=5$; $PSL\left(2,p^3\right)$, где $l\left(p^3\right)=5$; $PSL\left(2,p^5\right)$, где $p=2$ или $l\left(p^5\right)\le 5$.

B. Группы автоморфизмов простых групп.

1) $n=3$: $PGL(2,5)$;

2) $n=4$: $PGL(2,q)$, $q\in\left\{3^2,3^3,p\right\}$, где $l^*(p)=3$; $PSL(2,q)\lambda\langle\tau\rangle$, $q\in\left\{2^3,3^3\right\}$, τ – полевой автоморфизм порядка 3; $PSL\left(2,3^2\right)\cdot\langle t\rangle$, где t – произведение полевого и диагонального автоморфизмов;

3) $n=5$: $PGL(2,q)$, $q\in\left\{5^2,5^3,7^3,p\right\}$, где $l^*(p)=4$; $PSL(2,q)\lambda\langle\tau\rangle$, $q\in\left\{2^4,3^2\right\}$, τ – полевой автоморфизм порядка 2; $PSL\left(2,5^2\right)\cdot\langle t\rangle$, где t – произведение полевого и диагонального автоморфизмов; $\mathrm{Aut}\left(PSL(2,q)\right)$, $q\in\left\{3^2,3^3\right\}$.

C. Расширения группы A_5.

$n=5$: $A_5\times H$, H – неабелева группа порядка pq; $\left(A_5\times\langle a\rangle\right)\cdot\langle\tau\rangle$, где $A_5\cdot\langle\tau\rangle\cong S_5$, $|a|=p$, τ инвертирует a.

D. Расширения абелевых групп.

1) $n=4$: $E_{p^3}\lambda PSL(2,5)$, $p\equiv\pm1(10)$; $G/E_{5^3}\cong PSL(2,5)$;

2) $n=5$: $H\lambda SL(2,5)$ – группа Фробениуса и $2\le w(H)\le 5$; $E_{5^2}\lambda\ SL(2,5)$; $\left(E_{5^2}\times E_{p^2}\right)\lambda SL(2,5)$, $E_{p^2}\lambda SL(2,5)$ – группа Фробениуса; $\left(\langle a\rangle\times\langle b\rangle\right)\lambda SL(2,5)$, $|a|=|b|=25$; две группы типа $E_{5^4}\lambda SL(2,5)$; две группы типа $E_{p^4}\lambda SL(2,5)$, $p\ne 5$; $E_{p^3}\lambda\left(\langle a\rangle\times PSL(2,5)\right)$, $p\equiv\pm1(10)$, $p\equiv1(3)$, $|a|=3$, $E_{p^3}\lambda\langle a\rangle$ – группа Фробениуса; $E_{p^3}\lambda PSL(2,7)$, $p^3\equiv1(7)$; $G/E_{5^3}\cong PGL(2,5)$.

В пункте *D* действие соответствующих групп на абелевой группе определено в работах [5–7].

2. Основная теорема. Целью данной работы является доказательство следующей теоремы.

ТЕОРЕМА. *Пусть G – конечная неразрешимая группа с нетривиальным центром. Если $v(G)=5$, то G – одна из следующих групп:*

1) $G=H\times Z(G)$, H – группа одного из типов A.1) – A.3) или D.1), $w\left(Z(G)\right)=5-v(H)$;

2) $G/Z(G)-$ *группа одного из типов B.1) или B.2),* $G'\cap Z(G)=1$ *и* $w(Z(G))=5-v(G/Z(G))$;

3) $G=H\cdot Z(G)$, $H\cong SL(2,q)$ *и* $w(Z(G))=4$, *если* $q=5$; $w(Z(G))=3$, *если* $q=p$, $l^*(p)=3$; $w(Z(G))=2$, *если* $q\in\{3^3,5^2,5^3,7^3,p\}$, *где* $l^*(p)=4$; $w(Z(G))=1$, *т.е.* $G\cong SL(2,q)$, *если* $q\in\{3^4,7^2,11^2,13^2,p_1,p_2^3\}$, *где* p_1,p_2- *нечетные простые числа,* $l^*(p_1)=5$ *и* $l^*(p_2^3)=5$;

4) $G\cong A_7^*/\langle k^n\rangle$, *где* A_7^*-*универсальная накрывающая группы* A_7, $\langle k\rangle-$ *мультипликатор Шура группы* A_7, *а* $n\in\{2,3,6\}$;

5) $G=H\cdot Z(G)$, *где либо* $H\cong PSL(2,9)^*$ *или* $SL(2,9)$ *и* $w(Z(G))=3$, *либо* $H\cong PSL(2,9)^*/\langle k^2\rangle$ *или* $w(Z(G))=2$;

6) $G/Z(G)\cong PGL(2,q)$ *и* $G'\cong SL(2,q)$, *при этом* $w(Z(G))=1$, *если* $q\in\{5^2,7^3,p\}$, *где* $l^*(p)=4$; $w(Z(G))=2$, *если* $q\in\{3^3,5^3,p\}$, *где* $l^*(p)=3$; $w(Z(G))=3$, *если* $q=5$;

7) $G/Z(G)\cong PGL(2,9)$ *и при этом либо* $G'\cong SL(2,9)$ *или* $PSL(2,9)^*$ *и* $w(Z(G))=2$, *либо* $G'\cong PSL(2,9)^*/\langle k^2\rangle$ *и* $w(Z(G))=1$;

8) $G\cong SL(2,q)\lambda\langle\tau\rangle$, $q\in\{3^2,3^3\}$, $\tau-$ *нетривиальный полевой автоморфизм;*

9) $G/Z(G)\cong PSL(2,q)\cdot\langle t\rangle$, $q\in\{3^2,5^3\}$, $t-$ *произведение полевого и диагонального автоморфизмов, и если* $q=5^2$, *то* $G'\cong SL(2,5^2)$ *и* $w(Z(G))=1$, *а если* $q=3^2$, *то* $G'\cong PSL(2,9)^*/\langle k^n\rangle$, *где* $k\in\{2,3,6\}$ *и* $w(Z(G))=2$;

10) $G\cong E_{p^3}\lambda SL(2,5)$, $p\equiv\pm1(10)$ *и* $C(E_{p^3})=E_{p^3}\lambda\langle\tau\rangle$, *где* $\tau-$ *инволюция из* $SL(2,5)$.

Доказательство. Если $Z(G)\cap G'=1$, то

$$C_{G/Z(G)}(xZ(G))=C(x)/Z(G) \qquad (5)$$

для любого $x\in G$, т.е. $v(G)=v(G/Z(G))+w(Z(G))$. Поэтому фактор-группа $G/Z(G)$ в этом случае изоморфна одной из групп *A.1) – A.3), B.1), B.2)* или *D.1)* и $w(Z(G))=5-v(G/Z(G))$. Если при этом $G/Z(G)$ совпадает со своим коммутантом, т.е. является группой типа A.1) – A.3) или D.1), то из равенства $G=G'\cdot Z(G)$ следует, что $G=G'\times Z(G)$. Таким образом, в случае $Z(G)\cap G'=1$ группа G является группой типа 1) или 2) из условия теоремы.

Предположим теперь, что $Z(G)\cap G'\neq1$, и пусть $G/Z(G)-$ группа одного из типов A.1) – A.4). Тогда $G=G'\cdot Z(G)$ и G' является накрывающей для группы $G/Z(G)$. Случаи $G/Z(G)\cong M_{11}$, J_1, $PSL(3,3)$ или $PSL(2,2^n)$ при $n>2$ невозможны, так как в этих случаях мультипликатор Шура группы $G/Z(G)$ тривиален.

Пусть $G/Z(G)\cong PSL(2,q)$, $q=p^n$ нечетно и отлично от 9. Тогда $G'\cong SL(2,q)$. В этом случае (см., например, доказательство теоремы 5.9 из [8]) централизатор любого нецентрального элемента x в группе G абелев и

$$|C(x)/Z(G)|\in\left\{q,\frac{q-1}{2},\frac{q+1}{2}\right\}. \qquad (6)$$

Поэтому $G = SL(2,q)\cdot Z(G)$. И из равенств

$$v(SL(2,q)) = \max\{l^*(q), w(q)+1\} \text{ и } v(G) = v(SL(2,q)) + w(Z(G)) - 1 \qquad (7)$$

следует, что $G-$ группа типа 3) из условия теоремы.

Предположим теперь, что $G/Z(G) \cong A_7$. Группа A_7 имеет три накрывающие с центрами порядков 2, 3, и 6, соответственно. Заметим, что элемент простого порядка r из $Z(G)\cap G'$ увеличивает на единицу значение $w(C(x))$ для r'-элемента x из A_7 и не меняет $w(C(x))$ для элемента x порядка r. Так как в группе A_7 для элементов порядка 2 и 3 выполняется равенство $w(C(x)) = 4$, то в любом случае $v(G') = 5$, т.е. $G = G' \cong A_7^* / \langle k^n \rangle$, где $\langle k \rangle -$ мультипликатор Шура группы A_7 и $n \in \{2,3,6\}$, т.е. $G-$ группа типа 4 из условия теоремы.

Пусть $G/Z(G) \cong PSL(2,9)$. Мультипликатор Шура группы $PSL(2,9)$ тоже является циклической группой порядка 6. Так как в группе $PSL(2,9)$ для элемента x порядка 3 выполняется равенство $w(C(x)) = 2$, а для элемента x порядка 2 – равенство $w(C(x)) = 3$, то $v(G') = 4$ в случае $G' \cong PSL(2,9)^*$ или $PSL(2,9)^* / \langle k^3 \rangle$, где $\langle k \rangle -$ мультипликатор Шура группы $PSL(2,9)$, и $v(G') = 3$ в случае $G' \cong PSL(2,9)^* / \langle k^2 \rangle$, т.е. в этом случае $G-$ группа типа 5 из условия теоремы.

Пусть теперь $G/Z(G) \cong PGL(2,q)$. Тогда $G'\cdot Z(G)/Z(G) \cong PSL(2,q)$. Положим $G'\cdot Z(G) = H$. Тогда $H'\cdot Z(G) = H$ и $H/H' -$ центральная подгруппа порядка 2 из G/H'. Поэтому $G/H' -$ абелева группа, т.е. $H' = G'$. Но тогда $G'' = H'' = H' = G'$. Отсюда $G' \cap Z(G) = G'' \cap Z(G')$ и, следовательно, G' является накрывающей для группы $G'/(G' \cap Z(G)) \cong PSL(2,q)$.

Если $q \neq 9$, то снова $G' \cong SL(2,q)$. В этом случае (см. доказательство теоремы 5.9 из [8]) централизаторы нецентральных элементов в группе G исчерпываются подгруппами порядков $q\cdot|Z(G)|$ и $(q\pm 1)\cdot|Z(G)|$, т.е. мы получаем группы типа 6) из условия теоремы.

Предположим, что $q = 9$. Тогда $G' \cong PSL(2,9)^* / \langle k^n \rangle$, где $n \in \{2,3,6\}$. Если $n = 3$, т.е. $G' \cong SL(2,9)$, то из $l^*(9) = 3$ следует, что $w(Z(G)) = 2$. А если $G' \cong PSL(2,9)^*$ или $PSL(2,9)^* / \langle k^2 \rangle$ и $\bar{\tau} -$ центральная инволюция из $G/Z(G)$, то из условия $|C_{G/Z(G)}(\tau Z(G))| = 16$ следует, что порядок силовской 2-подгруппы S из $C(\tau)$ равен 16. Так как $C(\tau) = S\cdot Z(G)$ и $|Z(G)\cap G'|$ равен 6 или 3, то

$$|C(\tau)| = 48\cdot|Z(G)/(Z(G)\cap G')|. \qquad (8)$$

Поэтому из $w(48) = 5$ следует, что $Z(G) \le G'$ и, следовательно, $w(Z(G)) = 2$ в первом случае и $w(Z(G)) = 1$ во втором случае, т.е. $G-$ группа типа 7 из условия теоремы.

Рассмотрим теперь случай, когда $G/Z(G) \cong PSL(2,q)\lambda\langle\tau\rangle$. В этом случае снова $G' -$ эпиморфный образ $PSL(2,q)^*$. И из равенства $PSL(2,2^n)^* = PSL(2,2^n)$ при $n > 2$ следует, что $q = 3^2$ или 3^3. Если $q = 3^3$, то из $C(\tau) \ge \langle\tau\rangle \times SL(2,3)$ и условия $v(G) = 5$ следует, что $w(Z(G)) = 1$, т.е. $G \cong SL(2,3^3)\lambda\langle\tau\rangle$. В случае и $q = 9$ и $G' \cong SL(2,9)$ аналогично получим

$G \cong SL(2,9)\lambda\langle\tau\rangle$. А если $G' \cong PSL(2,9)^*$ или $PSL(2,9)^*/\langle k^2\rangle$, то из $C_{PSL(2,9)}(\tau) \cong PGL(2,3)$ получим $v(G) > 5$.

Пусть $G/Z(G) \cong PSL(2,q)\langle t\rangle$, где $t-$ произведение полевого и диагонального автоморфизмов. В этом случае силовская 2-подгруппа группы $G/Z(G)$ диэдральна. Как и выше, $G'-$эпиморфный образ группы. В случае $q = 5^2$ для центральной инволюции $\bar{i} \in G/Z(G)$ выполняется равенство $|C(i)| = 24 \cdot |Z(G)|$, т.е. в этом случае $w(Z(G)) = 1$. Если же $q = 9$, то $|C(i)| = 8 \cdot |Z(G)|$ и, следовательно, $w(Z(G)) = 2$.

Пусть $G/Z(G) \cong \overline{A_5} \times \bar{H}$, $|\bar{H}| = pq$. Если $\bar{a}-$ элемент порядка 3 из $\bar{H}$, $g-$ элемент порядка q из A_5 и $z = [a,g]$, то из $z^p = [a^p, g] = 1 = [a, g^q] = z^q$ следует, что либо $z = 1$, либо $q = p$. Во втором случае элемент a перестановочен с силовской 2-подгруппой из T, где $\bar{T} = \overline{A_5} \times \langle\bar{a}\rangle$, а следовательно и с подгруппой, порожденной этими силовскими 2-подгруппами. Но тогда $\overline{C(a)} = \bar{T}\langle\bar{a}\rangle$ и $w(C(a)) > 5$, т.е. этот случай невозможен. В случае $G/Z(G) = (\bar{H} \times \langle\bar{a}\rangle)\langle\bar{\tau}\rangle$, где $\bar{H} \cong A_5$, аналогично получим $\overline{C(a)} = \bar{H} \times \langle\bar{a}\rangle$, что невозможно.

Пусть $G/Z(G)-$расширение группы E_{p^3}, где $p = 5$ или $p \equiv \pm 1(10)$, с помощью $PSL(2,5)$. Как показано при доказательстве теоремы 1.2 из [3], в этом случае можно считать, что $E_{p^3} = \langle\overline{a_1}\rangle \times \langle\overline{a_2}\rangle \times \langle\overline{a_3}\rangle$, и для силовской 2-подгруппы $\langle\overline{\tau_1}\rangle \times \langle\overline{\tau_2}\rangle$ из $PSL(2,5)$ выполняются равенства $\overline{a_i}^{\overline{\tau_i}} = \overline{a_i}$ и $\overline{a_i}^{\overline{\tau_j}} = \overline{a_i}^{-1}$ при $i \neq j$, где $i, j = 1,2,3$ и $\overline{\tau_3} = \overline{\tau_1} \cdot \overline{\tau_2}$. Но тогда из $[a_i, a_j] \in Z(G)$ следует, что

$$[a_i, a_j] = [a_i, a_j]^{\tau_i} = [a_i, a_j^{-1}]. \qquad (9)$$

Поэтому $[a_i, a_j] = 1$, т.е. $(|G' \cap Z(G)|, p) = 1$. Это означает, что $|G' \cap Z(G)| = 2$ и $G-$ расширение E_{p^3} с помощью $SL(2,5)$, причем инволюция из $SL(2,5)$ действует на E_{p^3} тривиально, т.е. $G-$ группа типа 10) из условия теоремы.

Если $G/Z(G) \cong A\lambda SL(2,5)-$ группа типа *D.2),* то из $SL(2,5)^* = SL(2,5)$ следует, что порядок $|G' \cap Z(G)|$ нечетен. Но тогда если $\bar{\tau}-$ инволюция из $SL(2,5)$, то $w(C(\tau)) > 5$, т.е. этот случай невозможен. Аналогично в случае $G/Z(G) \cong E_{p^3}\lambda(\langle\bar{a}\rangle \times PSL(2,5))$ получим $w(C(a)) > 5$.

Предположим теперь, что $G/Z(G) \cong E_{p^3}\lambda PSL(2,7)$. Из леммы 6.5 работы [7] следует, что в некотором базисе $\{\overline{a_1}, \overline{a_2}, \overline{a_3}\}$ группы E_{p^3} элемент $\bar{x}$ порядка 4 из $PSL(2,7)$ задается матрицей

$$\begin{pmatrix} -r & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & r+\frac{1}{2} & -r-\frac{1}{2} \\ r & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \qquad (10)$$

где r – решение уравнения $2r^2 + r + 1 = 0$ в поле $GF(p)$. Но тогда $C_{G/Z(G)}(\bar{x}) = \langle\bar{x}\rangle \times \langle\overline{a_1}^r \overline{a_2}^r \overline{a_3}\rangle$. Положим $\bar{b} = \overline{a_1}^r \overline{a_2}^r \overline{a_3}$. Так как $w(C_{G/Z(G)}(\bar{b})) = 5$ и $w(C(b)) \leq 5$, то

$G' \cap Z(G) = \langle z \rangle -$ подгруппа порядка p и $z = [b,c]$ для некоторого элемента $\overline{c} \in E_{p^3}$. Но тогда, если $P -$ силовская p-подгруппа группы G, то $[P,x] \le C(b)$. И из $P = [P,x] \cdot C_P(x)$ и $C_P(x) = \langle b,z \rangle$ следует, что $P \le C(b)$, что невозможно.

Случай $G/E_{5^3} \cong PGL(2,5)$ аналогично приводится к противоречию. В этом случае из леммы 6.3. работы [7] следует, что в некотором базисе $\{\overline{a_1}, \overline{a_2}, \overline{a_3}\}$ группы E_{5^3} элемент $\overline{x}$ порядка 4 из $PGL(2,5)$ задается матрицей

$$\begin{pmatrix} 3 & -1 & 1 \\ 3 & 0 & -1 \\ -1 & 3 & 3 \end{pmatrix}, \qquad (10)$$

т.е. $C_{G/Z(G)}(\overline{x}) = \langle \overline{x} \rangle \times \langle \overline{a_1}^2 \overline{a_3} \rangle$. Теорема доказана.

Литература

1. Bianchi, M. Groups with small centralizers of non-central elements / M. Bianchi, O. Manz // Boll. Un. Mat. Ital. (7). – 1990. – V. 4-A. – C. 365–370.

2. Scarcelli, A. Gruppi con piccoli centralizzanti / A. Scarcelli // Boll. Un. Mat. Ital. (7). – 1992. – V.6-B. – C. 649–663.

3. Антонов, В.А. Группы с малыми централизаторами / В.А. Антонов, И.А. Тюрина, А.П. Ческидов // Мат.заметки. – 2001. – Т. 69 – № 5. – С. 643–655.

4. Антонов, В.А. О конечных группах с ограничениями на централизаторы / В.А. Антонов, И.А. Тюрина, А.П. Ческидов // Мат.заметки. – 2002. – Т. 71 – № 4. – С. 483–495.

5. Антонов, В.А. О конечных группах с малыми централизаторами элементов / В.А. Антонов, В.И. Зенков, И.А. Тюрина // Алгебра и лин. оптимиз.: Труды междун. сем. памяти С.Н. Черникова. – Екатеринбург, 2002. – С. 44–46.

6. Антонов, В.А. О группах с малыми централизаторами, 2 / В.А. Антонов, В.И. Зенков, И.А. Тюрина // Междун. конф. «Алгебра и ее приложения»: Тез. докл. – Красноярск, 2002. – С. 5–7.

7. Bloom, D.M. The subgroups of $PSL(3,q)$ for odd q / D.M. Bloom // Trans. Amer. Math. Soc. – 1967. – V. 127. – C. 150–178.

8. Schmidt, R. Zentralizatorferbande endlicher Gruppen / R. Schmidt // Rend. Sem. Math. Univ. Padova. – 1970. – V. 44. – C. 97–131.

Поступила в редакцию 7 августа 2006 г.

УДК 519.63

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИТЕРАЦИОННОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ВТОРОГО ПОРЯДКА

А.Л. Ушаков

Эллиптическая задача второго порядка в прямоугольной области при определенных краевых условиях с помощью методов сумматорных тождеств и итерационной факторизации сводится к системам линейных алгебраических уравнений с треугольными матрицами, в которых количество ненулевых элементов в каждой строке не более трех. Повторяющаяся факторизация оператора, энергетически эквивалентного оператору приближенной решенной задачи, обозначается в данном случае как моделирование интеграционной факторизации, так как оператор исходной задачи не факторизуется точно.

1. Введение. В статье рассматривается эллиптическое уравнение второго порядка в прямоугольнике со сторонами параллельными осям координат при этом на правой и верхней сторонах прямоугольника задано главное краевое условие, а на остальной части границы задано естественное краевое условие. Для численного решения рассматриваемой задачи предлагаются варианты итерационного процесса, использование которых дает убывание ошибки в энергетической норме за каждую итерацию не менее чем в два раза. На каждом шаге итерационного процесса возникают две системы уравнений с нижне- и верхнетреугольными матрицами, в которых количество ненулевых элементов в каждой строке не более трех. Указываются варианты решения последних систем, когда счет по производным формулам устойчив. Таким образом, найдена и указана чистая задача для эллиптического уравнения второго порядка, которая после аппроксимации по методу сумматорных тождеств не факторизуется, но имеет факторизующийся переобуславливатель наиболее естественной конструкции, как, например, в попеременно треугольном методе.

2. Непрерывная задача второго порядка. Рассматривается задача:

$$u \in W : A(u,v) = C(v)\ \forall v \in W,\ C \in W', \tag{1}$$

где

$$W = W(\Omega) = \left\{ v \in W_2^1(\Omega) : v\big|_{\Gamma_1} = 0 \right\},$$

$$\Omega = (0,b_1)\times(0,b_2),\ \ b_1,\ b_2 \in (0,\infty),$$

т.е. исследуется задача в прямоугольной области,

$$\Gamma_1 = \{b_1\}\, x\, [0,b_2)\, v\, [0,b_1]\, x\, \{b_2\}$$

и билинейная форма

$$A(u,v) = \int_\Omega (u_x v_x + u_y v_y + c\,u\,v)\, d\Omega, \quad c \in [0,\infty).$$

Заметим, основываясь на [1, 2], что

$$\exists c_1\, c_2 \in (0,\infty):\ \ c_1 \|v\|^2_{w_2^1(\Omega)} \le A(u,u) \le c_2 \|v\|^2_{W_2^1(\Omega)},\ \ \forall v \in W$$

следовательно, решение задачи (1) существует и единственно [1, 3].

Можно отметить, что при достаточно гладком решении задачи (1), как следствии, например, того, что, если

$$l(v) = \int_\Omega f v d\Omega,$$

где f – достаточно гладкая функция, имеем $(\Gamma = d\Omega)$:

$$\int_\Omega (u_x\, v_x - u_y\, v_y + cuv)\, d\Omega =$$

$$= \int_{\Omega}(-u_{xx}\,v - u_{yy}\,v + cuv)d\Omega +$$

$$+ \int_{\Gamma}\left(u_x\,v\cos(n,x) + u_y\,v\cos(n,y)\right)d\Gamma =$$

предыдущее равенство имеет место, т.к. [1]

$$\int_{\Omega} W\,v_z\,d\Omega = -\int_{\Omega} W_z\,v\,d\Omega + \int_{\Gamma} W\,v\cos(n,z)d\Gamma, z = x, y$$

$$= \int_{\Omega}(-u_{xx} - u_{yy} + cu)vd\Omega + \int_{\Gamma_2}\frac{\partial u}{\partial u}vd\Gamma_2 = \int_{\Omega} f\,v\,d\Omega$$

таким образом, задача (1) при сделанных выше предположениях представляется в следующем виде $(\Gamma_2 = \Gamma \setminus \Gamma_1)$

$$-\Delta u + cu = -u_{x^2} - u_{y^2} + cu = f,$$

$$u/\Gamma_1 = 0, \frac{\partial n}{\partial n}/\Gamma_2 = 0$$

3. Дискретная задача второго порядка. Рассматривается система линейных алгебраических уравнений, получающихся при дискретизации задачи (1) на основе метода сумматорных тождеств [4–8]

$$\begin{aligned} &\bar{u} \in \mathbb{R}^N : A\bar{u} = \bar{l}, \\ &\bar{l} \in \mathbb{R}^N, \end{aligned} \tag{2}$$

где

$$\bar{v} \in \mathbb{R}^N : \bar{v} = (v_{1,\ldots,}v_N), N = mn, m, n \in \mathbb{N},$$

при этом считается, что

$$V_{m(j-1)+i} = v_{i,j}, i = 1,\ldots,m, j = 1,\ldots,n,$$

а $v_{i,j}$ являются значениями функций дискретного аргумента соответствующего узлами сетки

$$(x_i, y_j) = ((i-0{,}5)h_1, (j-0{,}5)h_2), i, j \in \mathbb{Z},$$

$$h_1 = b_1/(m+0{,}5), h_2 = b_2/(n+0{,}5)$$

шаги сетки, состоящей из указанных выше узлов сетки, а матрица размерности $N \times N$, определяемая следующим образом:

$$(A\bar{u},\bar{v}) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}((u_{i+1,}j - u_{i,j})(v_{i+1,j} - v_{i,j})h_1^{-2} +$$

$$+(u_{i,j+1} - u_{i,j})(v_{i,j+1} - v_{i,j})h_2^{-2} + cu_{i,j}v_{i,j})h_1h_2$$

$$u_{i,n+1} = v_{i,n+1} = 0, i = 1,\ldots,m, u_{m+1,j} = v_{m+1,j} = 0, j = 1,\ldots,n,$$

здесь (.,.) – скалярное произведение векторов следующего вида:

$$(\bar{u},\bar{v}) = \sum_{j=1}^{N} u_j v_j h_1 h_2 \forall \bar{u},\bar{v} \in \mathbb{R}^N,$$

и вектор $\bar{l}$ определяется по функционалу $l(\cdot)$ с учётом краевых условий. Отметим, что $A > 0$ и, следовательно, решение задачи (2) существует и единственно.

Задача (2) может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} &(2u_{i,j} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j})h_1^{-2} + (2u_{i,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1})h_2^{-2} + \\ &+cu_{i,j} = l_{i,j}, i = 1,\ldots,m, j = 1,\ldots,n, u_{i,0} = u_{i,1} \\ &u_{i,n+1} = 0, i = 1,\ldots m, u_{0,j} = u_{1,j}, u_{m+1,j} = 0, j = 1,\ldots,n. \end{aligned} \tag{3}$$

Можно заметить, что при достаточной гладкости решения задачи (2), например, при

$$l_{i,j} = \int_{\Omega} f\delta(x_i, y_j)d\Omega = f(x_i, y_j), i = 1,...,m, j = 1,...,n$$

задача (3) аппроксимирует задачу (2) со вторым порядком.

4. Решение дискретной задачи второго порядка

Утверждение 1. Если для матриц $Q_j, j = 1,2$ имеет место неравенство

1) $Q_j + Q_j^{'} > 0,\ j = 1,2,$

то тогда выполняются и неравенства

2) $Q_2 > 0, Q_1' > 0,$

3) $Q_2 \times Q_1' > 0,$

4) $(Q_2 \times Q_1')' > 0,$

5) $Q_2 \times Q_1' + (Q_2 \times Q_1')' > 0.$

Доказательство. 1) $\Rightarrow 2) \Rightarrow 3) \Rightarrow 4) \Rightarrow 5)$ см., например, [9].Определим матрицы ∇_x, ∇_y размерности N x N

$$(\nabla_x \bar{u}, \bar{v}) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}(-(u_{i+1,j} - u_{i,j})h_1^{-1})v_{i,j}h_1h_2,$$

$$(\nabla_y, \bar{u}, \bar{v}) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}(-(u_{i,j+1} - u_{i,j})h_1^{-1})v_{i,j}h_1h_2,$$

$$u_{i,n+1} = v_{i,n+1} = 0, i = 1,...,m, u_{m+1,j} = v_{m+1,j} = 0, j = 1,...,n.$$

Дополнительно введём матрицы: $\nabla_i, j = 1,2$ размерности $p \times p$, где $p = (2-j)m + (j-1)n,$ которые связаны с предыдущими матрицами следующим образом:

$$\nabla_x = E_n \times \nabla_1, \nabla_y = \nabla_2 \times E_m .$$

Здесь E_n E_m единичные матрицы размерности $n \times n$ и $m \times m$ соответственно.

Утверждение 2. Имеют место следующие отношения:

1) $\nabla_x' + \nabla_x = E_n \times \nabla_1' + (E_n \times \nabla_1')' > 0,$

2) $\nabla_y + \nabla_y' = \nabla_2 \times E_m' + (\nabla_2 \times E_m')' > 0,$

3) $\nabla_x' \nabla_y + \nabla_y' \nabla_x = \nabla_2 \times \nabla_1' + (\nabla_2 \times \nabla_1')' > 0.$

Доказательство. Следует из утверждения 1. Определим матрицу U при

$\gamma \in (0,8), d \in [0,8)$:

$$(U\bar{u}, V\bar{v}) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\gamma(-(u_{i+1,j} - u_{i,j})h_1^{-1} - (u_{i,j+1} - u_{i,j})h_2^{-1} +$$

$$+du_{i,j})\gamma(-(v_{i+1,j} - v_{i,j})h_1^{-1} - (v_{i,j+1} - v_{i,j})h_2^{-1} + dv_{i,j})h_1h_2,$$

$$u_{i,n+1} = v_{i,n+1} = 0, i = 1,...,m, u_{m+1,j} = v_{m+1,j} = 0, j = 1,...,n.$$

Возьмём матрицу A:

$$A = A - cE.$$

Здесь и далее $E = E_n$ обозначает единичную матрицу размерности $N \times N$. Можно отметить, что

$$U = \gamma(\nabla_x + \nabla_y + de),$$

$$A = \nabla_x' \nabla_x + \nabla_y' \nabla_{y.}$$

Утверждение 3. Имеют место следующие оценки

$$(2 + \operatorname{sgn} d)^{-1}\gamma^{-2}U'U \le A + d^2E \le \gamma^{-2}U'U .$$

Утверждение 4. Для спектральной задачи

$$\lambda : A\bar{u} = \lambda\bar{v}, \bar{v} \neq 0 .$$

собственные числа имеют вид:

$$\lambda_{m(j-1)+i} = \lambda_{i,j} = 4h_1^{-2}\sin^2\frac{(2i-1)\pi h_1}{4b_1} + 4h_2^{-2}\sin^2\frac{(2j-1)\pi h_2}{4b_2}, i = 1,...,m, j = 1,...,n$$

при этом

$$0 < \min_{k=1,...,N}\lambda_k = \lambda_1 = 4h_1^{-2}\sin^2\frac{\pi h_1}{4b_1} + 4h_2^{-2}\sin^2\frac{\pi h_2}{4b_2},$$

$$\max_{k=1,...,N}\lambda_k = \lambda_N = 4h_1^{-2}\cos^2\frac{\pi h_1}{2b_1} + 4h_2^{-2}\cos^2\frac{\pi h_2}{2b_2} < \infty.$$

Доказательство. Вычисления указанных собственных чисел проводятся аналогично [6].

Утверждение 5. Имеют место оценки

1) $\mathrm{K}(\lambda_1)(\mathrm{A}+d^2\mathrm{E}) \le \mathrm{A} \le \mathrm{K}(\lambda_n)(\mathrm{A}+d^2\mathrm{E}), c \le d^2,$

2) $\mathrm{K}(\lambda_N)(\mathrm{A}+d^2\mathrm{E}) \le \mathrm{A} \le \mathrm{K}(\lambda_1)(\mathrm{A}+d^2\mathrm{E}), d^2 \le c,$

где: $\mathrm{K}(\lambda) = (\lambda + c)(\lambda + d^2)^{-1}$.

Доказательство. Ввиду [6, 10, 11] имеем:

$$\min_{k=1,...,N} K(\lambda_k) \le \frac{(A\bar{v},\bar{v})}{((A+d^2E)\bar{v},\bar{v})} \le \max_{k=1,...,N} K(\lambda_k), \bar{v} \ne 0.$$

При $c \le d^2 (d^2 \le c$ наоборот$)$ $\mathrm{K}'(\lambda) \ge 0,$ т.е. функция $\mathrm{K}(\lambda)$ возрастает в широком смысле и её минимум и максимум при $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_N]$ достигается, соответственно, когда $\lambda = \lambda_1\lambda_N.$ Легко видеть, что при $d^2 = c$ 1) и 2) выполняются, обращаясь в равенства.

Пусть величины $C_1(d), C_2(d)$ такие, что $0 < C_1(d) \le C_2(d) < \infty$ и

$$C_1(d)U'U \le \mathrm{A} \le C_2(d)U'U.$$

Утверждение 6. $C_1(d), C_2(d)$ могут быть вновь выбраны в следующем виде:

$$C_1(d) = (2+\operatorname{sgn} d)^{-1}\gamma^{-2}K(\lambda_1), c \le d^2,$$

$$C_1(d) = (2+\operatorname{sgn} d)^{-1}\gamma^{-2}K(\lambda_N), d^2 \le c,$$

$$C_2(d) = \gamma^{-2}K(\lambda_N), c \le d^2,$$

$$C_2(d) = \gamma^{-2}K(\lambda_1), d^2 \le c.$$

Доказательство. Следует из утверждений 3 и 5.

Утверждение 7. Если $2\lambda_N - 3\lambda_1 \le 0$ или $2\lambda_N - 3\lambda_1 > 0, c < \lambda_1\lambda_N/(2\lambda_N - 3\lambda_1)$ то

$$\frac{1}{3} < \max_{d\in[0,\infty)}\frac{C_1(d)}{C_1(d)} = \frac{C_1(0)}{C_2(0)} = \frac{\lambda_1(\lambda_N + c)}{2\lambda_N(\lambda_1 + c)} \le \frac{1}{2},$$

если $2\lambda_N - 3\lambda_1 > 0, \lambda_1\lambda_N/(2\lambda_N - 3\lambda_1) \le c,$ то

$$\max_{d\in[0,\infty)}\frac{C_1(d)}{C_2(d)} = \frac{C_1(\sqrt{c})}{C_2(\sqrt{c})} = \frac{1}{3}.$$

Утверждение 8. Величина $C_1(d),$ в частности, может быть выбрана в следующем виде:

$$\gamma^{-2}\lambda_1/(2\lambda_1 + 2\sqrt{2\lambda_1} + d + d^2), c = 0, 0 \le d < \infty,$$

$$\gamma^{-2}(\lambda_N + c)/(2\lambda_N + 2\sqrt{2\lambda_N}d + d^2),$$

$$0 \le d < \min\{c\sqrt{2\lambda_N^{-1}}, \sqrt{c}\}.$$

Утверждение 9. Если $2\lambda_N - 3\lambda_1 \le 0$ или $2\lambda_N - 3\lambda_1 > 0, c < \lambda_1\lambda_N/(2\lambda_N - 3\lambda_1),$ то (здесь $C_1(d)$ из утверждения 8):

$$\frac{1}{3} < \sup_{d\in(0,\infty)}\frac{C_1(d)}{C_2(d)} = \frac{C_1(0)}{C_2(0)} = \frac{\lambda_1(\lambda_N + c)}{2\lambda_N(\lambda_1 + c)} \le \frac{1}{2}.$$

Доказательство. Следует из утверждений 7, 8.

Утверждение 10. Величина $C_1(d),$ в частности, может быть выражена в следующем виде:

$$C_1(d) = \gamma^{-2}\lambda_1 /(2\lambda_1 + 2\sqrt{2\lambda}_1 d + d^2), c = 0, 0 \le d < \infty,$$

$$C_1(d) = \gamma^{-2}/3, c > 0, d = \sqrt{c}.$$

Доказательство следует из утверждений 8 и 3.

Введём норму

$$\left\|\bar{v}\right\|_{\mathrm{A}} = \sqrt{(\mathrm{A}\bar{v}, \bar{v})}.$$

Рассматривается итерационный процесс:

$$\begin{gathered} \bar{u}^{k} \in \mathbb{R}^N : U'U(\bar{u}^{k} - \bar{u}^{k-1}) = -\tau_k(A\bar{u}^{k-1} - \bar{l}), \\ k = 1,...,K, K \in N, \forall \bar{u}^{0} \in \mathbb{R}^N, \tau_k = 2(c_1(d) + c_2(d)). \end{gathered} \tag{4}$$

Используется следующая оценка сходимости $\bar{u}^{k}$ к $\bar{u}$:

$$\left\|\bar{u}^{k} - \bar{u}\right\|_{\mathrm{A}} \le \sum \left\|\bar{u}^{0} - \bar{u}\right\|_{\mathrm{A}}, \mathrm{K} \in \mathbb{N}.$$

При этом

$$\sum = \sum(d) = \left(\frac{C_2(d) - C_1(d)}{C_2(d) + C_1(d)}\right)^k = \left(\frac{1 - C_1(d)/C_2(d)}{1 + C_1(d)/C_2(d)}\right)^k.$$

Итерационные параметры τ_k в (4) можно выбирать и на основе вариационных принципов.

Заметим, что в итерационном процессе (4) возникают задачи с факторизованными операторами и следующего вида

$$\bar{u} \in \mathbb{R}^N : U'\bar{w} = \bar{g}, \bar{g} \in \mathbb{R}^N,$$

при этом возможно расщепление на более простые задачи

$$\bar{w} \in \mathbb{R}^N : U'\bar{w} = \bar{g}, \bar{g} \in \mathbb{R}^N,$$

$$\bar{u} \in \mathbb{R}^N : U\bar{u} = \bar{w}, \bar{w} \in \mathbb{R}^N,$$

которые могут быть записаны в таком виде:

$$\begin{gathered} \gamma(w_{i,j} - w_{i-1,j})h_1^{-1} + \gamma(w_{i,j} - w_{i,j-1})h_2^{-1} + \gamma d w_{i,j} = g_{i,j} \\ i = 1,...,m, j = 1,...,n, \\ w_{i,0} = 0, i = 1,...,m, w_{0,j} = 0, j = 1,...,n \end{gathered} \tag{5}$$

и

$$\begin{gathered} -\gamma(u_{i+1,j} - u_{i,j})h_1^{-1} - \gamma(u_{i,j+1} - u_{i,j})h_2^{-1} + \gamma d u_{i,j} w_{i,j} \\ i = 1,...,m,\ j = 1,...,n, \\ u_{i,n+1} = 0, i = 1,...,m,\ u_{m+1,j} = 0,\ j = 1,...,n. \end{gathered} \tag{6}$$

Из (5) можно найти неизвестные

$$w_{i,j}, i = 1,...,m, j = 1,...,n,$$

исходя из формул

$$w_{i,j} = \delta_1 w_{i-1,j} + \delta_2 w_{i,j-1} + \delta_3 g_{i,j} \tag{7}$$

и из (6) находятся неизвестные

$$u_{i,j}, i = m - i_1 + 1, j = n - j_1 + 1, i_1 = 1,...,m, j_1 = 1...,n,$$

исходя из формул

$$u_{i,j} = \delta_1 u_{i+1,j} + \delta_2 u_{i,j+1} + \delta_3 w_{i,j}, \tag{8}$$

где

$$\delta_1 = \gamma h_1^{-1}/\delta_4, \delta_2 = \gamma h_2^{-1}/\delta_4,$$

$$\delta_3 = 1/\delta_4, \delta_4 = \gamma h_1^{-1} + \gamma h_2^{-1} + \gamma d.$$

Отметим, что $\delta_1+\delta_2\le 1$, т.е., в соответствии с [10], имеется пространственная счётная устойчивость для (7), (8). Если $\delta=\delta_{(\gamma)}=\delta_1+\delta_2+\delta_3\le 1,$, то в соответствии с [33, 35] счет по формулам (7), (8) будет устойчив.

Теорема 1. В итерационном процессе (4), если $2\lambda_N-3\lambda_1\le 0\vee 2\lambda_N-3\lambda_1>0$, $c<\lambda_1\lambda_N/(2\lambda_N-3\lambda_1)$ и выбрать $d=0,\gamma$ – достаточно большое, и если

$$\tau_k=\frac{4\lambda_1\lambda_N\gamma^2}{3\lambda_1\lambda_N+c(2\lambda_N+\lambda_1)},$$

то

$$\left(\frac{1}{3}\right)^k\le\sigma=\left(\frac{\lambda_1\lambda_N+c(2\lambda_N-\lambda_1)}{3\lambda_1\lambda_N+c(2\lambda_N+\lambda_1)}\right)^k<\left(\frac{1}{2}\right)^k,$$

а $\delta(\gamma)\to 1$, когда $\gamma\to\infty$.

Если $2\lambda_N-3\lambda_1>0$, $\lambda_1\lambda_N/(2\lambda_N-3\lambda_1)<c$ и взять $d\sqrt{c},\gamma\ge d^{-1}$, $\tau_k=\frac{3\gamma^2}{2}$, то $\sigma=\left(\frac{1}{2}\right)^k$, а $\delta\le 1$.

Доказательство. Следует из утверждений 6, 7.

Теорема 2. В итерационном процессе (4), если $c=0$ и взять $0<d$ достаточно малое $\gamma\ge d^{-1}$,

$$\tau_k=\frac{2(2\lambda_1+2\sqrt{2\lambda_1}d+d^2)(\lambda_N+d^2)\gamma^2}{3\lambda_1\lambda_N+2\sqrt{2\lambda_1}d+(\lambda_N+\lambda_1)d^2},$$

то

$$\sigma=\sigma(d)=\left(\frac{\lambda_1\lambda_N+2\sqrt{2\lambda_1}\lambda_N d+(\lambda_N-\lambda_1)d^2}{3\lambda_1\lambda_N+2\sqrt{2\lambda_1}\lambda_N d+(\lambda_N+\lambda_1)d^2}\right)^k\to\left(\frac{1}{3}\right)^k,$$

когда $d\to 0,$ а $\delta\le 1$.

Если $c>0$, при этом $2\lambda_N-3\lambda_1\le 0$ или $2\lambda_N-3\lambda_1>0, c<\lambda_1\lambda_N/(2\lambda_N-3\lambda_1)$, и выбрать d достаточно малое:

$$0<d<\min\{c\sqrt{2\lambda_N^{-1}},\sqrt{c}\},\gamma\ge d^{-1},$$

$$\tau_k=\frac{2(2\lambda_N+2\sqrt{2\lambda_N}d+d^2)(\lambda_1+d^2)\gamma^2}{3\lambda_1\lambda_N+c(2\lambda_N+\lambda_1)+2\sqrt{2\lambda_N}(\lambda_1+c)d+(\lambda_N+\lambda_1+2c)d^2}$$

то

$$\sigma=(d)=\left(\frac{\lambda_1\lambda_N+c(2\lambda_N-\lambda_1)+2\sqrt{2\lambda_N}(\lambda_1+c)d-(\lambda_N-\lambda_1)d^2}{3\lambda_1\lambda_N+c(2\lambda_N+\lambda_1)+2\sqrt{2\lambda_N}(\lambda_1+c)d+(\lambda_N+\lambda_1+2c)d^2}\right)^k$$

$$\left(\frac{\lambda_1\lambda_N+c(2\lambda_N-\lambda_1)}{3\lambda_1\lambda_N+c(2\lambda_N+\lambda_1)}\right)^k<\left(\frac{1}{2}\right)^k,$$

когда $d\to 0,$ а $\delta\le 1$.

Если $2\lambda_N-3\lambda_1>0,\lambda_1\lambda_N/(2\lambda_N-3\lambda_1)\le c$ и $d=\sqrt{c},\gamma\ge d^{-1}$, $\tau_k=1,2\gamma^2$, то $\sigma=\left(\frac{1}{2}\right)^k$, а $\delta\le 1$.

Доказательство следует из утверждений 6, 7, 8, 9, 10.

Вывод. Учитывая вид матриц $U',U,$ нетрудно заметить, что решение задачи (2) с N неизвестными можно получить на основании теорем 1 и 2 предложенным итерационным процессом (4) с относительной погрешностью σ за $0(N\ell n\sigma^{-1}))$ арифметических операций.

Литература

1. Оганесян, Л.А. Вариационно-разностные методы решения эллиптических уравнений / Л.А. Оганесян, Л.А. Руховец. – Ереван: Изд-во АН Арм ССР, 1979. – 235 с.

2. Соболев, С.Л. Некоторые применения функционального анализа в математической физике / С.Л. Соболев. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1950. – 256 с.

3. Обэн, Ж.П. Приближённое решение эллиптических краевых задач / Ж.П. Обэн. – М.: Мир, 1977. – 383 с.

4. Ладыженская, О.А. Краевые задачи математической физики / О.А. Ладыженская. – М.: Наука, 1973. – 407 с.

5. Ладыженская, О.А. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа / О.А. Ладыженская, Н.Н. Уральцева. – М.: Наука, 1973. – 576 с.

6. Самарский А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.

7. Самарский А.А. Разностные методы для эллиптических уравнений / А.А. Самарский, В.Б. Андреев. – М.: Наука, 1976. – 352 с.

8. Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики / Н.Н. Анучина, К.И. Бабенко, С.К. Годунов и др.; под ред. К.И. Бабенко. – М.: Наука, 1979. – 296 с.

9. Воеводин, В.В. Матрицы и вычисления / В.В. Воеводин, Ю.А. Кузнецов. – М.: Наука, 1984. – 320 с.

10. Дьяконов, Е.Г. Минимизация вычислительной работы. Асимптотически оптимальные алгоритмы для эллиптических задач / Е.Г. Дьяконов. – М.: Наука, 1989. – 272 с.

11. Самарский, А.А. Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский, Е.С. Николаев. – М.: Наука, 1978. – 592 с.

12. Марчук, Г.И. Методы вычислительной математики / Г.И. Марчук. – М.: Наука, 1989. – 608 с.

13. Ушаков, А.Л. Метод итерационного расщепления для специальных эллиптических краевых задач / А.Л. Ушаков. – Челябинск: ЧПИ, 1990. – 32 с. – Деп. в ВИНИТИ 23.11.90, №5892-В90.

14. Ушаков, А.Л. Метод итерационной факторизации / А.Л. Ушаков. – Челябинск: ЧГТУ, 1994. – 31 с. – Деп. в ВИНИТИ 17.10.94, № 2375-В94.

Поступила в редакцию 30 июня 2006 г.

Физика

УДК 523.6

ОСОБЕННОСТИ ЗАХВАТА КОМЕТ ГАЛЛЕЕВСКОГО ТИПА С ПОЧТИ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ ОРБИТ

Е.Е. Бирюков

Исследуется происхождение комет галлеевского типа в результате захвата с почти параболических орбит. Рассмотрено два возможных механизма захвата. Первый механизм заключается в том, что в результате совместного влияния Галактики и Юпитера комете на почти параболической орбите необходимо совершить около 500 оборотов вокруг Солнца для захвата орбиты галлеевского типа. При втором механизме захвата в результате многократных тесных сближений кометы с планетами-гигантами происходит постепенное медленное подтягивание орбиты кометы к орбитам планет земной группы. Этот процесс протекает очень медленно и комете необходимо совершить около 12 500 оборотов вокруг Солнца прежде, чем она будет захвачена на орбиту, соответствующую галлеевской.

Введение

За все время наблюдений за кометами было обнаружено 359 комет на короткопериодических орбитах, среди которых имеется две достаточно многочисленных популяции, у орбит которых значение перигелийного расстояния меньше 1,5 а.е.: кометы семейства Юпитера (КСЮ) и кометы галлеевского типа (КГТ). Кометы семейства Юпитера движутся на орбитах с периодом меньше 20 лет и параметром Тиссерана $T_5 > 2$. У комет галлеевского типа период обращения вокруг Солнца $20 < P < 200$ лет и параметр Тиссерана $T_5 < 2$. В кометной астрономии очень долго идут споры о происхождении этих групп комет. Большинство исследователей [1, 2] показали, что пояс Койпера обеспечивает необходимый поток объектов с малыми наклонами орбит для формирования комет семейства Юпитера. Для формирования КГТ необходим другой источник с большими наклонами орбит. Это вызвано тем, что на галлеевских орбитах наблюдаются объекты с обратным движением, в то время как у объектов, захваченных из пояса Койпера, малый наклон орбит. Этим источником может быть облако Оорта.

Впервые исследование захвата комет с почти параболических орбит на короткопериодические орбиты и их последующая динамическая эволюция в планетной области было выполнено в работах Казимирчак-Полонской [3–5]. Однако в ее работах процесс захвата рассматривался только с качественной точки зрения. Никаких количественных оценок, касающиеся вероятностей захвата, продолжительности некоторых этапов эволюции орбит в ее работе не было выполнено. С другой стороны, она рассматривала эволюцию комет на орбитах с перигелийным расстоянием больше 20 а.е. и таким образом игнорировала возможность захвата с орбит с $q < 20$ а.е.

В современной кометной астрономии неоднократно исследовался захват на орбиты комет галлеевского типа [6–9]. Однако в этих работах не рассматривались способы захвата на короткопериодические орбиты, а также не учитывалось, что поток комет в планетную область растет с увеличением перигелийных расстояний [10, 11]. В данной работе исследуется захват на орбиты КГТ с учетом этих особенностей.

Модель

Для исследования было взято 50 000 объектов на почти параболических орбитах из внешнего облака Оорта, распределенных случайным образом. Большие полуоси распределены равномерно в пределах (10 000, 30 000 а.е.). Наклоны орбит равномерно по $\cos(i)$ в пределах (–1,1), аргументы перигелия и восходящего узла равномерно распределены по i в пределах (0°, 360°). Первоначальные перигелийные расстояния находились внутри планетной области, которая была разбита на 5 промежутков: (0; 4 а.е.), (4; 6 а.е.), (6; 10,5 а.е.), (10,5; 18 а.е.), (18; 31 а.е.). В каждой области по 10 000 орбит с равномерным распределением перигелийных расстояний в пределах каждого промежутка. В начальный момент времени положение объектов на орбитах определялось случайным

образом путем задания равномерного распределения расстояния от кометы до Солнца в пределах (50,500 а.е.). Прослеживалась динамическая эволюция этих объектов за время $4{,}6 \cdot 10^9$ лет, что соответствует предполагаемому времени жизни Солнечной системы. В том случае, если в результате эволюции большая полуось орбит этих объектов достигала значение 34,2 а.е. (т.е. орбиты становились короткопериодическими), либо перигелийное расстояние становилось меньше 1,5 а.е., то элементы орбит этих объектов записывались в отдельный файл и их последующая динамическая эволюция рассматривалась отдельно. В результате предварительных вычислений было получено, что возмущения от малых планет не оказывают существенного влияния на эволюцию кометных орбит. Поэтому в основных исследованиях учитывались возмущения от четырех гигантских планет: Юпитер, Сатурн, Уран, Нептун. Все вычисления проводились с учетом возмущения от галактики в соответствии с моделью Била [12]. В работе использовался интегратор Емельяненко [13].

Захват на орбиты КГТ и КСЮ

В результате вычислений было обнаружено, что имеется два различных механизма, приводящие к захвату из облака Оорта на орбиты КСЮ и КГТ, которые можно назвать *a*-захват и *q*-захват. *a*-захват заключается в том, что на первом этапе динамической эволюции в результате тесных сближений с планетами-гигантами у почти параболических орбит изменяется, главным образом, большая полуось, и они захватываются на короткопериодические орбиты. С течением времени эти орбиты могут эволюционировать в галлеевские или в орбиты КСЮ. В отличие от *a*-захвата у объектов, испытавших *q*-захват, на первом этапе динамической эволюции изменяется в основном перигелийное расстояние орбит, которое становится меньше 1,5 а.е. Впоследствии под действием возмущений от Юпитера эти орбиты могут эволюционировать в короткопериодические.

На рис. 1 представлена динамическая эволюция одного из объектов, испытавшего *a*-захват (объект I). У этого объекта первоначальное значение перигелийного расстояния было равно 8,783 а.е. Объект совершил 13 000 оборотов вокруг Солнца, прежде чем был захвачен на короткопериодическую орбиту в результате тесного сближения с Сатурном. Впоследствии объект многократно переходил на резонансные орбиты, главным образом с Ураном с соизмеримости периодов обращения 3:5 (a = 27 а.е.), 4:5 (a = 22,25 а.е.), 4:3 (a = 15,83 а.е.), 5:4 (a = 16,52 а.е.). В момент времени $78 \cdot 10^6$ лет объект попал на орбиту резонанса 1:2 (a = 15,14 а.е.) с Сатурном, на которой он просуществовал $1{,}8 \cdot 10^6$ лет.

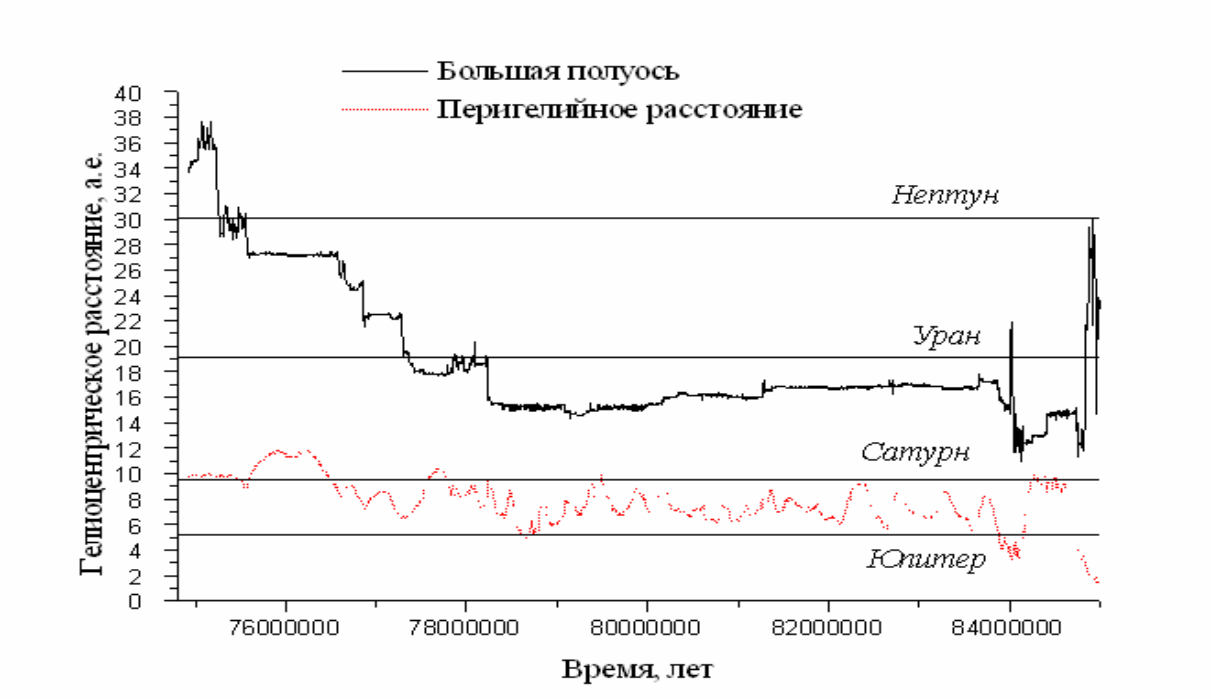


Рис. 1. Динамическая эволюция элементов орбит объекта I, испытавшего *a*-захват

В результате тесного сближения с Сатурном, у орбиты объекта произошло резкое уменьшение эксцентриситета и объект перешел на орбиту КГТ. В общей сложности до захвата на орбиту КГТ комета совершила около 149 000 оборотов или 850 млн лет.

На рис. 2 представлена динамическая эволюция другого объекта, испытавшего *a*-захват (объект II). У этого объекта первоначальное значение перигелийного расстояния было равно 23,2 а.е.



Рис. 2. Динамическая эволюция элементов орбит объекта II, испытавшего *a*-захват

В отличие от объекта I, объекту II потребовалось совершить всего 233 оборота вокруг Солнца для захвата на короткопериодическую орбиту. Это вызвано тем, что в результате галактических возмущений у объекта произошло уменьшение перигелийного расстояния орбиты до 5,3 а.е. В результате возмущений от Юпитера объект очень быстро эволюционировал на короткопериодическую орбиту. Очень продолжительный захват объекта I на короткопериодическую орбиту объясняется тем, что этот объект на первых оборотах вследствие возмущений от Сатурна перешел на долгопериодическую орбиту со значением большой полуоси $a < 1000$ а.е., где возмущения от галактики не оказывают существенного влияния. Трансформация долгопериодической орбиты в короткопериодическую проходит в результате диффузионного процесса очень продолжительное время. Подробное исследование процесса диффузии проведено в работах Штейнса [14, 15]. Объект II только часть орбитальной эволюции находился на резонансных орбитах. В момент времени $12{,}9 \cdot 10^6$ лет он попал на орбиту резонанса 2:3 ($a = 12{,}5$ а.е.) с Сатурном, на которой просуществовал 10^5 лет. В момент времени $13{,}08 \cdot 10^6$ лет объект был захвачен и в течение 50000 лет двигался на орбите резонанса 2:3 ($a = 6{,}8$ а.е) с Юпитером.

Таким образом, важную роль в эволюции параболических орбит в орбиты КГТ с помощью *a*-захвата играют тесные сближения с планетами гигантами, что было обнаружено еще в работах [3–5]. Вследствие попадания объектов на резонансные орбиты этот процесс может продолжаться сколь угодно долго.

На рис. 3 представлена динамическая эволюция объекта, первоначальное значение перигелийного расстояния орбиты которого было равно 0,3 а.е. В результате возмущений от Юпитера объект очень быстро был захвачен на короткопериодическую орбиту (через 350 оборотов). Объект III после захвата на орбиту КГТ несколько раз переходил с короткопериодической на долгопериодическую орбиту и по истечении $1{,}4 \cdot 10^6$ лет был выброшен на гиперболу.

На рис. 4 представлена эволюция элементов орбит объекта IV. Первоначальное значение перигелийного расстояния орбиты равно 1,9 а.е. Этот объект был захвачен на короткопериодическую орбиту за время, соответствующее 150 оборотам вокруг Солнца. Лишь незначительную часть динамической эволюции объекты, испытавшие *q*-захват, движутся на резонансных орбитах.

Объект IV попал на орбиту, период обращения которой вокруг солнца соизмерим с периодом обращения Юпитера в отношении 2:3 (a = 6,8 а.е) и просуществовал на ней 10^5 лет.

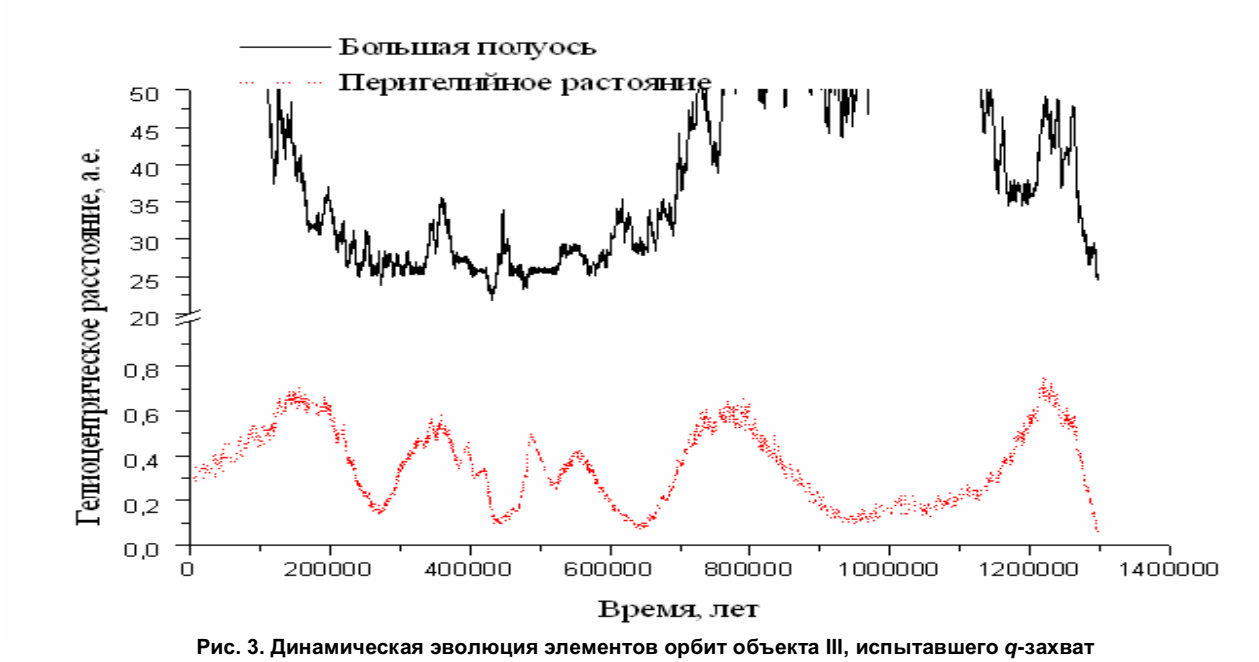


Рис. 3. Динамическая эволюция элементов орбит объекта III, испытавшего *q*-захват

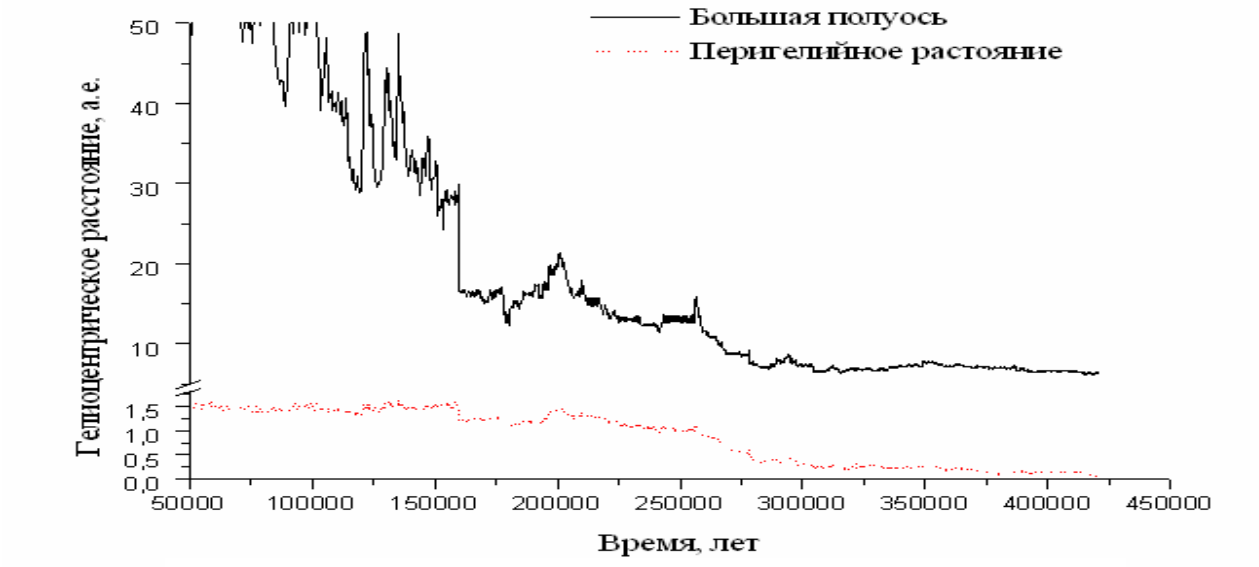


Рис. 4. Динамическая эволюция элементов орбит объекта IV, испытавшего *q*-захват

Необходимо отметить, что высокая скорость эволюции на короткопериодические орбиты не зависит от первоначального значения перигелийного расстояния. Многие объекты, с первоначальным значением перигелийного расстояния ~2 а.е. до захвата на короткопериодические орбиты совершили более 1000 оборотов. И это относится к объектам, испытавших a-захват, в то время как для захвата на короткопериодическую орбиту с помощью q-захвата комете необходимо совершить около 200 оборотов вокруг Солнца. Можно обратить внимание на другую закономерность. Почти у всех объектов, испытавших q-захват, перигелийные расстояния орбит не могут превысить значения 2 а.е. Этот эффект является следствием возмущений от Юпитера. В работах [6, 7] представлены значения изменения элементов орбит комет с малым значением перигелийного расстояния (q = 0,85). Из этих результатов следует, что под действием Юпитера перигелийные расстояния эллиптических орбит имеют тенденцию к уменьшению и компенсировать это влияние возмущениями от других планет не возможно.

В табл. 1 представлены вероятности захвата на орбиты комет семейства Юпитера (КСЮ) и комет галлеевского типа (КГТ). Во втором столбце представлены вероятности захвата на орбиты КГТ для объектов, испытавших *a*-захват. В третьем столбце представлены данные для тех объектов, у которых на первом этапе динамической эволюции произошло уменьшение перигелийного расстояния до $q < 1{,}5$ а.е. (*q*-захват).

Таблица 1

Вероятность захвата на короткопериодические орбиты из почти параболического потока облака Оорта

q_0, а.е.	p	Вес	Вероятность с учетом веса	Доля от общего количества КГТ	Количество КГТ
0–4	0,0089	1	0,0089	0,33	1068
4–6	0,0019	0,59	0,001121	0,04	134
6–10,5	0,0005	2,81	0,001405	0,052	169
10,5–18	0,0004	11,35	0,00454	0,17	545
18–31	0,0003	35,7	0,01071	0,401	1285

Из табл. 1 видно, что вероятность захвата на орбиты галлеевского типа для объектов с первоначальным значением перигелийного расстояния в пределах (0,4 а.е.) примерно в 1,5 раза меньше в сравнении с результатами, полученными Емельяненко и Бэйли [6, 7], в работах которых было получено, что эта вероятность равна 0,0128. Это противоречие можно объяснить галактическими возмущениями. В работе [9] на основании аналитических вычислений было показано, что галактические возмущения способны значительно изменить перигелийное расстояние орбиты кометы с большой полуосью во внешнем облаке Оорта за один ее оборот вокруг Солнца. Это приводит к уменьшению вероятности захвата на орбиты галлеевского типа для объектов из первой области первоначальных q. Для $4 < q_0 < 31$ а.е. вероятность захвата на орбиты КГТ повышается. Галактические возмущения способны повысить вероятность захвата на орбиты КСЮ для объектов с первоначальными перигелийными расстояниями в первой и второй областях в сравнении с оценками Емельяненко и Бэйли [6, 7].

На орбиты КГТ и КСЮ практически не захватываются объекты путем *q*-захвата (см. табл. 1). Почти у всех объектов, захваченных этим способом на галлеевские орбиты, первоначальные значения перигелийных расстояний уже были меньше 1,5 а.е. Необходимо отметить, что вероятность перехода комет с почти параболических орбит на орбиты КГТ с помощью *q*-захвата ниже, чем с помощью *a*-захвата. Это объясняется тем, что объекты, захваченные на орбиты с $q < 1{,}5$ а.е. продолжительное время движутся внутри орбиты Юпитера и очень быстро могут быть им выброшены на гиперболические орбиты. Однако это обеспечивает более высокую скорость захвата на галлеевские орбиты. Для попадания с помощью *q*-захвата на орбиты КГТ из почти параболического потока облака Оорта комете необходимо совершить в среднем около 500 оборотов вокруг Солнца. В то время как с помощью *a*-захвата комете необходимо совершить для этого 12500 оборотов вокруг Солнца.

На орбиты комет семейства Юпитера с помощью *q*-захвата попало всего 4 объекта. Вычисления с учетом возмущений от внутренних планет (модель 2) приводят к тому, что на эти орбиты не захватывается ни одного объекта путем *q*-захвата. Таким образом, объекты на долгопериодических орбитах с перигелийными расстояниями $q < 1{,}5$ а.е. никогда не захватятся на орбиты КСЮ.

В табл. 2 представлена вероятность захвата на орбиты КГТ из разных областей первоначальных q с учетом веса каждой области. В первом столбе записаны первоначальные значения перигелийных расстояний, во втором столбце – вероятность захвата на орбиты КГТ. В выбранной модели концентрация объектов в 5 областях первоначальных перигелийных расстояний неодинакова. Наибольшая концентрация объектов имеется во второй области с $4 < q_0 < 6$ а.е. и наименьшая – в пятой. Следует также учитывать, что поток комет в планетную область увеличивается с ростом q [10, 11, 16]. Если поток комет из каждой области первоначальных q поделить на поток комет с перигелийными расстояниями орбит в первой области, то результат будет равен весу. В третьем столбце табл. 2 представлен вес каждой области первоначальных перигелийных расстояний. В работах [6, 7] ограничились анализом захвата на орбиты КГТ только из первой области q_0.

Действительно, вероятность захвата из этой области на орбиты КГТ на порядок выше вероятности захвата из всех остальных областей первоначальных значений перигелийного расстояния. Но учет веса приводит к тому, что объекты из первой области q_0 составляют меньше половины популяции КГТ, захваченных из облака Оорта. Из столбца 5 видно, что доля объектов, захваченных из последней области первоначальных значений перигелийного расстояния, сопоставима с долей объектов, захваченных из первой области первоначальных q. Было также получено, что динамическое время жизни на орбитах галлеевского типа составило порядка 150 000 лет, что согласуется с результатами Левисона и др. (2001). Однако это примерно в 2 раза меньше оценки, полученной Емельяненко и Бейли (1998), что можно объяснить действием галактических возмущений.

Таблица 2

Вклад каждой области в семейство КГТ с учетом веса и предполагаемое постоянное количество КГТ

q_0, а.е.	a-захват		q-захват	
	КГТ	КСЮ	КГТ	КСЮ
0–4	0,0031	0,0007	0,0058	0,0003
4–6	0,0018	0,0013	0,0001	0,0001
6–10,5	0,0004	0,0002	0,0001	0
10,5–18	0,0003	0,0001	0,0001	0
18–31	0,0002	0,0002	0,0001	0

В соответствии с результатами [17], наблюдаемый поток ν новых комет из внешнего облака Оорта с абсолютной звездной величиной ярче, чем $H_{10} = 7$, равен 0,2 кометы в год на 1 а.е.. Тогда предполагаемое постоянное количество комет галлеевского типа, которое должно быть доступно наблюдениям можно вычислить по формуле:

$$N_i^{HT} = \nu \cdot 4 \cdot P_i \cdot L^{HT},$$

где N_i^{HT} – количество комет галлеевского типа, захватываемых из i-ой области первоначальных значений перигелийных расстояний, $\nu \cdot 4$ – поток новых комет из первой области, P_i – вес объектов i-ой области, L^{HT} – среднее динамическое время жизни на орбитах галлеевского типа. Постоянное количество объектов на орбитах галлеевского типа должно быть $N^{HT} = 3201$, что согласуется с оценкой Емельяненко и Бейли [6, 7]. Однако в настоящий момент обнаружено всего 24 кометы на орбитах КГТ, что в сотни раз меньше полученной оценки. С другой стороны, время жизни комет семейства Юпитера составило около 12 000 лет, следовательно, постоянное количество объектов на орбитах КСЮ должно быть порядка 100, что согласуется с наблюдениями. Решение вопросов связанных с количеством комет галлеевского типа и о возможных ограничениях на физическое время жизни этих комет требует рассмотрения в отдельной работе.

Заключение

В работе рассмотрены механизмы захвата на орбиты КГТ из почти параболического потока. Обнаружено два механизма захвата. Первый механизм (q-захват) заключается в совместном влиянии Юпитера и Галактики на почти параболические орбиты, в результате чего у кометных орбит перигелийное расстояние очень значительно уменьшается (до 1,5 а.е.). Впоследствии, главным образом, под влиянием Юпитера, в результате диффузии кометные орбиты трансформируются в короткопериодические. Этот способ захвата очень быстрый и для попадания на орбиту КГТ комете достаточно в среднем совершить около 500 оборотов вокруг Солнца. В работе [18] было показано, что диффузионные изменения больших полуосей сильноэллиптических орбит с малыми значениями перигелийных расстояний носят случайный характер.

Второй механизм (a-захват) заключается в том, что в результате тесных сближений с планетами-гигантами планеты захватываются на короткопериодические орбиты. Впоследствии, в результате планетных возмущений происходит постепенное подтягивание их орбит к внутренней планетной области Солнечной системы, в основном, в результате серии ступенчатых переходов на резонансные орбиты с планетами-гигантами от более отдаленных областей Солнечной системы к более близким. В результате того, что подтягивание орбит осуществляется в результате диффузии и сопряжено с неоднократным пребыванием комет на резонансных орбитах, эволюция

на орбиты КГТ с помощью *a*-захвата в среднем в 30–40 раз более продолжительна, чем с помощью *q*-захвата.

В определенном смысле, механизм *a*-захвата есть механизм захвата, описанный в работах [3–5]. В своих работах она рассматривала захват на короткопериодические орбиты с параболических орбит с перигелийным расстоянием больше 10 а.е. В этой работе показано, что этот механизм работает и для орбит с меньшим значением перигелийного расстояния.

Необходимо отметить, что учет возмущений от галактики способствует повышению вероятности захвата комет на орбиты КГТ из облака Оорта с первоначальными значениями перигелийных расстояний в пределах (4–31 а.е.) и понижению вероятности захвата для орбит с первоначальными значениями перигелийных расстояний меньше 4 а.е.

Было получено, что вероятность захвата на орбиты галлеевского типа наибольшая для области первоначальных значений перигелийных расстояний (0, 4 а.е.). Однако поток комет из облака Оорта на орбитах с перигелийными расстояниями орбит $6 < q < 31$ а.е. значительно превышает поток комет на орбитах с $q < 4$ а.е. Это приводит к тому, что всего около трети объектов, захваченных на орбиты галлеевского типа, имели первоначальное значение перигелийного расстояния (0, 4 а.е.). Таким образом, захват из других областей на орбиты КГТ игнорировать не следует.

Выражаю благодарность Емельяненко В.В. и Мазевой О.А. за обсуждение результатов и замечания.

Данная работа поддержана грантами РФФИ-Урал 04-02-96042, РФФИ 06-02-16512 и программой целевой поддержки научных исследований молодых ученых ЮУрГУ.

Литература

1. Фернандез и др. (Fernandez J.A., Gallardo T., Brunini A.N.) Are there many inactive Jupiter-Family Comets among the Near-Earth asteroid population? // Icarus. – 2002. – V. 159. – P. 358–368.

2. Левисон и Данкан (Levison H.F., Duncan M.J.) From the Kuiper Delt to Jupiter-Family Comets: The spatial distribution of ecliptic comets // Icarus. – 1997. – V. 127. – P. 13–32

3. Казимирчак-Полонская Е.И. Эволюция орбит короткопериодических комет на интервале 1660–2060 гг. и роль внешних планет в этой эволюции // Астрон. Ж. – 1967. – № 44. 2. – С. 439–460.

4. Казимирчак-Полонская Е.И. Захват комет Юпитером и некоторые закономерности в вековой эволюции кометных орбит // Астрономия и небесная механика. Серия: проблемы исследования Вселенной. – Вып. 7. – 1978. – С. 340–383

5. Казимирчак-Полонская Е.И. О роли Нептуна в преобразованиях кометных орбит и о происхождении комет// Астрономия и небесная механика. Серия: проблемы исследования Вселенной. Выпуск 7. – 1978. – С. 384–417

6. Емельяненко и Бэйли (Emel'yanenko V.V., Bailey M.E.) The capture of Halley-type and Jupiter-famaly comets from the near-parabolic flux// Dynamics and Astrometry of Natural and Artificial Celestial Bodies. – 1997. – P. 159–164.

7. Емельяненко и Бэйли (Emel'yanenko V.V., Bailey M.E.) Capture of Halley-type comets from the near-parabolic flux // Mon. Not. R. Astron. Soc. – 1998. – V. 298. – P. 212–222.

8. Напье и др. (Napier W.M., Wickramasinghe J.T., Wickramasinghe N.C.) Extreme albedo comets and the impact hazard// Mon. Not. R. Astron. Soc. – 2004. – V. 355. – P.191–195.

9. Левисон и др. (Levison H.F., Dones L., Duncan M.J.) The origin of Halley-type comets: probing the inner Oort cloud// Astron. J. – 2001. – V. 121. – P. 2253–2267.

10. Фернандез и Ип (Fernandez J.A., Ip W.-H.) Statistical and Evolutionary aspects of cometary orbits// Comets in the Post-Halley Era. – 1991. – V. 1. – P. 487–536.

11. Женг и др. (Zheng J.O., Valtonen M.J., Mikkola S. & Rickman H.) Orbits of short-period comets captured from the Oort cloud// Earth, Moon and Planets. – 1996. – V. 72. – P. 45–50.

12. Бил (Byl J.) The effect of the Galaxy on cometary orbits// Earth, Moon and Planets. – 1986. – V. 36. – P. 262–273

13. Емельяненко (Emel'yanenko V.V.) An Explicit Symplectic Integrator for Cometary Orbits// Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. – 2002. – V. 84. – P. 331–341.

14. Штейнс К.А.// К вопросу о диффузии комет. II. Стационарный процесс // Астрон. ж. № 38. – 1961. – С. 107–114.

15. Штейнс К.А. Эволюция орбит комет // Уч. зап. Латв. гос. унив. – № 68. – 1964. – С. 39–64.

16. Мазеева О.А. Поток долгопериодических комет в планетной области: динамическая эволюция из облака Орта // Астрономический вестник, в печати.

17. Бэйли и Стаг (Bailey M.E., Stagg C.R.) Cratering constraints on the inner Oort cloud // Mon. Not. R. Astron. Soc. – 1988. – V. 235. – P. 1–32.

18. Бэйли и Емельяненко (Bailey M.E. and Emel`yanenko V.V.) Dynamical evolution of Halley-type comets //Mon. Not. R. Astron. Soc. – 1996. – V. 278. – P. 1087–1110.

Поступила в редакцию 13 июля 2006 г.

УДК 523.6

УГАСАНИЕ КОМЕТ ИЗ ОБЛАКА ООРТА

Е.Е. Бирюков

В работе исследуется вопрос угасания комет из облака Оорта. Предполагается, что это случайный процесс, зависящий от возраста кометы и перигелийного расстояния её орбиты. Показано, что кометы должны угасать на достаточно больших гелиоцентрических расстояниях (r > 2,5 а.е.). Таким образом, существенное влияние на физическую эволюцию комет оказывает сублимация не только водяных льдов, но и льдов других, более летучих соединений. Статистическая оценка результатов дает хорошее согласие с наблюдениями.

Введение. Короткопериодические кометы (период меньше 200 лет) традиционно подразделяют на два основных класса – кометы семейства Юпитера и кометы галлеевсктого типа. Кометы семейства Юпитера (КСЮ) – кометы с периодом обращения вокруг Солнца меньше 20 лет и параметром Тиссерана $T_5 > 2$. Кометы галлеевского типа движутся на орбитах с периодом обращения вокруг Солнца $20 < P < 200$ лет и параметром Тиссерана $T_5 < 2$.

Моделирование захвата комет из облака Оорта показывает, что на орбитах галлеевского типа с $q < 1{,}5$ а.е. постоянно должно находиться около 3000 комет с абсолютной звездной величиной $H_{10} \le 7$ [1–3]. Это достаточно крупные кометы, размер которых превышает 5 км. Однако в настоящий момент наблюдениям доступно всего 24 кометы на орбитах галлеевского типа с $q < 1{,}5$ а.е. и 14 комет на орбитах с $q < 1$ а.е. Еще в работе [4] было сделано предположение, что с течением времени летучие соединения в ядрах комет истощаются и кометы превращаются в астероиды.

Большинство исследователей полагает, что до 99% комет угасает [1, 2, 5]. В работе [5] было показано, что если кометы превращаются в астероиды, то должно существовать 46000 активных и угасших комет размером более 1,5 км на орбитах галлеевского типа с $q < 1{,}3$ а.е., что не согласуется с наблюдениями. В настоящее время обнаружено только два астероида на галлеевской орбите с перигелийным расстоянием меньше 1,3 а.е. – 1999 *XS35* и 2006 *HR30.* С учетом наблюдательной селекции это число может быть около 100, что почти в 500 раз меньше полученной оценки. На этом основании было выдвинуто предположение, что 96% угасших комет разрушаются в пыль после первых прохождений перигелия орбиты до момента, как их орбиты эволюционируют в галлеевские. Однако эта работа не отвечает на вопросы, связанные с происхождением и эволюцией комет галлеевского типа: каким образом возможно угасание кометных ядер, какими внутренними процессами объясняется их резкое снижения яркости или разрушение после нескольких прохождений перигелия, что происходит в дальнейшем с остатками разрушения ядер и как это согласуется с наблюдениями. Подобные результаты уже были получены в работе [6], где была рассмотрена зависимость количества комет на галлеевских орбитах от ограничений на физическое время жизни ядер и от перигелийного расстояния орбиты соответствующего первому попаданию кометы на галлеевскую орбиту. В этой работе было показано, что среднее время жизни комет галлеевского типа не должно превышать времени, соответствующего 200 оборотам кометы вокруг Солнца.

Таким образом, в настоящее время не имеется работ, посвященных исследованию распределения элементов орбит КГТ, захваченных из облака Оорта, получаемое с учетом угасания кометных ядер. Практически во всех работах рассматривалось влияния ограничений физического времени жизни ядер на количество комет на орбитах КГТ. В данной работе ищется функциональная зависимость угасания комет не только от возраста кометы, но и от перигелийного расстояния орбиты кометы.

Угасание комет. Для решения вопроса физической эволюции комет необходимо выяснить, с чем может быть связано угасание комет, какие процессы протекают в ядрах комет.

Причина угасания комет заключается в следующем. При каждом прохождении перигелия, ядро кометы прогревается. Вследствие этого происходит сублимация льдов, входящих в состав

ядра кометы. Вместе с летучими веществами из ядра увлекаются в околоядерное пространство твердые минеральные вещества – пылинки. С течением времени кометный материал либо истощается и комета прекращает свое существование, либо ядро кометы покрывается плотной коркой. Ледяная поверхность со временем становится пятнистой вследствие образования минеральной корки, которая постепенно напластовывается на поверхности ледяных ядер и создает защитный экран-матрицу, заметно снижающий сублимацию льда в межзвездное пространство. Этот процесс особенно заметно проявляется у короткопериодических комет, многократно проходящих через перигелий. Когда коэффициент экранирования, равный отношению площади поверхности ядра, покрытой минеральной коркой, к полной площади поверхности ядра, становится больше 0,9, комету сложно отличить от астероида [7]. Необходимо отметить, что кометой называют малое тело Солнечной системы, у которого имеется кома, соответственно астероидом называют малое тело Солнечной системы, у которого эта кома отсутствует. Как показал Марсден [8], у многих комет семейства Юпитера доля активной поверхности ядра меньше 1% и эти объекты при наблюдениях идентифицируют именно как кометы. Это легко объясняется тем, что кометы семейства Юпитера обладают малым периодом обращения вокруг Солнца ($P < 20$ лет) и, как следствие, малым значением большой полуоси, в результате чего они доступны наблюдениям практически все время их орбитального периода. В связи с этим при наблюдениях легче обнаружить наличие весьма малой комы. Кометы галлеевского типа, как правило, наблюдаются только в момент их нахождения вблизи перигелия своей орбиты. Многие из них наблюдаются на протяжении всего нескольких дней, и следующее их появление произойдет только через 100–200 лет. Поэтому очень часто кометы галлеевского типа не обнаруживают, а если обнаруживают, то определяют их как астероиды. Например, объекты *2001 OG108* и *2002 CE10* первоначально идентифицировали как астероиды, и спустя некоторое время у них была обнаружена слабая кома.

В монографии Шульмана [7] был подробно рассмотрен процесс образования минеральной корки на поверхности ядра. Было показано, что если размер ядра меньше 1,5 км, то на его поверхности никогда не сможет образоваться минеральная корка и это ядро очень быстро превратится в пыль. Отсюда следует главный недостаток работы Левисона и др. [5]. В своей работе они рассматривали кометы размером больше 1,5 км, но как следует из результатов [7], у ядер таким размером минеральная корка будет весьма незначительная и не сможет полностью защитить ядро от сублимации льдов и истощения кометного материала. В той же работе Шульмана было показано, что пылинки, размер которых больше некоторого критического значения, в процессе сублимации льда оседают на поверхности ядра, образуя минеральную корку. Критический размер пылинок уменьшается с увеличением перигелийного расстояния и размеров ядра кометы. То есть, чем больше размер ядра и перигелийное расстояние орбиты, тем больше пыли оседает на поверхности ядра и тем быстрее образуется минеральная корка. Это вызвано тем, что на больших гелиоцентрических расстояниях скорость выброса пылевых частичек очень мала и не достигает скорости, необходимой для преодоления силы притяжения ядра (чем больше ядро, тем сила притяжения больше), и частички оседают на ядро кометы, образуя плотную корку. Данный способ угасания проходит с высокой скоростью. Прежде чем прекратиться кометная активность ядра, комете достаточно совершить несколько прохождений перигелия своей орбиты. Имеются случаи прекращения кометной активности ядра до первого прохождения кометой перигелийного расстояния (например, комета *D/1978R1*). Однако по причине приближения кометы к Солнцу размер ее ядра уменьшается, как следствие увеличивается критический радиус пылинок, и некоторые пылинки выдуваются в кометную атмосферу.

Другой возможный механизм угасания комет есть следствие самой сублимации кометных льдов, то есть проявления кометной активности. При каждом последующем прохождении перигелия кометы из-за сублимации льдов и выноса в околоядерное пространство вместе с летучими веществами и твердых частиц, кометы теряют часть своей массы и уменьшаются в размерах. Однако процесс истощения кометного материала проходит медленно, и его скорость очень сильно зависит от перигелийного расстояния. Если комета движется по орбите с $q = 1$ а.е., то она испаряется за 600 оборотов вокруг Солнца. Для комет с перигелийным расстоянием орбиты $q = 2$ а.е. требуется совершить около 4500 оборотов [9]. В таком случае угасание кометы заключается в уменьшении размеров кометы настолько, что ее «теряют», то есть комета становится недоступна наблюдениям.

Таким образом, необходимо ввести функцию угасания кометных ядер, которая характеризует потерю кометы для земных наблюдений. Функция должна зависеть от количества обращений кометы вокруг Солнца и от перигелийного расстояния ее орбиты. Функции угасания, предложенные в работе [10] следует отбросить сразу. Поскольку, во-первых, несмотря на кажущееся многообразие предложенных функций (в работе представлено 6 функций угасания), все они дают зависимость угасания только от возраста кометы. Во-вторых, в этих функциях введены коэффициенты, физический смысл которых не раскрывается, а потому не понятно, по какой причине происходит угасание комет. В-третьих, под угасанием они так же рассматривают переход комет на короткопериодические орбиты, что не имеет физического смысла, поскольку после захвата на короткопериодическую орбиту с ядром кометы ничего не происходит, и ее идентифицируют как комету. Наиболее подходящей является функция, предложенная в работе [6]. Однако в этой работе не было учтено, что у комет в процессе эволюции изменяются элементы орбит, в частности перигелийное расстояние, и, как следствие, изменяется вероятность угасания. В работе также не рассмотрен вклад комет галлеевского типа, захваченных с орбит с большими перигелийными расстояниями. Как было показано в работе [3], эти объекты являются существенным источником КГТ.

Вероятность угасания кометы за один оборот равна $P = 1/(N_{max} \cdot q^{\alpha})$, где N_{max} – максимальное количество оборотов комет вокруг Солнца на орбитах с перигелийным расстоянием $q = 1$ а.е., α – некоторая константа. Была проведена серия вычислений для разных значений параметров угасания N_{max} (100–700) и α (0,5–3). Предполагается, что угасание комет связано с сублимацией водяных льдов, интенсивность которой резко усиливается на расстояниях меньше 2,5 а.е.

Наилучшее согласие распределения орбит КГТ, захваченных из облака Оорта, с наблюдениями обеспечивается при значениях $N_{max} = 600$ и $\alpha = 1$. Однако в таком случае количество комет на орбитах галлеевского типа с $q < 1{,}5$ а.е. равно 190 и 64 для орбит с $q < 1$ а.е., что противоречит наблюдениям, поскольку в каталоге Марсдена и Вильямса [11] имеются данные о 24 КГТ с $q < 1{,}5$ а.е. и 14 КГТ с $q < 1$ а.е. Можно предположить, что расхождение между полученным и наблюдаемым количеством комет на галлеевских орбитах является следствием эффекта наблюдательной селекции. Действительно, аргументы перигелиев новых комет из облака Оорта равномерно распределены в пределах (0°; 360°). Из численного интегрирования было получено, что распределение аргументов перигелиев КГТ, происхождение которых связано с облаком Оорта, не должно отличаться от первоначального распределения. У наблюдаемых КГТ имеется явный недостаток орбит с аргументом перигелия орбиты $\omega > 180°$. Из 14 комет на галлеевских орбитах с перигелийным расстоянием меньше 1 а.е. всего у трех аргумент перигелия орбиты больше 180°. Причем такая диспропорция наблюдается даже для комет, наблюдаемых в нескольких появлениях. Таким образом, на орбитах КГТ с перигелийным расстоянием меньше 1 а.е. должно быть не менее 20 комет. Этот эффект давно обнаружен, и его отмечали во множестве работ по наблюдательной селекции комет [12–14]. Он связан с тем, что у орбит с $\omega > 180°$ перигелий располагается ниже плоскости эклиптики. В результате чего кометы доступны наблюдениям в южном полушарии Земли, где наблюдения затруднены меньшим, в сравнении с северным полушарием, количеством, как телескопов, так и астрономов-любителей. Но в работе [5] показано, что с учетом эффекта наблюдательной селекции количество комет на орбита галлеевского типа с $q < 1{,}3$ а.е. должно в два раза превышать наблюдаемое. Таким образом, полученные оценки количества КГТ значительно завышены. Количество комет галлеевского типа будет меньше, если взять малое значение N_{max}. Но N_{max} не может быть меньше 500, поскольку в этом случае будет наблюдаться недостаток комет с малыми перигелийными расстояниями орбит ($q < 0{,}75$ а.е.). Кроме облака Оорта не имеется другого источника, способного произвести кометы галлеевского типа с малыми перигелийными расстояниями орбит.

В качестве решения этой проблемы допустимо предположение о возможности проявления ядрами кометной активности на больших расстояниях от Солнца. Из этого следует, что кометная активность, способная вызвать угасание комет, связана с сублимацией льдов более летучих соединений, чем H_2O. Поэтому следует еще раз обратиться к наблюдательным данным.

Спектральный анализ кометных атмосфер показывает, что помимо водяных льдов в состав ядер комет входят льды более летучих соединений, чем вода (CH_3OH, CO, CO_2 и другие). Шульман [7], не останавливаясь ни на одной теории происхождения комет, дает подробный анализ формирования кометезималий в протопланетной туманности. Шульманом было показано, что

водные и аммиачные льды не могут одновременно конденсироваться на поверхности ядер комет в силу своих физических свойств. В процессе конденсации газопылевой туманности в первую очередь в твердую фазу переходит водяной пар, захватывающий некоторое количество аммиака (температура T = 100–150 К). С течением времени в процессе остывания туманности до 80–90 К происходит конденсация аммиака. Затем в диапазоне температуры 60–90 К конденсируется углекислый газ, в результате чего происходит формирование слоистого ядра. При этом форма ядра может быть совершенно произвольной. Не противоречит этим результатам идея Уиппла [15], согласно которой кометы на окраине Солнечной системы покрываются льдами более летучих соединений, чем вода. При первых прохождениях кометой перигелия своей орбиты эти льды очень быстро сублимируют, после чего при наблюдениях с Земли комета становится менее яркой.

Таким образом, у комет, впервые приближающихся к Солнцу на расстояние ~3 а.е. проявляется кометная активность, связанная с сублимацией льдов летучих соединений, которые слоями покрывают водяной лед, расположенный ближе к центру ядра. В пользу этого предположения говорит статистика кометных наблюдений. Около трети короткопериодических комет движется на орбитах с перигелийным расстоянием, превышающим 2,5 а.е., из них около пятой части движется на орбитах с q > 3,5 а.е.. Поэтому имеются все основания рассматривать процесс угасания комет на расстоянии 3 а.е. и больше В этом случае количество комет на орбитах галлеевского типа с перигелийным расстоянием q < 1,5 а.е. должно быть равно 90 и на орбитах с q < 1 а.е. около 25.

Эверхарт [13, 14] рассмотрел эффект наблюдательной селекции и получил вероятности обнаружения комет в зависимости от перигелийного расстояния орбиты и абсолютной величины H_{10}. Если принять во внимание оценки Эверхарта, то на орбитах галлеевского типа с перигелийным расстоянием q < 1,5 а.е. наблюдениям должно быть доступно 18–20 комет, и 7–11 комет с перигелийным расстоянием меньше 1 а.е. Вероятности обнаружения комет соответствуют разрешающей способности наблюдательных приборов 60-х годов, и полученные оценки согласуются с наблюдениями на тот момент.

В таблице 1 представлены характеристики комет, захваченных на орбиты галлеевского типа с учетом угасания кометных ядер. Для сравнения приведены данные, полученные с учетом угасания при r < 2,5 а.е. и r < 3 а.е. Ранее было показано [3], что примерно 2/3 комет захватывается на орбиты галлеевского типа путем a-захвата. Как видно из таблицы, практически все кометы, захваченные на галлеевские орбиты с помощью a-захвата, угасают. Особенно отчетливо это видно при рассмотрении угасания при r < 3 а.е. Значительная часть комет, испытавших a-захват, угасают, не достигнув галлеевских орбит. Это является следствием того, что эти кометы значительное время проводят на орбитах с 1,5 а.е. < q < 5 а.е.

В работе [2] было получено, что медианный наклон орбит комет, захваченных на галлеевские орбиты из облака Оорта, значительно превышает медианный наклон орбит наблюдаемых КГТ. Поэтому авторы скорректировали первоначальное (по cos i) распределение наклонов орбит комет из облака Оорта. Однако этого делать не следует, поскольку, во-первых, при исследовании статистических систем следует рассматривать не медианные, а средние величины. Во-вторых, было обнаружено, что средний наклон активных комет (то есть «не угасших») уменьшается с уменьшением N_{max} и увеличением α.

Средний наклон орбит комет галлеевского типа с перигелийным расстоянием меньше 1 а.е. равен 77,7° и 68,9° у орбит с q < 1,5 а.е. В таблице представлены значения средних наклонов орбит теоретических комет галлеевского типа для параметров N_{max} = 600 и α = 1. Из таблицы видно, что при этих параметрах средние наклоны активных комет, захваченных из облака Оорта, согласуются с наблюдениями. Расхождение средних наклонов орбит обнаруженных и теоретических комет с q < 1 а.е. равно 1,1° и 3,6° для комет на орбитах с перигелийными расстояниями q < 1,5 а.е.

При исследовании захвата комет на орбиты галлеевского типа из облака Оорта с учетом угасания кометных ядер не следует принимать во внимание малые ядра размером около 1,5 км, поскольку время полного разрушения комет такого размера сопоставимо со временем захвата из облака Оорта на галлеевские орбиты. При самом быстром способе захвата комет из облака Оорта на орбиты КГТ (q-захват) комете необходимо совершить ~500 оборотов вокруг Солнца [3], в то время ядро кометы размером около 1–2 км на орбите с q = 1 а.е. полностью разрушается за ~600 оборотов вокруг Солнца [9]. Поэтому результаты Левисона др. [5] не отражают особенностей процесса угасания ядер комет, поскольку рассматривают даже малые кометные ядра, о поведении

которых совершенно определенно можно говорить, что все они разрушаются, прежде чем их орбиты эволюционируют в галлеевские. О крупных кометных ядрах ($H_{10} < 7$) можно сказать более определенно. Около 3000 комет должно существовать на орбитах галлеевского типа с $q < 1{,}5$ а.е., чье происхождение связано с облаком Оорта.

Характеристики комет, захваченных на орбиты галлеевского типа с учетом угасания

Q	Угасание при $r < 2{,}5$ а.е.				Угасание при $r < 3$ а.е.				N^{HC}_{KIT}
	P (a-захват)	P (q-захват)	N^{m}_{KIT}/n	i	P (a-захват)	P (q-захват)	N^{m}_{KIT}/n	i	
$q <$ 1а.е.	0,0023	0,0018	64/156	78°	0,0006	0,0015	25/121	76,6°	7–11
$q < 1{,}5$ а.е.	0,0074	0,002	190/210	73,7°	0,004	0,0019	90/175	72,5°	18–20

N^{m}_{KIT} – теоретическое значение количества комет галлеевского типа, N^{HC}_{KIT} – количество комет галлеевского типа, которое может быть доступно наблюдениям (наблюдательная селекция по Эверхарту [13, 14]), n – среднее время жизни комет галлеевского типа с учетом угасания в оборотах, i – средний наклон КГТ. P (a-захват) и P (q-захват) – вероятности захвата на орбиты КГТ с учетом угасания. Вероятности приведены с учетом зависимости потока новых комет от перигелийного расстояния в соответствии с результатами [16].

Из таблицы видно, что с учетом угасания вероятность a-захвата на орбиты КГТ с $q < 1{,}5$ а.е., составляет 0,004, что в 5 раз меньше вероятности a-захвата без учета угасания (Бирюков, 2006). Вероятность q-захвата на орбиты КГТ из облака Оорта с учетом угасания равна 0,0019, что в 3 раза меньше вероятности, полученной без угасания. Таким образом, 80% комет, испытавших a-захват, и 66% комет, испытавших q-захват, угасают до того как их орбиты трансформируются в галлеевские. Следовательно, только 75% комет угасает, прежде чем они были захвачены на галлеевские орбиты, а не 96%, как утверждают Левисон и др. [5]. Необходимо отметить, что около трети комет угасает на долгопериодических орбитах. Всего 2% комет выброшены с орбит галлеевского типа на гиперболы, прежде чем их ядра угасли и примерно 5% комет угасли после того, как были выброшены с галлеевских на другие орбиты. У всех этих объектов орбиты эволюционировали в галлеевские с помощью q-захвата. Остальные кометы (около 18% комет) угасают на орбитах КГТ.

На рис. 1 представлено распределение перигелийных расстояний наблюдаемых комет галлеевского типа, на рис. 2 представлено распределение перигелийных расстояний комет, захвачен-

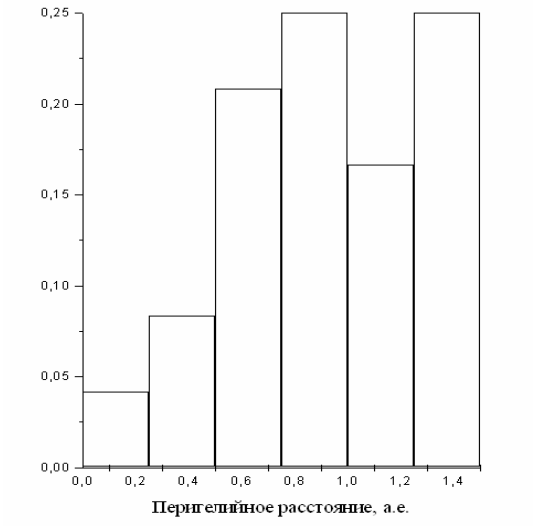


Рис. 1. Наблюдаемое распределение перигелийных расстояний КГТ

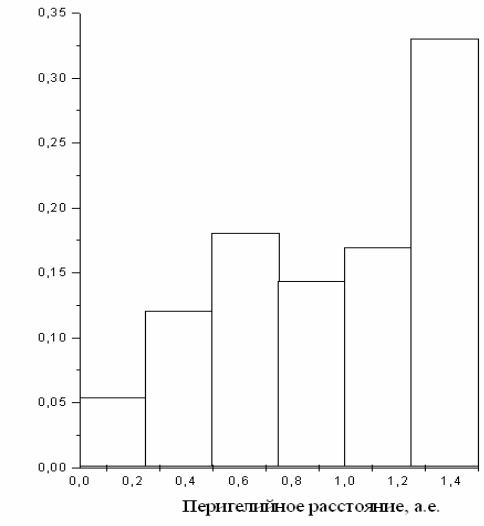


Рис. 2. Распределение перигелийных расстояний комет, захваченных на галлеевские орбиты с учетом угасания

ных на орбиты галлеевского типа из облака Оорта с учетом угасания. Не смотря на то, что представленные распределения имеют много общего, вопрос их эквивалентности является спорным.

Проверим гипотезу о совпадении теоретического и наблюдаемого распределения перигелийных расстояний комет галлеевского типа. По критерию Смирнова-Колмогорова для уровня значимости $\alpha = 0{,}05$ $\lambda_{кр} = 1{,}36$. Область перигелийных расстояний орбит (0;1,5) а.е. была разбита на 23 интервала. В этом случае $\lambda = \sqrt{N}\sup\left|F_H - F_M\right| = 1{,}02$, где F_H и F_M – накопленные частоты наблюдаемого и модельного распределений перигелийных расстояний орбит, $\sqrt{N}$ – объем выборки (рис. 3). Полученное значение λ меньше $\lambda_{кр}$, следовательно, оно удовлетворяет условию, что предложенную гипотезу отвергать не следует при уровне значимости 0,05. Таким образом, предложенный закон угасания значительно лучше согласуется с наблюдениями, в сравнении с моделью [5]. Следовательно, имеются все основания принять рассмотренную модель угасания кометных ядер.

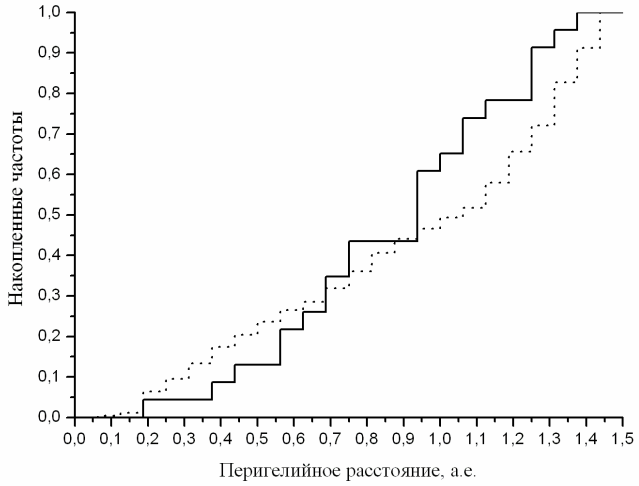


Рис. 3. Функции распределения перигелийных расстояний орбит обнаруженных КГТ (сплошная линия) и захваченных из облака Оорт с учетом угасания (пунктирная линия)

Заключение. Рассмотренный процесс угасания комет предполагает не только разрушение или падения их яркости, но и уменьшение размеров ядра кометы, в результате чего комета становится недоступна земным наблюдениям, то есть комета теряется. При выборе функции угасания принималось во внимание, что газопроизводительность ядра кометы и, как следствие, уменьшение ее в размерах или покрытие ее поверхности минеральной коркой зависит от перигелийного расстояния орбиты кометы, возраста кометы (от количества совершенных кометой оборотов вокруг Солнца на малых перигелийных расстояниях).

Исследование угасания кометных ядер показало, что этот процесс связан не только с сублимацией льдов воды, но и других более летучих соединений. Скорость сублимации водяного льда резко увеличивается на достаточно малых (около 2,5 а.е.) расстояниях от Солнца. Если рассматривать кометную активность как процесс, связанный только с сублимацией льдов воды, то постоянное количество комет, которое постоянно должно находиться на орбитах галлеевского типа, значительно превышает наблюдаемое даже с учетом эффекта наблюдательной селекции. На основании данных наблюдений о наличии в спектрах атмосфер комет летучих соединений, например аммиак и оксид углерода, была рассмотрена слоистая ледяная модель кометного ядра, подробное физическое описание которой представлено в работе Шульмана (1987). Учет существенного присутствия в составе ядер комет льдов CH_3OH, CO_2 и других предполагает проявление кометной активности ядрами на достаточно больших гелиоцентрических расстояниях.

Было показано, что не следует рассматривать малые кометные ядра размером около 1,5 км, поскольку эти ядра достаточно быстро разрушаются. Наиболее полную информацию о процессе угасания комет дает исследование ядер размером ~5 км. 75% этих комет угасает еще до того, как они захватываются на орбиты галлеевского типа. Около трети комет угасает на долгопериодических орбитах.

Статистическая оценка результатов показала лучшее согласие с наблюдениями в сравнении с результатами [5].

Выражаю благодарность Емельяненко В.В. и Заляпину В.И за обсуждение результатов и рекомендации.

Работа поддержана грантом РФФИ 06-02-16512 и программой целевой поддержки научных исследований молодых ученых ЮУрГУ.

Литература

1. Емельяненко и Бэйли (Emel'yanenko V.V., Bailey M.E.) The capture of Halley-type and Jupiter-famaly comets from the near-parabolic flux// Dynamics and Astrometry of Natural and Artificial Celestial Bodies. – 1997. – P. 159–164

2. Левисон и др. (Levison H.F., Dones L., Duncan M.J.) The origin of Halley-type comets: probing the inner Oort cloud//The Astronomical Journal. – 2001. – V. 121. – N. 4. – P. 2253–2267.

3. Бирюков Е.Е. Захват комет на орбиты галлеевского типа и семейства Юпитера из облака Орта // Астрономический вестник. – 2006 (В печати).

4. Уиппл Ф.Л. Природа комет // Кометы и происхождение жизни: Пер.с англ. – М.: Мир. – 1984. – С. 9–28.

5. Левисон и др. (Levison H.F., Morbidelli A., Dones L., Jedicke R., Wiegert P.A., Bottke W.F. Jr.) The Mass Disruption of Oort Cloud Comets // Scince. – 2002. – V. 296. – P. 2212–2215.

6. Емельяненко и Бэйли (Emel'yanenko V.V., Bailey M.E.) Capture of Halley-type comets from the near-parabolic flux // Mon. Not. R. Astron. Soc. – 1998. – V. 298. – P. 212–222.

7. Шульман Л.М. Ядра комет. – М.: Изд-во «Наука». – 1987. – 232 с.

8. Марсден (Marsden B.G.) Evolution of comets into asteroids?// Physical Studies of Minor Planets. // Ed.T. Gehrels. – Washington: NASA SP-267. – 1971. – P. 211–225.

9. Вейсман (Weissman, P.R.) Physical loss of long-period comets // Astron. & Astrophys. – 1980. – V. 85. – P. 191–196.

10. Вейгерт и Тремейн (P. Wiegert, S. Tremaine) The Evolution of Long-Period Comets// Icarus. – 1999. – V. 137. – P 84–98.

11. Марсден и Вильямс (Marsden B.G., Williams G.V.) Catalogue of Cometary Orbits// Minor planet Ceter. Smithsonian Astrophys. Obs. Cambridge. MA. – 2005.

12. Радзиевский В.В. и Томанов В.П. Некоторые селекционные эффекты в открытии комет // Астрон. Ж. – 1976. – № 53. – С. 1315–1317.

13. Еверхарт (Everhart E) Comet Discoveries and Obsrvational Selection// Astron. J. – 1967. – V. 72. – № 6. – P. 716–727.

14. Еверхарт (Everhart E) Instrinsic Distribution of cometary Perihelia and Magnitudes// Astron. J. – 1967. – V. 72. – № 8. – P. 1002–1012.

15. Уиппл (Whipple F.L.) On the structure of the cometary nucleus // MMC. – 1963. – P. 639–664.

16. Мазеева О.А. Поток долгопериодических комет в планетной области: динамическая эволюция из облака Оорта// Астрономический вестник (В печати).

Поступила в редакцию 13 июля 2006 г.

УДК 534.2: 537.622.4

ГЕНЕРАЦИЯ НОРМАЛЬНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН (ВОЛН ЛЭМБА) В МЕТАЛЛАХ С ПОМОЩЬЮ ИМПУЛЬСОВ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, В.Ф. Божко

Представлены результаты экспериментальных исследований по лазерной генерации ультразвуковых волн Лэмба в ферромагнитной пластине.

Введение. В практике ультразвуковой дефектоскопии широко применяются неразрушающие методы контроля с помощью нормальных волн (волн Лэмба) [1–4]. Нормальные волны возникают в результате трансформации продольных волн, падающих на поверхность контролируемого изделия под отличным от нуля углом. Такие волны связаны с волноводным механизмом распространения ультразвуковых колебаний и могут существовать только в пластинах, листах, лентах и оболочках (например, в стенках труб) сравнительно небольшой толщины (от 0,15 до 3,5 мм).

Для возбуждения и регистрации нормальных волн обычно используют пьезоискатели с большими размерами в плоскости падения ультразвука с жестко установленным или переменным углом падения. Ввод акустических колебаний в контролируемое изделие осуществляется либо через смазку, либо через струю воды, либо иммерсионным методом.

Генерация акустических волн (в том числе и нормальных) с помощью коротких лазерных импульсов имеет ряд существенных преимуществ перед традиционными методами. В первую очередь это отсутствие непосредственного контакта с контролируемым изделием, возможность возбуждать ультразвук в объекте контроля на большом расстоянии от него, вводить световую энергию в любую точку поверхности контролируемого изделия, генерировать акустические импульсы малой длительности и использовать их для контроля изделий с грубо обработанной поверхностью и т.п. [5, 6]. В сочетании с оптимальными способами регистрации возбуждаемых нормальных ультразвуковых волн, это позволило бы существенно улучшить параметры аппаратуры для контроля металлических тонкостенных изделий.

Лазерная генерация акустических волн в металле осуществляется за счет повышения температуры поверхности металла в зоне облучения. Параметры возбуждаемых акустических импульсов (амплитуда, длительность, спектр и т.д.) в этом случае определяются размерами зоны облучения, энергией поглощаемого лазерного импульса, а так же теплофизическими характеристиками металла.

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию лазерного возбуждения в металлических пластинах нормальных волн (волн Лэмба) и влиянию механизма термоакустического преобразования на параметры возбуждаемых акустических импульсов.

Теория. Проведем расчет скорости распространения нормальных акустических волн как функции частоты колебаний v и толщины h пластины. Известно, что в свободной пластине можно возбудить два типа нормальных волн: симметричные S и антисимметричные A. Первый тип волн соответствует волнам расширения, второй – изгибным волнам. Скорость распространения нормальных волн зависит от частоты колебаний v, толщины пластины v и определяется решением дисперсионных уравнений [4]:

– для симметричных волн

$$\mathrm{th}\left[\frac{\pi}{\upsilon}vh\sqrt{1-\left(\frac{\upsilon}{\upsilon_t}\right)^2}\right]\mathrm{cth}\left[\frac{\pi}{\upsilon}vh\sqrt{1-\left(\frac{\upsilon}{\upsilon_l}\right)^2}\right]=4\sqrt{1-\left(\frac{\upsilon}{\upsilon_l}\right)^2}\sqrt{1-\left(\frac{\upsilon}{\upsilon_t}\right)^2}\left(2-\frac{\upsilon^2}{\upsilon_t^2}\right)^{-2}, \quad (1)$$

– для антисимметричных волн

$$\mathrm{th}\left[\frac{\pi}{\upsilon}vh\sqrt{1-\left(\frac{\upsilon}{\upsilon_l}\right)^2}\right]\mathrm{cth}\left[\frac{\pi}{\upsilon}vh\sqrt{1-\left(\frac{\upsilon}{\upsilon_t}\right)^2}\right]=4\sqrt{1-\left(\frac{\upsilon}{\upsilon_l}\right)^2}\sqrt{1-\left(\frac{\upsilon}{\upsilon_t}\right)^2}\left(2-\frac{\upsilon^2}{\upsilon_t^2}\right)^{-2}, \quad (2)$$

где υ – фазовая скорость нормальных волн, $\upsilon_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ и $\upsilon_t = \sqrt{\mu/\rho}$ – скорости продольной и поперечной волн в материале пластины. Здесь ρ – плотность, λ, μ – упругие постоянные материала пластины.

Анализ выражений (1) и (2) показывает, что в листе заданной толщины может существовать бесчисленное множество симметричных и антисимметричных волн с различными частотами колебаний (моды). При этом каждой из мод соответствует строго определённое значение фазовой скорости. Максимальное преобразование энергии падающей волны в энергию одной из нормальных волн происходит при совпадении фазовой скорости в падающей волне с одной из возможных скоростей нормальной волны:

$$\upsilon = \upsilon_i / \sin\alpha , \tag{3}$$

где υ_i – фазовая скорость ультразвука в окружающей среде, α – угол падения.

Как известно, перенос энергии упругих колебаний связан не с фазовой, а с групповой скоростью волн. Именно эта скорость характеризует форму импульсного сигнала и его перемещение, поэтому в импульсной дефектоскопии она играет существенную роль. Групповую скорость нормальных волн можно рассчитать по следующему соотношению [7]

$$\upsilon_g = \upsilon \left(1 - \frac{vh}{\upsilon} \frac{d\upsilon}{d(vh)} \right)^{-1} . \tag{4}$$

Эксперимент. Для проведения исследований по лазерному возбуждению нормальных волн в металлических пластинах была разработана и собрана экспериментальная установка, принципиальная схема которой показана на рис. 1. Импульсный YAG: Nd^{3+}-лазер ЛТИ-403, работающий в режиме активной модуляции добротности, излучает световые импульсы длительностью 30 нс с частотой следования 12,5 Гц. Длина волны лазерного излучения составляет 1,06 мкм, максимальная энергия импульса 400 мДж. Пространственное распределение энергии в выходном излучении лазера имеет сложную структуру, изменяющуюся от импульса к импульсу. Распределение энергии по сечению лазерного луча также неоднородно. Кроме того, энергия оптического импульса не является постоянной величиной и может отклоняться на 10-15% от его среднего значения.

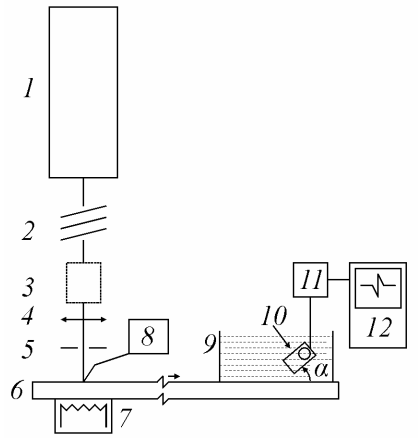


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 – лазер, 2 – оптический аттенюатор, 3 – измеритель мощности лазерного излучения, 4 – линза, 5 – диафрагма, 6 – ферромагнитная пластина, 7 – нагреватель, 8 – измеритель температуры, 9 – ванна с водой, 10 – прямой пьезоискатель продольных волн и устройство для его закрепления и поворота, 11 – усилитель, 12 – осциллограф

Интенсивность ультразвука при его лазерной генерации определяется средней поверхностной плотностью тепловой мощности лазерного излучения <*q*>. Она рассчитывается по формуле

$$< q >= \frac{4 < P >}{\pi d^2 n \tau} ,$$

где <*P*> – измеряемая средняя мощность излучения d – диаметр светового пятна n – частота следования лазерных импульсов, τ – длительность оптического импульса. При проведении эксперимента величины <*q*> соответствовали трем различным механизмам генерации ультразвука: для диаметра светового пятна d = 1,00 мм – испарительному, для d = 2,00 мм – гидродинамическому, для d = 3,00 и 4,00 мм – термоупругому [8, 9].

Мощность падающего на поверхность образца излучения регулируется с помощью оптического аттенюатора, состоящего из набора тонких стеклянных пластинок. Каждая последующая пластинка устанавливается так, чтобы поперечное смещение светового луча от предыдущих пластин было скомпенсировано. Излучение лазера ограничивается диафрагмой с диаметрами 1,00; 2,00; 3,00; 4,00 мм. Мощность лазерного излучения контролируется прибором ИМО-2Н.

Образцы представляют собой шлифованные прямоугольные пластины размерами 270×60 и толщиной h = 0,60; 1,50; 2,90 мм, изготовленные из заготовки железоникелевого сплава инварного состава 32НКД. На пластине помещается приемный стенд в виде иммерсионной ванны с

водой, дном которой служит поверхность пластины. В ванне в специальном устройстве закрепляется пьезопреобразователь продольных волн (ПП), Этим же устройством осуществляется плавное изменение угла наклона α плоскости искателя относительно поверхности пластины от 0° до 90° с точностью $\pm 1°$. Для проведения температурных исследований в установке в зоне лазерного пятна предусмотрен нагреватель.

Лазерный луч, сфокусированный линзой, направлялся через диафрагму на поверхность образца. Возбуждаемые ультразвуковые колебания, распространяясь по пластине в виде нормальных волн, трансформируются на границе раздела «пластина–вода» в продольные волны. С помощью поворотного устройства определялись положения пьезоискателя (угол α), при которых он регистрирует максимум амплитуды колебаний в нормальных волнах. Далее сигнал с преобразователя поступает на усилитель, а затем на вход осциллографа. По экрану осциллографа измеряют амплитуду U, частоту ν и время прохождения t упругого импульса в пластине. По времени и измеренному пути прохождения рассчитывались групповые скорости нормальных волн υ_g.

В качестве приемников акустических колебаний использовались демпфированные пьезопластины с резонансными частотами $\nu^{пп}$ на 0,49; 0,94; 1,07; 1,50; 1,81; 2,69; 3,76; 6,27 МГц и широкополосный клиновый поверхностно-возбуждаемый толстый пьезопреобразователь (КПВТП) [10] при работе с диафрагмами диаметры, которых 1,00; 2,00; 3,00 мм. При работе с диафрагмой диаметром 4,00 мм приемниками служили прямые пьезоискатели из комплекта дефектоскопа УД 2-12 с резонансными частотами $\nu^{пп}$ 0,6; 1,25; 2,5; 5,0; 10,0 МГц, (КПВТ) и электромагнитноакустический преобразователь (ЭМАП). Результаты исследований отражены в табл. 1–12.

Таблица 1

Толщина пластинки h = 0,6 мм, диаметр лазерного пятна d = 1,0 мм, $\langle q \rangle$ = 180 МВт/см^2					
$\nu^{пп}$, МГц	ν, МГц	νh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,56	0,34	40	3889	22,0
0,94	1,00	0,60	38	3889	36,0
1,07	1,10	0,67	38	3889	44,0
1,50	1,67	1,00	40	4000	30,0
1,88	1,40	0,84	40	4118	12,0
2,69	1,10	0,66	40	4242	7,50
3,76	1,10	0,66	40	4058	8,00
6,27	1,25	0,75	39	4118	4,00
КПВТП	1,25	0,75	40	3590	8,0

Таблица 2

Толщина пластинки h = 1,5 мм, диаметр лазерного пятна d = 1,0 мм, $\langle q \rangle$ = 180 МВт/см^2					
$\nu^{пп}$, МГц	ν, МГц	νh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,67 1,43	1,01 2,15	35 35	1321 3182	14,0 15,0
0,94	1,00	1,50	40	3182	31,0
1,07	1,11	1,67	25	2917	32,0
1,50	1,54 0,87	2,31 1,30	34 43	3043 3684	27,0 6,00
1,88	1,43 0,78	2,15 1,17	33 38	3182 3889	10,5 5,50
2,69	1,43 1,00	2,14 1,50	33 43	3040 3333	5,20 2,40
3,76	1,43 1,00	2,14 1,50	30 43	3111 3680	4,00 2,00
6,27	1,54	2,31	35	3890	6,00
КПВТП	0,67 1,43	1,00 2,14	35 35	4118 2692	4,00 4,00

Таблица 3

Толщина пластинки h = 2,9 мм, диаметр лазерного пятна d = 1,0 мм, $<q>$ = 180 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,56	1,62	38	3346	11,0
0,94	1,00	2,90	35	3346	24,0
1,07	1,00	2,90	39	2806	14,0
	1,00	2,90	35	3625	12,0
1,50	1,00	2,90	39	3346	8,00
1,88	1,67	4,84	38	3625	9,50
2,69	1,00	2,90	32	3346	4,00
3,76	1,00	2,90	32	3625	3,50
6,27	1,00	2,90	35	4579	5,50
КПВТП	0,83	2,41	30	3867	11,0

Таблица 4

Толщина пластинки h = 0,6 мм, диаметр лазерного пятна d = 2,0 мм, $<q>$ = 50,0 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,59	0,35	38	3684	11,0
0,94	1,00	0,60	38	3784	26,0
1,07	1,00	0,60	39	3889	28,0
1,50	1,00	0,60	40	3889	11,0
1,88	1,10	0,66	40	3889	8,50
2,69	1,10	0,66	40	3889	3,60
3,76	1,00	0,60	39	3889	2,80
6,27	1,10	0,66	40	3784	4,00
КПВТП	1,00	0,60	36	3333	5,20

Таблица 5

Толщина пластинки h = 1,5 мм, диаметр лазерного пятна d = 2,0 мм, $<q>$ = 50,0 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,63	0,95	35	2917	44,0
	1,66	2,50	34	2917	15,0
	5,00	7,50	59	2593	0,14
0,94	1,00	1,50	40	2917	0,34
	1,25	1,88	30	3182	0,18
1,07	1,25	1,88	25	2917	0,70
	1,00	1,50	40	3333	0,36
	1,43	2,15	33	3333	0,36
1,50	1,66	2,50	34	2692	0,44
1,88	1,43	2,14	30	3111	0,14
	4,00	6,00	19	2692	0,13
2,69	1,54	2,31	30	3111	0,08
3,76	2,86	4,29	30	3111	0,06
6,27	1,67	2,50	30	4667	0,07
КПВТП	1,67	2,50	33	2692	17,0

Таблица 6

Толщина пластинки h = 2,9 мм, диаметр лазерного пятна d = 2,0 мм, $<q>$ = 50,0 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,63	1,83	38	3346	18,0
0,94	1,00	2,90	34	3346	32,0
1,07	1,00	2,90	33	3346	26,0
1,50	1,00	2,90	33	3480	7,00
1,88	1,00	2,90	32	3625	7,00
2,69	1,00	2,90	33	3625	7,00
3,76	1,00	2,90	35	3480	5,00
6,27	1,00	2,90	35	4350	10,0
КПВТП	0,83	2,41	32	2949	26,0

Таблица 7

Толщина пластинки h = 0,6 мм, диаметр лазерного пятна d =3,0 мм, $<q>$ = 20,0 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,67	0,41	39	3684	18,0
0,94	1,00	0,60	39	3889	52,0
1,07	1,00	0,60	39	3889	52,0
1,50	1,00	0,60	40	3889	19,0
1,88	1,10	0,67	40	4000	4,00
2,69	1,00	0,60	40	4000	4,00
3,76	1,00	0,60	40	4000	4,00
6,27	1,00	0,60	38	4000	2,80
КПВТП	0,83	0,50	37	3500	8,00

Таблица 8

Толщина пластинки h = 1,5 мм, диаметр лазерного пятна d =3,0 мм, $<q>$ = 20,0 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,59 1,29	0,86 1,86	40 33	3780 2920	17,0 10,0
0,94	1,00 0,83	1,50 1,25	20 40	2500 3890	28,0 26,0
1,07	1,10 0,83	1,67 1,25	25 42	2920 3680	23,0 10,0
1,50	1,33 0,77	2,00 1,15	30 40	3040 3680	5,40 3,60
1,88	1,43 0,74	2,14 1,11	29 40	3040 3890	2,80 2,40
2,69	0,71	1,07	40	3890	3,20
3,76	0,77 1,25	1,15 1,88	39 24	4000 3180	5,00 3,00
6,27	1,25 0,77	1,88 1,15	30 42	2800 3500	7,00 12,0
КПВТП	0,71 1,00	1,07 1,50	40 20	3333 2692	11,0 7,00

Таблица 9

Толщина пластинки h = 2,9 мм, диаметр лазерного пятна d = 3,0 мм, $<q>$ = 20,0 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,49	0,67	1,94	33	3346	24,0
0,94	1,00	2,90	35	3346	48,0
1,07	1,00	2,90	33	3346	26,0
1,50	1,00	2,90	32	3480	12,0
1,88	1,00	2,90	32	3480	7,00
2,69	0,83	2,41	30	3480	4,00
3,76	1,00	2,90	34	3480	3,60
6,27	0,90	2,61	32	3222	7,00
КПВТП	0,91	2,64	31	2949	20,0

Таблица 10

Толщина пластинки h =0,60 мм, диаметр лазерного пятна d = 4,0 мм, $<q>$ = 2,30 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,6	0,83	0,50	19	4024	18,0
1,25	1,10	0,66	25	4308	18,0
2,50	1,00	0,60	20	4545	3,00
5,00	1,00	0,60	22	4125	2,50
10,0	0,91	0,54	26	4054	2,10
КПВТП	0,95	0,57	18	4178	8,00
ЭМАП	1,00	0,60		4225	0,42

Таблица 11

Толщина пластинки h =1,50 мм, диаметр лазерного пятна d = 4,0 мм, $<q>$ = 2,30 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,6	0,63	0,94	50 18	2108 4227	10,0 4,50
1,25	1,00	1,50	48	1905 2108	6,00 3,50
2,50	0,83 1,25 1,25	1,25 1,87 1,87	22 58 58	2054 1704 2192	2,24 5,00 5,00
5,00	1,00	1,50	52	1875	3,00
10,0	1,00	1,50	50	2024	2,00
КПВТП	0,85	1,27	42	2931	4,00
ЭМАП	1,92	2,88		4044	8,00

Таблица 12

Толщина пластинки h =2,90 мм, диаметр лазерного пятна d = 4,0 мм, $<q>$ = 2,30 МВт/см^2					
$v^{пп}$, МГц	v, МГц	vh, МГц·мм	α, град	υ_g ±100, м/с	U, 10^{-2} В
0,6	0,83 0,60 0,63	2,24 1,60 1,70	16 44 48	3399 1875 3158	7,00 10,0 6,00
1,25	1,00 0,90 1,00	2,70 2,50 2,70	6 18 46	2927 3333 3077	5,00 10,0 5,00
2,50	0,83 0,71 0,83	2,24 1,92 2,24	6 20 52	3000 3604 3243	3,20 2,40 3,20

Окончание табл. 12

ν^{m}, МГц	ν, МГц	νh, МГц·мм	α, град	$\upsilon_g \pm 100$, м/с	U, 10^{-2} В
5,00	1,25	3,40	4	2553	4,00
	0,83	2,24	24	3429	2,00
	0,83	2,24	62	3750	5,00
10,0	0,87	2,30	4	3000	9,00
	1,00	2,70	6	2553	2,50
	0,87	2,30	8	3692	6,00
	0,83	2,24	10	3158	6,00
КПВТП	0,83	2,24	40	2955	16,0
ЭМАП	1,42	1,89		3688	7,00

Численные значения найденных групповых скоростей нормальных волн υ_g нанесены на расчетные зависимости этих скоростей от параметра νh. Расчет производился по формулам (1), (2), (4), в которых значения скоростей поперечных υ_t и продольных υ_l волн были равны соответственно 2683 м/с и 4878 м/с [11]. Результаты расчетов и экспериментов приведены на рис.2–5.

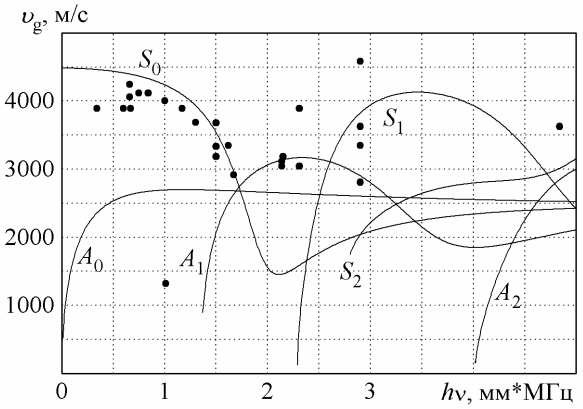


Рис. 2. Зависимость групповой скорости нормальных волн υ_g от параметра νh

— – расчет, ● – эксперимент
***d* = 1,00 мм, *q* = 180 МВт/см^2**

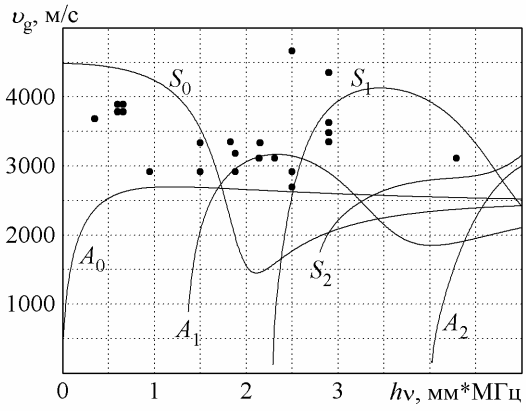


Рис. 3. Зависимость групповой скорости нормальных волн υ_g от параметра νh

— – расчет, ● – эксперимент
***d* = 2,00 мм, *q* = 50,0 МВт/см^2**

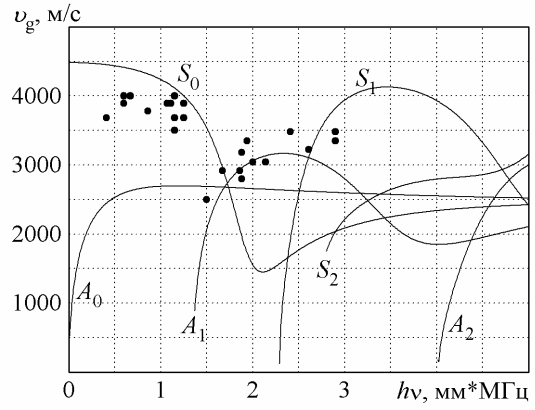


Рис. 4. Зависимость групповой скорости нормальных волн υ_g от параметра νh

— – расчет, ● – эксперимент
***d* = 3,00 мм, *q* = 20,0 МВт/см^2**

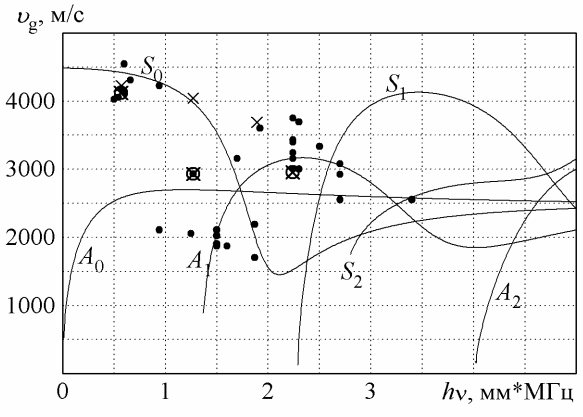


Рис. 5. Зависимость групповой скорости нормальных волн υ_g от параметра νh

— – расчет, эксперимент: ● – ПП, ⊗ – КПВТП, × – ЭМАП. *d* = 4,00 мм, *q* = 2,30 МВт/см^2

Обсуждение результатов и выводы

1. Разработана установка и предложена методика для экспериментальных исследований по лазерной генерации и регистрации акустических волн в металлических пластинах (волн Лэмба).

2. Установлено, что при испарительном механизме термоакустического преобразования в пластинах возникают в основном симметричные нормальные волны нулевого порядка S_0 и частично – симметричные волны первого порядка S_1 и антисимметричные волны нулевого и первого порядков A_0, A_1. Углы, под которыми регистрируются эти волны, лежат в пределах от 30 до 40 градусов, численные значения скоростей лежат в пределах от 2700 до 4500 м/с. При гидродинамическом механизме возбуждения антисимметричные волны нулевого порядка практически не возникают, распределение симметричных волн нулевого и первого порядков примерно одинаково.

3. В случае генерации нормальных волн за счет действия термоупругого механизма в пластинах возникают преимущественно симметричные волны нулевого и первого порядков, присутствуют некоторые моды антисимметричных волн первого порядка.

4. Диапазоны углов приема и численных значений скоростей с учетом погрешностей измерений в зависимости от механизма генерации, существенно не изменяются.

5. Начиная с частоты 1,88 МГц, частота колебаний в регистрируемых акустических импульсах нормальных волн существенно отличается от собственной частоты приемных пьезопреобразователей. Это очевидно связано с тем, что пластина независимо от ее толщины, не пропускает высокочастотную часть возбуждаемого широкополосного акустического импульса. По этой же причине максимум амплитуды возбуждаемых нормальных волн, независимо от толщины пластины, приходится на низкие частоты (0,94–1,11 МГц).

6. Широкополосный приемник (КПВТП), регистрирует примерно те же моды нормальных волн, что и резонансные преобразователи. ЭМАП регистрирует симметричные моды нулевого и первого порядков. Разложив в спектр акустический импульс, зарегистрированный этим приемником, можно получить дополнительную информацию о спектральном составе возбуждаемых нормальных волнах.

7. Полученные результаты можно использовать при разработке и создании средств и методов контроля тонкостенных металлических изделий с помощью нормальных волн, возбуждаемых лучом лазера.

Литература

1. Cavalier M.G. Controles des produits siderurgiques par methods ultrasonores. Bull. Inform/ techn., 1964, 1.

2. Drouet C. Sondage ultrasonore des toles minces d'acier a l'aide des ondes de Lamb Metaux Corrosion – Ind., 1962, 440 c.

3. Lamb H. On Waves in elastic Plate. Proc. Roy. Soc., 1916, A, XC111.

4. Викторов И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Релея и Лэмба в технике. – М.: Наука, 1966. – 168 с.

5. Бондаренко А.Н. Лазерные методы возбуждения и регистрации акустических сигналов. – М.: Изд-во стандартов, 1989. – 115 с.

6. Чабанов В.Е. Лазерный контроль материалов. – Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1986. – 232 с.

7. Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах. – М.: Изд-во АН СССР, 1957. – 502 с.

8. Волегов Ю.В., Петров Ю.В., Шушарин А.В. О механизме возбуждения акустических волн импульсами оптического квантового генератора // Физические методы испытания материалов и веществ: Тематический сборник научных трудов. – Челябинск: ЧГТУ, 1982. – 157 с.

9. О границах механизмов термоакустического преобразования при лазерной генерации ультразвука в металлах / С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, А.А. Шульгинов, К.В. Прокопьев // Дефектоскопия. – 2001. – № 4. – С. 69–75.

10. Королев М.В., Карпельсон Ф.Е. Широкополосные ультразвуковые преобразователи. – М.: Машиностроение, 1982. – 157 с.

11. Гуревич С.Ю. Основы теории и практического применения высокотемпературного ультразвукового контроля ферромагнитных конструкций: Дис. … докт. техн. наук. – Екатеринбург: ИФМ, 1995. – 416 с.

Поступила в редакцию 25 июля 2006 г.

УДК 523.214

РЕЗОНАНСНЫЕ ТРАНСНЕПТУННЫЕ ОБЪЕКТЫ КАК ИСТОЧНИК КОМЕТ СЕМЕЙСТВА ЮПИТЕРА

Е.Л. Киселёва

Обсуждается динамическая взаимосвязь резонансных объектов транснептунной зоны и короткопериодических комет. Исследование основано на модели, предполагающей формирование семейства резонансных объектов в процессе миграции планет. Динамика объектов этой популяции рассчитывалась в течение $4{,}5\cdot10^9$ лет. Исследование базируется на долговременном симплектическом интегрировании уравнений движения объектов. Показано, что многие объекты захватываются во внутреннюю часть Солнечной системы. Получено, что доля объектов из резонанса 2/3, проникающих в год на орбиты комет семейства Юпитера с перигелийными расстояниями менее 2,5 а.е., составляет $0{,}4\cdot10^{-10}$. Резонансные объекты, захваченные в планетную область, дают лучшее соответствие наблюдаемому распределению элементов орбит кентавров, чем соответствующие транснептунные объекты на орбитах с большими эксцентриситетами.

Введение

Динамические и физические характеристики короткопериодических комет предполагают, что источником этих малых тел является внешняя часть Солнечной системы. Весьма актуальным в связи с этим становится изучение динамики малых тел транснептунной области, включая исследование миграции этих тел в планетную область.

Первые предположения о происхождении короткопериодических комет были связаны с облаком Орта. Позднее, в 1980 году, в качестве источника комет семейства Юпитера был предложен пояс Койпера [1]. В некоторых из работ [2, 3] предполагалось, что доминантным источником КСЮ являются объекты на орбитах с большими эксцентриситетами. В том числе, в работе [3] было получено, что доля объектов из резонанса 2/3, проникающих в год на орбиты комет семейства Юпитера с перигелийными расстояниями менее 2,5 а.е., составляет $0{,}36\cdot10^{-10}$.

Механизм захвата транснептунных объектов на орбиты комет семейства Юпитера был описан в работах [2, 3]. Эти исследования показали, что тела из транснептунной зоны проникают во внутреннюю часть Солнечной системы в результате постепенной эволюции через всю планетную область. Таким образом, на пути из внешней части Солнечной системы к кометам семейства Юпитера малые тела проходят через промежуточный класс кентавров, чьи перигелии располагаются между орбитами Юпитера и Нептуна. В работе [4] было показано, что существует два перекрывающихся динамических класса кентавров, один из которых произошел из облака Оорта, а другой – из класса объектов на орбитах с высокими эксцентриситетами. Распределения элементов орбит, полученные при исследовании двух механизмов происхождения КСЮ, не дают полного соответствия наблюдаемому распределению.

Начальный этап перехода транснептунных объектов в планетную область связан с большими возмущениями их орбит Нептуном. Захвату подвергаются объекты, чьи орбиты подходят к орбите Нептуна. Распределение объектов с перигелиями в окрестности Нептуна, наблюдавшихся не менее чем в двух оппозициях, показывает, что они подразделяются на два класса: объекты на орбитах с большими эксцентриситетами и резонансные. Предполагается, что темп захвата резонансных объектов мал вследствие устойчивости резонансного движения по отношению к возмущениям от Нептуна [5, 6]. В одной из работ [5] было показано, что плутиносы могут выводиться из резонанса под действием механизма хаотической диффузии, и после сближения с гигантскими планетами переходят на орбиты КСЮ.

В данной работе предпринята попытка рассмотреть особенности динамической эволюции резонансных объектов транснептунной области и, таким образом, оценить эти объекты как возможный источник малых тел, захватываемых во внутреннюю часть Солнечной системы. Необходимо отметить, что орбиты наблюдаемых резонансных объектов на данный момент известны недостаточно точно для того, чтобы делать окончательные заключения о скорости захвата таких

объектов. Однако мы можем исследовать орбиты объектов, захваченных в резонанс при миграции Нептуна на стадии формирования внешней части Солнечной системы, и надежно оценить темп захвата резонансных объектов в планетную область. Исследование основывается на долговременном симплектическом интегрировании уравнений движения объектов, захваченных в резонанс при миграции Нептуна на стадии формирования внешней части Солнечной системы.

Модель

Миграция

Мы проверяем гипотезу, согласно которой Нептун мигрировал наружу на несколько астрономических единиц во время формирования внешней части Солнечной системы и, таким образом, способствовал появлению резонансной популяции в поясе Койпера [7]. Подчеркнем, что в данной работе не учитывалось взаимодействие между частицами.

Параметры моделирования были идентичны тем, которые приводились в работе [7]. Начальные большие полуоси 1000 тестируемых частиц были расположены в интервале от 27 до 42 а.е. Таким образом, все эти объекты являются потенциальными кандидатами на захват в резонанс 2/3. Мы рассмотрели 4 модели. В них начальные эксцентриситеты e и наклоны i объектов были распределены следующим образом: 0 и 0,001, 0 и 0,01, 0 и 0,05, и 0 и 0,1 для каждой из 4 моделей соответственно. Величины аргумента перигелия ω, долготы восходящего узла Ω и средней аномалии M были взяты распределенными случайным образом в интервале между 0 и 2π.

Большие полуоси каждой из планет изменялись в соответствии со следующей формулой: $a(t) = a_f - \Delta a \exp(-t/\tau)$, где параметр миграции $\tau = 10^6$ лет. Были взяты следующие начальные и конечные большие полуоси планет (a_i, a_f): (5,21; 5,2), (9,5; 9,53), (14,5; 19,19), (21,3; 30,06) для Юпитера, Сатурна, Урана и Нептуна соответственно.

Результаты моделирования для объектов резонанса 2/3 во всех четырех моделях оказались приблизительно равными (за исключением вероятности захвата) и соответствуют тем, что были приведены в подобной работе [7]. Мы обнаружили, что в случае четвертой модели, где рассматривался динамически возбужденный начальный диск частиц, вероятность захвата в резонанс 2/3 меньше чем в остальных, однако распределение наклонов в этом случае хорошо соответствует наблюдаемому.

Долговременная эволюция

В зоне резонанса 2/3 к концу миграции планет по модели 4 находилось 332 объекта. Для их исследования было проведено симплектическое интегрирование уравнений движения [8] на промежутке 4,5 млрд лет. При этом учитывались возмущения от Юпитера, Сатурна, Урана и Нептуна. Для каждой из частиц вычисления прекращались при достижении орбиты с $q < 2{,}5$ а.е. или $a > 1000$ а.е..

Результаты

Исследование долговременной эволюции объектов из резонанса 2/3 в планетную область проводились и ранее [5], но рассматривались, как правило, равномерные распределения элементов орбит объектов, покрывающие всю резонансную зону с малыми амплитудами либраций. Таким образом, не учитывались особенности происхождения резонансной популяции, вследствие которых у объектов появляются специфические динамические свойства.

Как упоминалось выше, выход из резонанса происходит вследствие действия механизма хаотической диффузии [5], после чего объект захватывается в планетную область. В результате нашего исследования было получено, что к концу интегрирования на орбитах резонанса 2/3 осталось 44 объекта из 332. Таким образом, можно утверждать, что за время существования Солнечной системы резонансные зоны транснептунной области истощились приблизительно в 10 раз. Необходимо отметить, что мы не получили «стабильных» орбит, описанных Морбиделли [5]. Поэтому мы можем предполагать, что со временем резонансная популяция 2/3 истощится полностью.

Из 44 объектов, сохранившихся в резонансе 2/3 за время жизни Солнечной системы, 5 находились в этой области еще до начала миграции планет. У этих объектов за время миграции увеличились эксцентриситеты, однако далее их элементы орбит не претерпели значительных изменений. В соответствии с нашей моделью можно говорить о том, что 0,5% наблюдаемых ныне в резонансе 2/3 объектов всегда находились на этих орбитах.

Еще 6 объектов в конце интегрирования имели большие полуоси, соответствующие периферии резонансной зоны, где устойчивость орбит крайне мала. Однако они находились на почти круговых орбитах, что и защитило их от сближения с Нептуном. Эти объекты попали на круговые орбиты еще во время миграции планет, и сохранились на них в течение времени жизни Солнечной системы. Существование подобных орбит противоречит результатам работы [5], поскольку им было получено, что скорость динамического выброса объектов с подобными элементами орбит является максимальной.

На рис. 1–3 представлены распределения элементов орбит объектов из резонанса 2/3 в начале долговременной эволюции, на момент окончания интегрирования, а также наблюдаемое распределение.

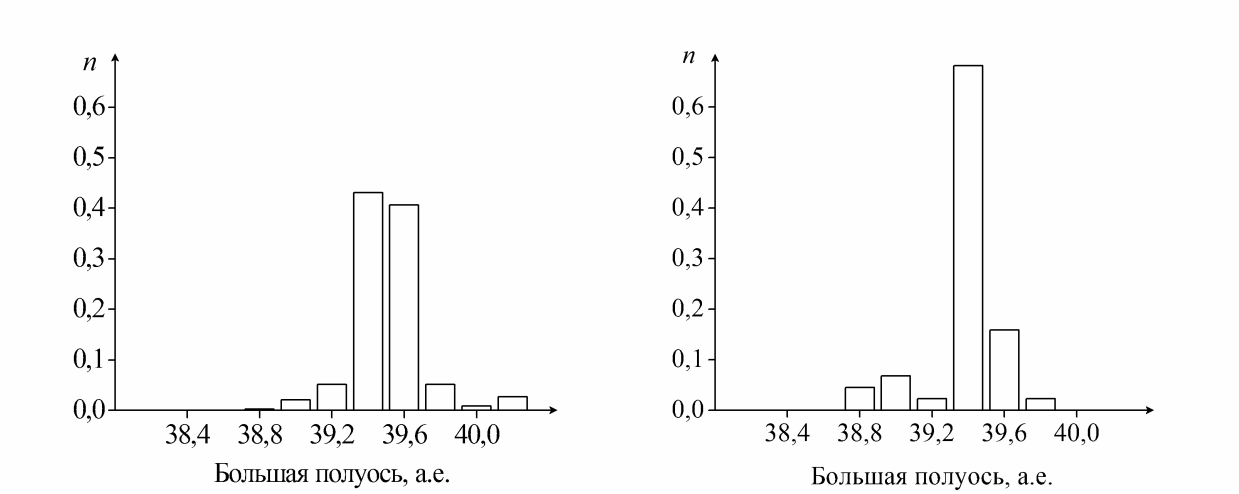


Рис. 1. Распределение больших полуосей объектов резонанса 2/3 в момент окончания миграции Нептуна

Рис. 2. Распределение больших полуосей объектов резонанса 2/3 после долговременной эволюции

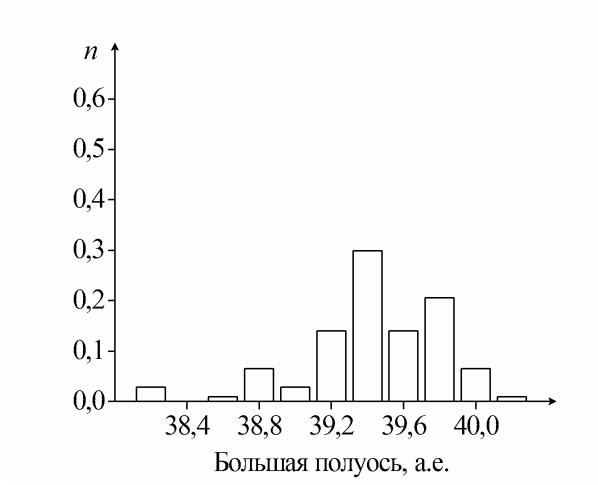


Рис. 3. Распределение больших полуосей наблюдаемых объектов резонанса 2/3

Захват объектов резонанса 2/3 на орбиты КСЮ

Как было упомянуто выше, на пути из внешней части Солнечной системы к кометам семейства Юпитера малые тела проходят через промежуточный класс кентавров Мы исследовали орбитальное распределение Кентавров, произошедших из резонанса 2/3 и сравнили его с наблюдаемым. Наблюдаемые объекты составляют выборку из многочисленного семейства объектов, имеющих различные элементы орбит и разные шансы обнаружения. Поэтому должны быть учтены эффекты наблюдательной селекции в открытии объектов с различными орбитами и звездными величинами. В работе [4] была разработана специальная методика, учитывающая вероятность попада-

ния далеких объектов в узкую полосу служб поиска вблизи эклиптики, распределение транснептунных объектов по размерам и эффективность обнаружения объектов с различным блеском.

Распределение по большим полуосям показывает, что основная часть Кентавров, произошедших из резонанса 2/3 (рис. 4), расположена в интервале (20; 60) а.е., что лучше соответствует наблюдаемому распределению (рис. 5), чем в случае захвата транснептунных объектов, расположенных на орбитах с большими эксцентриситетами. В распределении по перигелийным расстояниям обнаружилось расхождение в области высоких перигелиев. Это объясняется возможной кометной активностью кентавров на относительно малых расстояниях от Солнца [4].

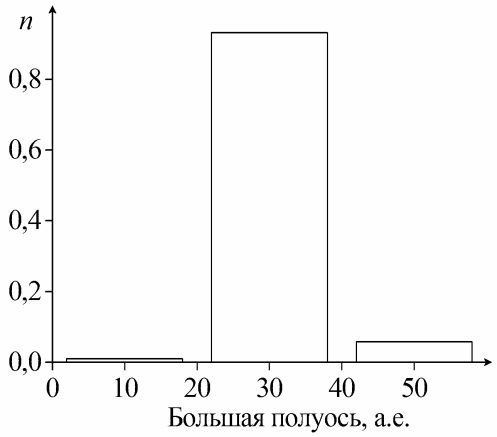


Рис. 4. Распределение кентавров, захваченных из резонанса 2/3, по большим полуосям

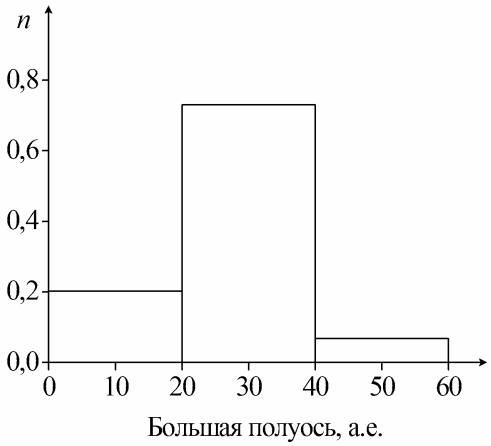


Рис. 5. Распределение наблюдаемых кентавров по большим полуосям

Распределение наклонов комет семейства Юпитера

На рис. 6 показано распределение наклонов и параметра Тиссерана для объектов, которые эволюционировали на орбиты с $q < 2{,}5$ а.е. с орбит резонанса 2/3. Распределение наклонов согласуется с наблюдаемым для комет семейства Юпитера. Отметим, что многие объекты имеют параметр Тиссерана $T \sim 2{,}9$. Это значение больше, чем те, что были получены при исследовании захвата объектов с орбит с высокими эксцентриситетами ($T \sim 2{,}6$ [3]) и с орбит из облака Оорта[4].

Темп захвата на короткопериодические орбиты

На рис. 7 представлен график зависимости числа сохранившихся в резонансе 2/3 частиц $N_{2/3}$ от времени t в последние два миллиарда лет. Производная от функции $N_{2/3}(t)$ дает в точности скорость захвата объектов на короткопериодические орбиты. Наши исследования показали, что изменение количества частиц в резонансе 2/3 со временем описывается функцией вида:

$$N_{2/3}(t) = A + B\exp(-t/C)\,.$$

Окончательно, результат представляется в виде:

$$N_{2/3}(t) = 39 + 218\cdot\exp(-t/1180)\,.$$

Этот результат отличается от того, который был получен в исследовании [5]; это опять же свидетельствует об особенных динамических свойствах орбит, произошедших путем захвата в резонанс.

Вычисление доли объектов λ_{jf}, проникающих в год на орбиты комет семейства Юпитера с перигелийными расстояниями менее 2,5 а.е. из резонанса 2/3, было проведено по методике работы [3]. Согласно этой методике

$$\lambda_{jf} = \frac{P}{N_{2/3}}\frac{dN}{dt},$$

где P – вероятность захвата короткопериодических комет с орбит Кентавров. Мы получили, что эта оценка составляет $0{,}4\cdot10^{-10}$ комет в год, что аналогично оценке для объектов с орбит с высокими эксцентриситетами.

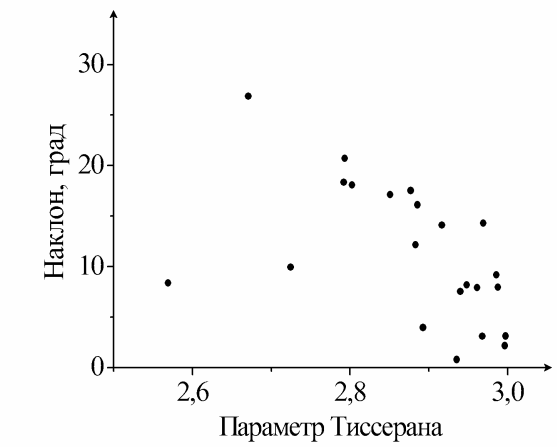


Рис. 6. Распределение параметров Тиссерана и наклонов для объектов, которые были захвачены на орбиты КСЮ из резонанса 2/3

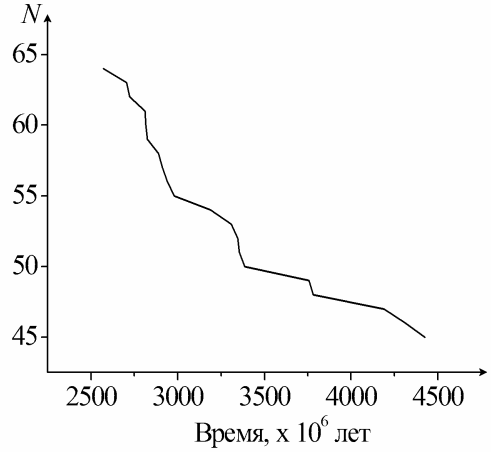


Рис. 7. График зависимости числа сохранившихся в резонансе 2/3 частиц $N_{2/3}$ от времени

Заключение

В работе изучалась динамическая взаимосвязь резонансных объектов транснептунной зоны и короткопериодических комет. Исследование основано на модели, предполагающей формирование семейства резонансных объектов в процессе миграции планет. Наши вычисления показали, что многие объекты из резонанса 2/3 захватываются в планетную область. Было получено, что доля объектов из резонанса 2/3, проникающих в год на орбиты комет семейства Юпитера с перигелийными расстояниями менее 2.5 а.е., составляет $0{,}4 \cdot 10^{-10}$. Эта оценка соответствует той, что была получена в работе [3] для транснептунных объектов с большими эксцентриситетами. Однако распределение элементов орбит исследуемых нами объектов лучше согласуется с наблюдаемым распределением Кентавров, чем подобные распределения для объектов с высокими эксцентриситетами.

Данная работа была поддержана грантами РФФИ 04-02-96042 и 06-02-16512, а также грантом Правительства Челябинской области

Литература

1. Fernandez J.A. On the existence of a comet beyond Neptune // MNRAS. –1980. – № 192. – P. 481–491.

2. Duncan M.J., Levison H.F. A disk of scattered icy objects and the origin of Jupiter-family comets // Science – 1997. – № 276. – P. 1670–1672.

3. Emel'yanenko V., Asher D., Bailey M. High-eccentricity trans-Neptunian objects as a source of Jupiter-family comets // Mon. Not. Astron. Soc. – 2004. – № 350. – P. 161–166.

4. Emel'yanenko V., Asher D., Bailey M. Centaurs from the Oort cloud and the origin of Jupiter-family comets // Mon. Not. Astron. Soc. – 2005. – № 361. – P. 1345–1351.

5. Morbidelli A. Chaotic diffusion and the origin of comets from the 2/3 resonance in the Kuiper Belt // Icarus –1997. – № 127. – P. 1–12.

6. Nesvorny D. and Roig F. Mean motion resonances in the trans-Neptunian region. The 2:3 resonance with Neptune // Icarus. – 2000. – № 148. – P. 282–300.

7. Malhotra R. The origin of Pluto's orbit: implications for the Solar system beyond Neptune // Astron. Journal – 1995. – № 110. – P. 420–429.

8. Emel'yanenko V. An explicit symplectic integrator for cometary orbits // Celest. Mech. Dynam. Astron. – 2002. – № 84. – P. 331–341.

Поступила в редакцию 30 сентября 2006 г.

УДК 531.12

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЫ «КОЛЛАПСИРУЮЩИХ» ТВЁРДЫХ СФЕР

И.И. Клебанов, П.И. Грицай, Н.Н. Гинчицкий

Методом Вертхейма получено точное аналитическое решение интегрального уравнения Перкуса–Йевика для одномерной системы частиц с одноступенчатым потенциалом отталкивания («коллапсирующие» твердые сферы). На основании данного решения построено уравнение состояния одномерной системы «коллапсирующих» твердых сфер и установлено, что в приближении Перкуса–Йевика фазовый переход в такой системе не наблюдается.

На протяжении последних 20 лет повышенный интерес специалистов в области физики конденсированного состояния вызывает система «коллапсирующих» твердых сфер (*collapsing hard spheres* (*CHS*)). «Коллапсирующими» твёрдыми сферами называют систему частиц с потенциалом парного взаимодействия вида

$$V(r)=\begin{cases}\infty, r<a,\\ V_0,\ a\le r\le b\\ 0,\ r>b,\end{cases} \qquad (1)$$

где V_0 – положительная постоянная, r – расстояние между частицами, a – диаметр «твердого ядра» (*hard core diameter*), b – диаметр «мягкого ядра» (*soft core diameter*) [1]. Этот интерес связан с тем, что системы «коллапсирующих» твердых сфер находят широкое применение при математическом моделировании изоморфных фазовых переходов, превращениях в коллоидных системах, при изучении аномальных кривых плавления и т. д. [2]. В настоящее время проведены расчеты термодинамических характеристик системы «коллапсирующих» твердых сфер методом молекулярной динамики и термодинамической теории возмущений, а также в рамках спин-жидкостного подхода (см., например, [3] и цитируемую там литературу).

Однако в статистической механике существует, как известно, и другой подход к изучению систем с взаимодействием – решение приближенных интегральных уравнений для парной корреляционной функции. Авторам неизвестны работы, в которых решались бы интегральные уравнения для парной корреляционной функции системы «коллапсирующих» твердых сфер. В то же время такое исследование представляет несомненный интерес, хотя бы с точки зрения изучения возможностей метода интегральных уравнений.

В настоящей работе система *CHS* изучается в приближении Перкуса–Йевика. Известно, что уравнение Перкуса–Йевика допускает точное аналитическое решение в случае потенциала твердых сфер [4]. Это решение на сегодняшний день является единственным аналитическим решением нелинейного интегрального уравнения для парной корреляционной функции. Мы покажем, что методы, развитые в [4], позволяют построить точное аналитическое решение уравнения Перкуса–Йевика и для более сложной и «реалистичной» системы *CHS*. В настоящей работе мы подробно изучим одномерную систему *CHS*. Как и всякая одномерная система с короткодействующим потенциалом взаимодействия частиц, *CHS* не допускает фазового перехода [5], однако ее изучение представляет несомненный методический интерес как для развития математического аппарата, так и для уяснения различий с классическим решением Вертхейма–Тьеля [4].

Уравнение Перкуса–Йевика в одномерном случае имеет вид:

$$n_2(x)e^{\beta V(x)}=1-n\int_{-\infty}^{\infty}dx'(e^{\beta V(x')}-1)n_2(x')(n_2(x-x')-1), \qquad (2)$$

где $\beta=1/kT$, T – температура, k – постоянная Больцмана, n – плотность частиц, $n_2(x)$ – парная корреляционная функция, $V(x)$ – потенциал взаимодействия частиц. (Рассматривается система с постоянным числом частиц при фиксированной температуре). Приведем уравнение (2) к более удобному для дальнейшего анализа виду

$$n_2(x)e^{\beta V(x)} = 1 - n\int_{-\infty}^{\infty} dx'(1-e^{-\beta V(x')})n_2(x')e^{\beta V(x')}(n_2(x-x')e^{-\beta V(x-x')}e^{\beta V(x-x')} - 1). \quad (3)$$

Введем обозначение: $\tau(x) = n_2(x)e^{\beta V(x)}$.

Тогда уравнение (3) запишется следующим образом

$$\tau(x) = 1 - n\int_{-\infty}^{\infty} dx'(1-e^{-\beta V(x')})\tau(x')(\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')} - 1). \quad (4)$$

Учитывая вид потенциального взаимодействия (1), имеем

$$e^{-\beta V(x)} = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ e^{-\beta V_0}, & a \le |x| \le b \\ 1, & |x| > b \end{cases}. \quad (5)$$

Перепишем далее уравнение (4) с учетом (5)

$$\tau(x) = 1 - n\int_{-a}^{a}\tau(x')(\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')} - 1)dx' -$$

$$-n(1-e^{-\beta V_0})\left[\int_{-b}^{-a}\tau(x')(\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')} - 1)dx' + \int_{a}^{b}\tau(x')(\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')} - 1)dx'\right] \quad (6)$$

или

$$\tau(x) = 1 - n\int_{-a}^{a}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx' -$$

$$-n(1-e^{-\beta V_0})\left[\int_{-b}^{-a}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx' + \int_{a}^{b}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx'\right] +$$

$$+n\int_{-a}^{a}\tau(x')dx' + n(1-e^{-\beta V_0})\left[\int_{-b}^{-a}\tau(x')dx' + \int_{a}^{b}\tau(x')dx'\right]. \quad (7)$$

В силу изотропии $\tau(x) = \tau(-x)$, поэтому уравнение (7) принимает вид:

$$\tau(x) = A - 2n\int_{-a}^{a}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx' -$$

$$-n(1-e^{-\beta V_0})\left[\int_{-b}^{-a}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx' + \int_{a}^{b}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx'\right], \quad (8)$$

где

$$A = 1 + 2n\int_{0}^{a}\tau(x')dx' + 2n(1-e^{-\beta V_0})\int_{a}^{b}\tau(x')dx'. \quad (9)$$

Уравнение (9) будем решать методом преобразования Лапласа

$$\int_{0}^{\infty}\tau(x)e^{-sx}dx = \frac{A}{s} - n\int_{0}^{\infty}e^{-sx}dx\int_{-a}^{a}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx' -$$

$$-n(1-e^{-\beta V_0})\int_{0}^{\infty}e^{-sx}dx\left[\int_{-b}^{-a}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx' + \int_{a}^{b}\tau(x')\tau(x-x')e^{-\beta V(x-x')}dx'\right]. \quad (10)$$

После смены порядка интегрирования по x и x' и учета значений фактора (5) имеем

$$\int_0^\infty \tau(x)e^{-sx}dx = \frac{A}{s} - ne^{-\beta V_0}\int_{-a}^{a}\tau(x')dx'\int_{x''+a}^{x''+b}\tau(x-x')e^{-sx}dx - n\int_{-a}^{a}\tau(x')dx'\int_{x''+b}^{\infty}\tau(x-x')e^{-sx}dx$$
$$-n(1-e^{-\beta V_0})[e^{-\beta V_0}\int_{-b}^{-a}\tau(x')dx'\int_{x'+a}^{x'+b}\tau(x-x')e^{-sx}dx + \int_{-b}^{-a}\tau(x')dx'\int_{x'+b}^{\infty}\tau(x-x')e^{-sx}dx +$$
$$+e^{-\beta V_0}\int_{a}^{b}\tau(x')dx'\int_{0}^{x'-a}\tau(x-x')e^{-sx}dx + e^{-\beta V_0}\int_{a}^{b}\tau(x')dx'\int_{x'+a}^{x'+b}\tau(x-x')e^{-sx}dx +$$
$$+\int_{a}^{b}\tau(x')dx'\int_{x'+b}^{\infty}\tau(x-x')e^{-sx}dx]. \qquad (11)$$

Вводя новую переменную $y = x - x'$, получим

$$\int_0^\infty \tau(x)e^{-sx}dx = \frac{A}{s} - ne^{-\beta V_0}\int_{-a}^{a}\tau(x')dx'\int_{a}^{b}\tau(y)e^{-s(y+x')}dy - n\int_{-a}^{a}\tau(x')dx'\int_{b}^{\infty}\tau(y)e^{-s(y+x')}dy$$
$$-n(1-e^{-\beta V_0})[e^{-\beta V_0}\int_{-b}^{-a}\tau(x')dx'\int_{a}^{b}\tau(y)e^{-s(y+x')}dy + \int_{-b}^{-a}\tau(x')dx'\int_{b}^{\infty}\tau(y)e^{-s(y+x')}dy +$$
$$+e^{-\beta V_0}\int_{a}^{b}\tau(x')dx'\int_{-x'}^{-a}\tau(y)e^{-s(y+x')}dy + e^{-\beta V_0}\int_{a}^{b}\tau(x')dx'\int_{a}^{b}\tau(y)e^{-s(y+x')}dy +$$
$$+\int_{a}^{b}\tau(x')dx'\int_{b}^{\infty}\tau(y)e^{-s(y+x')}dy]. \qquad (12)$$

Определим далее функции комплексного переменного s:

$$F(s) = \int_0^a \tau(x)e^{-sx}dx, \qquad K(s) = \int_a^b \tau(x)e^{-sx}dx,$$
$$G(s) = \int_b^\infty \tau(x)e^{-sx}dx, \qquad M(s) = \int_a^b \tau(x')dx'\int_{-x'}^{-a}\tau(y)e^{-s(y+x')}dy,$$
$$L(s) = F(s) + (1-e^{-\beta V_0})K(s), \quad \psi(s) = G(s) + e^{-\beta V_0}K(s). \qquad (13)$$

Тогда на основе уравнения (12) получим

$$\psi(s) = \frac{\frac{A}{s} - L(s) - \gamma M(s)}{1 + n(L(s) + L(-s))}, \qquad (14)$$

где $\gamma = ne^{-\beta V_0}(1-e^{-\beta V_0})$.

Легко видеть, что функция $\psi(s)$ является преобразованием Лапласа от парной корреляционной функции $n_2(x)$, а функция $L(s)$ – преобразование Лапласа от прямой корреляционной функции $C(x) = [1-e^{\beta V(x)}]n_2(x)$ в приближении Перкуса–Йевика.

Введем далее вспомогательную функцию

$$H(s) = s^2(\frac{A}{s} + L(-s) + \gamma M(-s))\psi(s). \qquad (15)$$

Из (14) и (15) получаем, что

$$H(s) = \frac{1}{1 + n(L(s) + L(-s))}[A^2 + sA(L(-s) - L(s)) + sA(M(-s) - M(s)) -$$
$$-s^2\gamma(M(s)L(-s) + M(-s)L(s)) - s^2L(s)L(-s) - s^2\gamma^2M(s)M(-s)]. \qquad (16)$$

Функции $K(s)$, $M(s)$, $F(s)$ будучи определёнными интегралами в конечной области от ограниченных функций, регулярны на всей комплексной плоскости. Функция $G(s)$, будучи определенным интегралом от ограниченной функции в полубесконечной области, регулярна в правой полуплоскости. Тогда функция $H(s)$ также регулярна в правой полуплоскости. Но в силу четности, $H(s)$ регулярна также и в левой полуплоскости. Поскольку функция $H(s)$ не содержит деления на s, она также регулярна и в нуле. Как показано в [4], в случае твердых сфер функция $H(s)$ регулярна и на мнимой оси, причем это свойство не зависит от наличия или отсутствия короткодействующего «мягкого ядра» в потенциале взаимодействия частиц. Таким образом, функция $H(s)$ регулярна на всей комплексной плоскости, а значит полностью определяется своими асимптотиками. Анализ показывает, что при $s \to \infty$ $L(s) \sim \frac{c(0)}{s}$, $L(-s) \sim \frac{c(b)e^{sx}}{s}$, $M(s) \sim \frac{m}{s}$, $M(-s) \sim \tau(a)\tau(b)e^{s(b-a)}$, $H(s) \sim s$. То есть $H(s) = p + p_1 s$.

В силу четности $H(s)$ p_1 должно тождественно обратиться в нуль. То есть

$$H(s) = p\,. \tag{17}$$

Значит

$$H(s) = H(0) = \frac{A^2}{1 + n(L(0) + L(-0))} = \frac{A^2}{1 + 2nL(0)} =$$

$$= \frac{A^2}{1 + 2n(\int_0^a \tau(x)dx + (1 - e^{-\beta V_0})\int_a^b \tau(x)dx)} = \frac{A^2}{A} = A \tag{18}$$

Из (15) и (18) следует, что:

$$H(s) = A = s^2(\frac{A}{s} + L(-s) + \gamma M(-s))\psi(s)$$

$$\psi(s)L(-s) = \frac{A}{s^2} - \frac{\psi(s)A}{s} - \psi(s)\gamma \cdot M(-s) \tag{19}$$

Из (14) имеем

$$\psi(s)(1 + n(L(s) + L(-s))) = \frac{A}{s} - L(s) - \gamma M(s) \tag{20}$$

Из (19) и (20) получим

$$\psi(s) + n\psi(s)L(s) + n(\frac{A}{s^2} - \frac{\psi(s)A}{s} - \psi(s)\gamma M(-s)) = \frac{A}{s} - L(s) - \gamma M(s)\,,$$

$$\psi(s) + L(s) + A(\frac{n}{s^2} - \frac{1}{s}) + n\psi(s)(L(s) - \frac{A}{s} - \gamma M(-s)) + \gamma M(s) = 0\,,$$

$$\bar{L}(\tau(x)) + A(\frac{n}{s^2} - \frac{1}{s}) + n\psi(s)(L(s) - \frac{A}{s} - \gamma M(-s)) + \gamma M(s) = 0\,,$$

где $\bar{L}(\tau(x))$ – преобразование Лапласа от функции $\tau(x)$.

Принимая во внимание определение функции $\psi(s)$ (13), имеем

$$\bar{L}(\tau(x)) + A(\frac{n}{s^2} - \frac{1}{s}) + nG(s)(L(s) - \frac{A}{s} - \gamma M(-s)) + ne^{-\beta V_0}K(s)(L(s) - \frac{A}{s} - \gamma M(-s)) + \gamma M(s) = 0 \tag{21}$$

Подействуем на уравнение (21) оператором обратного преобразования Лапласа, в результате чего получим:

$$\tau(x) = \begin{cases} -C(x), & |x| < a \\ -\dfrac{C(x)}{1 - e^{-\beta V_0}}, & a \le |x| \le b \end{cases} = A(1 + ne^{-\beta V_0}k_0) - Anx\,, \tag{22}$$

где постоянные A и k_0 находятся из системы уравнений

$$\begin{cases} A = 1 + 2n\int_0^a \tau(x)dx + 2n(1-e^{-\beta V_0})\int_a^b \tau(x)dx \\ k_0 = \int_a^b \tau(x)dx \end{cases}. \qquad (23)$$

(Очевидным условием «физичности» решения является: $A > 0$ и $k_0 > 0$).

Подставляя далее $\tau(x)$ в (14) и совершая обратное преобразование Лапласа, найдем парную корреляционную функцию $n_2(x)$ для любых значений параметров a, b, n, β, V_0.

Зная парную корреляционную функцию системы «коллапсирующих» твердых сфер, можно найти ее уравнение состояния

$$P = nkT - \frac{1}{6}n^2\int_0^\infty 2x\frac{dV}{dx}n_2(x)dx, \qquad (24)$$

где P – давление. В силу ступенчатости потенциала $V(x)$

$$\frac{dV}{dx} = -kTe^{\beta V_0}[e^{-\beta V_0}\delta(x-a) + (1-e^{-\beta V_0})\delta(x-b)],$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака. Подставляя найденное выражение в (24), получим

$$P = nkT - \frac{kTn^2}{3}[a\tau(a)e^{-\beta V_0} + (1-e^{-\beta V_0})b\tau(b)]. \qquad (25)$$

Анализ системы (23) и уравнения (25) показывает, что петля Ван-дер-Ваальса на изотермах отсутствует. К этому же выводу можно прийти, анализируя уравнение для обратной сжимаемости

$$\frac{1}{kT}\left(\frac{\partial P}{\partial n}\right)_T = 1 - n\int_{-\infty}^{\infty} C(x)dx = A. \qquad (26)$$

Поскольку $V_0 > 0$, $A > 0$ (9), т.е. зависимость давления от плотности частиц при постоянной температуре монотонна. Легко показать также, что полученное нами решение переходит в классическое решение Вертхейма–Тьёля [4] при $a = b$ или при $V_0 = 0$.

Таким образом, уравнение Перкуса–Йевика допускает аналитическое решение в замкнутой форме не только для потенциала твердых сфер, но и для потенциала с одноступенчатым короткодействующим отталкиванием. Развитый нами формализм допускает обобщение на трёхмерный случай [6], а также на случай потенциала, содержащего более одной ступени, что является предметом отдельного исследования.

Литература

1. Santos A. Are the energy and virial routes to thermodynamics equation for hard spheres? // cond–mat / 0607126 (2006).

2. Стишов С.М. О фазовой диаграмме системы «коллапсирующих» твердых сфер // ЖЭТФ. – 2002. – Т. 122. – Вып. 1(7). – С. 76–78.

3. Михеенков А.В., Барабанов А.Ф., Максимов Л.А. Спин-жидкостный подход в теории классической жидкости // Письма в ЖЭТФ. – 2004. – Т. 80. – Вып. 10.– С. 766–770.

4. Wertheim M.S. Analytic Solution of the Percus–Yevick Equation // Journal of Math. Phys. – 1964. – V. 5. – № 5. – P. 643–651.

5. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. – М.: Мир, 1978. – Т. 1. – 406 с.

6. Klebanov I., Gritsay P., Ginchitskii N. Exact solution of the Percus–Yevick integral equation for «collapsing» hard spheres // cond–mat / 0604239 (2006).

Поступила в редакцию 2 октября 2006 г.

УДК 532.6

КОЛЕБАНИЯ КАПЛИ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ, ОГРАНИЧЕННОЙ ДВУМЯ ПЛОСКОСТЯМИ

А.Е. Коренченко, В.П. Бескачко

Проведено математическое моделирование движения капли вязкой жидкости, зажатой между двумя плоскими поверхностями и выведенной из состояния механического равновесия. Обнаружено, что релаксация имеет характер затухающих колебаний. Определены собственные частоты и коэффициенты затухания таких колебаний, совместимых с предположением об осевой симметрии движений в капле. Выявлена зависимость коэффициента затухания колебаний от вязкости жидкости.

Введение. Возможность одновременного измерения поверхностного натяжения, плотности и вязкости жидкости по наблюдениям за собственными и вынужденными колебаниями свободных, опертых или стесненных капель, представляет значительный интерес в связи с развитием техники физико-химических экспериментов над жидкостями. Известны эксперименты по определению этих свойств по наблюдениям за колебаниями свободных капель, находящихся в условиях невесомости [1] или левитирующих – взвешенных в электромагнитном поле [2] или газовом потоке [3]. Ввиду трудностей технической реализации экспериментов со свободными каплями представляет интерес оценка возможности определения тех же свойств для опертых, подвешенных или стесненных капель. В настоящей работе с помощью численного моделирования делается попытка оценить эту возможность для «зажатых» капель – ограниченных сверху и снизу двумя горизонтальными плоскими твердыми поверхностями. Задача состоит в том, чтобы установить связь между интересующими нас свойствами жидкости и параметрами колебаний такой капли после выведения ее из состояния равновесия

Математическая модель. Пусть жидкая капля объема V зажата между двумя плоскостями, расстояние между которыми H, и выполнены следующие предположения:

- жидкость несжимаема;
- форма расплющенной капли, а также поля скорости и давления в жидкости имеют осевую симметрию;
- тепловыделение, обусловленное движением жидкости, незначительно, так что справедливо изотермическое приближение;
- можно пренебречь испарением с поверхности капли;
- механизм растекания таков, что условия прилипания на твердых поверхностях не нарушаются;
- отсутствует гистерезис смачивания.

Тогда гидродинамические уравнения движения жидкости в капле запишутся как

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u} + \nu\Delta\mathbf{u} - \frac{1}{\rho}\nabla p - \mathbf{g},$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0.$$

Здесь $\mathbf{u}$ и p – поля скорости и давления в жидкости, ν – коэффициент кинематической вязкости жидкости, ρ – плотность жидкости, $\mathbf{g}$ – ускорение свободного падения. Обозначим через $\mathbf{n} = \{n_r, n_z\}$ единичный вектор внешней нормали, через $\boldsymbol{\tau} = \{\tau_r, \tau_z\}$ единичный касательный вектор к свободной поверхности, через $\Gamma_{жт}$ и $\Gamma_{жг}$ – границы жидкость–твердое и жидкость–газ. Тогда выполнены следующие граничные условия:

$$\mathbf{u}\big|_{\Gamma_{жт}} = 0,$$

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{T}\big|_{\Gamma_{жг}}\cdot\boldsymbol{\tau} = 0,$$

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{T}\big|_{\Gamma_{\text{жг}}}\cdot\mathbf{n}=\sigma_{\text{жг}}K\,,$$

где $\mathbf{T}_{ij}=-p\varepsilon_{ij}+\eta\left(\partial u_i/\partial x_j+\partial u_j/\partial x_i\right)$, $i,j=1,2$ – тензор напряжений, K – кривизна свободной поверхности капли, $\sigma_{\text{жг}}$ и $\sigma_{\text{жт}}$ – коэффициенты поверхностного натяжения на границе жидкость–газ и жидкость–твердое тело соответственно, η – коэффициент динамической вязкости жидкости. Первое условие означает непроницаемость твердых границ и отсутствие проскальзывания на них, второе – отсутствие сдвиговых напряжений на свободной границе жидкости, третье – равенство нормальных напряжений на этой границе поверхностному давлению, определяемому формулой Лапласа.

Введем безразмерные переменные, когда скорость **u** отнесена к характерной величине $u_0=10^{-2}$ м/с (начальная амплитуда скорости возмущения), расстояния – к радиусу R равновеликой свободной капли, время – к R/u_0, давление к ρu_0^2 и обозначим $\mathrm{Re}=u_0R\rho/\eta$ – число Рейнольдса, $\mathrm{Fr}=u_0^2/(gR)$ – число Фруда, $\mathrm{We}=u_0^2R\rho/\sigma_{\text{жг}}$ – число Вебера. Тогда в безразмерных цилиндрических координатах (r,z) уравнения для скоростей $\vec{\mathbf{V}}=(V_r,V_z)$ и давления P запишутся как

$$\frac{\partial V_r}{\partial t}=-\left(\vec{\mathbf{V}}\cdot\vec{\nabla}\right)V_r-\frac{\partial P}{\partial r}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial V_r}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2V_r}{\partial z^2}-\frac{V_r}{r^2}\right),\tag{1}$$

$$\frac{\partial V_z}{\partial t}=-\left(\vec{\mathbf{V}}\cdot\vec{\nabla}\right)V_z-\frac{\partial P}{\partial z}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial V_z}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2V_z}{\partial z^2}\right),\tag{2}$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial P}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2P}{\partial z^2}=-\left(\frac{\partial V_r}{\partial r}\right)^2-\left(\frac{V_r}{r}\right)^2-2\frac{\partial V_z}{\partial r}\frac{\partial V_r}{\partial z}-\left(\frac{\partial V_z}{\partial z}\right)^2,\tag{3}$$

а в качестве граничных условий будем иметь:

$$V_r\big|_{\Gamma_{\text{жт}}}=V_z\big|_{\Gamma_{\text{жт}}}=0\,,\tag{4}$$

$$\left(2n_zn_r\left(\frac{\partial V_r}{\partial r}-\frac{\partial V_z}{\partial z}\right)+\left(n_z^2-n_r^2\right)\left(\frac{\partial V_z}{\partial r}+\frac{\partial V_r}{\partial z}\right)\right)\Bigg|_{\Gamma_{\text{жг}}}=0\,,\tag{5}$$

$$\left(-P+2n_z^2\frac{\partial V_r}{\partial r}-2n_zn_r\left(\frac{\partial V_z}{\partial r}+\frac{\partial V_r}{\partial z}\right)+2n_r^2\frac{\partial V_z}{\partial z}\right)\Bigg|_{\Gamma_{\text{жг}}}=\frac{K}{\mathrm{We}}+P_0\,.\tag{6}$$

Здесь P есть превышение давления в точке с координатой z над гидростатическим давлением P_0, определяемым формулой

$$P_0(z)=-\frac{K_0(z)}{\mathrm{We}}\,,\tag{7}$$

K_0 – кривизна свободной границы капли в равновесии. Для определения равновесной формы следует найти минимум полной энергии капли

$$E=\int_V\rho\mathbf{g}z\,dV+\int_{S_{\text{жг}}}\sigma_{\text{жг}}\,dS+\int_{S_{\text{жт}}}\left(\sigma_{\text{жт}}-\sigma_{\text{гт}}\right)dS\,,$$

здесь $S_{\text{жг}}$ – площадь поверхности жидкость–газ, $S_{\text{жт}}$ – площадь поверхности взаимодействия жидкость–подложка. Для этого капля разбивается на тонкие слои в форме усеченного кругового конуса с толщиной $h=H/(m-1)$, m – число разбиений вдоль оси z. Подлежат определению радиусы оснований слоёв. Обозначив через r_i радиус капли на высоте $i\cdot h$, получаем следующее выражение для безразмерной полной энергии капли:

$$E=\frac{\left(\sigma_{\text{жт}}-\sigma_{\text{гт}}\right)\pi}{u_0^2R\rho}\left(r_1^2+r_m^2\right)+\sum_{i=1}^{m-1}\frac{\pi}{\mathrm{We}}\left(r_i+r_{i+1}\right)\sqrt{h^2+\left(r_{i+1}-r_i\right)^2}+\sum_{i=1}^{m-1}\frac{1}{\mathrm{Fr}}\frac{ih^2\pi}{3}\left(r_i^2+r_ir_{i+1}+r_{i+1}^2\right).\tag{8}$$

Минимум (8) следует искать при условии постоянства объема капли, равного

$$V = \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\pi h}{3}\left(r_i^2 + r_i r_{i+1} + r_{i+1}^2\right). \qquad (9)$$

Поиск минимума выражения (8) проводился методом Розенброка [4], при этом радиусы r_i, i=1, m–1 являются независимыми переменными, а r_m определяется из (9).

После определения значений r_i, i = 1, m, соответствующих минимуму полной энергии, равновесные давления вычисляются по формуле (7), в которой безразмерная кривизна вычисляется как $K_0(z) = -R_{1i}^{-1} + R_{2i}^{-1}$, где R_{1i} и R_{2i} – радиусы кривизны нормальных сечений равновесной капли при $z = i \cdot h$. R_{1i} есть взятый с соответствующим знаком радиус окружности, лежащей в плоскости осевого сечения и проходящей через точки с координатами $(r_{i-1}, (i-1)h)$, (r_i, ih) и $(r_{i+1}, (i+1)h)$, R_{2i} – радиус окружности, лежащей в плоскости, содержащей нормаль **n** и перпендикулярной осевому сечению, вычисляется как $R_{2i} = -r_i / n_r$.

Численный метод решения. Для решения системы (1)–(6) использовалась разностная схема, построенная на основе равномерной пространственной сетки. Пространственные производные аппроксимировались центральными разностями, временная производная вычислялась вперед по времени. Сетка перестраивалась на каждом временном шаге в соответствии с изменениями в форме капли. Системы линеаризированных разностных уравнений решались методом исключения Гаусса.

В численном решении задачи можно выделить три этапа. На первом проводится решение уравнения (3) с граничными условиями (6) для определения поля давления при фиксированных скоростях и форме капли. На втором этапе проводится решение уравнений (1), (2) при граничных условиях (4)–(6) и находится поле скоростей при фиксированных давлении и форме. На третьем этапе из уравнений

$$r_i^{t+\Delta t} = r_i^t + V_r\big|_{\Gamma_{\text{жг}}} \cdot \Delta t, \quad z_i^{t+\Delta t}\Big|_{\Gamma_{\text{жг}}} = z_i^t\Big|_{\Gamma_{\text{жг}}} + V_z\big|_{\Gamma_{\text{жг}}} \cdot \Delta t, \; i = 2, m\text{–}1$$

определяется новая форма капли. Радиусы пятен смачивания определяются из закона сохранения массы в прилегающих к твердым плоскостям нижнем и верхнем слоях. При построении новой формы капли участки между точками свободной границы $\left(r_i^{t+\Delta t},\ z_i^{t+\Delta t}\right)\Big|_{\Gamma_{\text{жг}}}$ аппроксимируются отрезками. Таким образом, использованный численный метод является одним из методов расщепления по физическим процессам [5].

Обсуждение результатов. Основная цель работы состоит в выяснении того, каким образом жидкая капля вязкой жидкости достигает состояния равновесия, будучи выведена из него каким-либо образом. Так как в разностной формулировке форма капли определяется радиусами своих поперечных сечений, то для моделирования ее начального неравновесного состояния достаточно задать произвольные радиусы r_i, совместимые с безразмерным объемом капли, равным $V = 4\pi/3$. В работе в качестве неравновесных r_i использовались равновесные значения, найденные в предварительном расчете для капли жидкости с поверхностным натяжением, немного отличающимся от исходного (но имеющей тот же безразмерный объем). Если расстояние между плоскостями, сжимающими каплю, не меняется, то вычисление равновесной формы, необходимое для определения $P_0(z)$, достаточно провести лишь один раз в начале расчета.

На рис. 1 изображено поле скоростей в объеме капли. Мгновенная картина распределения скоростей показывает, что наибольшие значения скорости наблюдаются вблизи свободной границы, центральная часть капли движется менее интенсивно. Движение поверхности капли вызывает изменение радиусов r_i во времени. На рис. 2 изображены рассчитанные временные зависимости радиусов капли r_i. Расчет проведен для капли воды, R = 1,5 мм, $\nu = 10^{-6}$ м^2/с, H = 1,2, $\sigma_{\text{жг}} = 0{,}073$ Н/м, $\sigma_{\text{жг}} - \sigma_{\text{гт}} = 0$ Н/м. Как видно из рисунка, релаксация радиусов представляет собой затухающие колебания. Подгонкой кривых $r_i(t)$ под затухающую синусоиду вида



Рис. 1. Картина поля скоростей в осевом сечении капли

$$r_i(t) = A \cdot e^{-p \cdot t} \sin\left(f \cdot t + \psi\right) + C \qquad (10)$$

можно получить частоту и коэффициент затухания колебаний. Подгонка проводилась методом наименьших квадратов с минимизацией методом Розенброка [4]. Параметры функции (10) оценивались локально – в пределах каждого периода колебаний.

Как выяснилось, определенные таким способом частота и коэффициент затухания изменяются в процессе колебаний и значения их стабилизируются лишь после завершения переходных процессов. Длительность этого переходного интервала зависит от вязкости жидкости. Характерные зависимости локально определенного коэффициента затухания от времени изображены на рис. 3. Как видно из рисунка, весь процесс эволюции $p(t)$ можно условно разделить на 3 этапа. На первом происходит установление колебаний и коэффициент затухания не постоянен, затем наблюдается интервал его стационарного поведения, на 3-м этапе амплитуда колебаний мала и коэффициент затухания снова зависит от времени, возможно, из-за погрешности подгонки (10). На рисунке эти этапы разделены вертикальными отрезками. Интерес представляет величина p на втором этапе. Длительность этого этапа зависит от вязкости жидкости и тем больше, чем меньше вязкость. Так, для колебаний капли воды, изображенных на рис. 2, длительность второго этапа составляет 40 мс (4 колебания) (рис. 3), при этом частота колебаний составляет $f = 584$ с$^{-1}$, а коэффициент затухания $p = 46$ с$^{-1}$. Для жидкости с вязкостью $\nu = 2 \cdot 10^{-6}$ м^2/с (жидкое машинное масло) продолжительность этапа колебаний с постоянным коэффициентом затухания составляет 28 мс (см. рис.3). При релаксации капли жидкости, вязкость которой превышает $\nu = 3 \cdot 10^{-6}$ м^2/с, 2-й этап имеет очень малую длительность или отсутствует, так что такие колебания не могут характеризоваться однозначно определенным коэффициентом затухания.

Относящийся ко второму этапу колебаний коэффициент затухания может быть использован для определения вязкости жидкости. График его зависимости от коэффициента вязкости изобра-

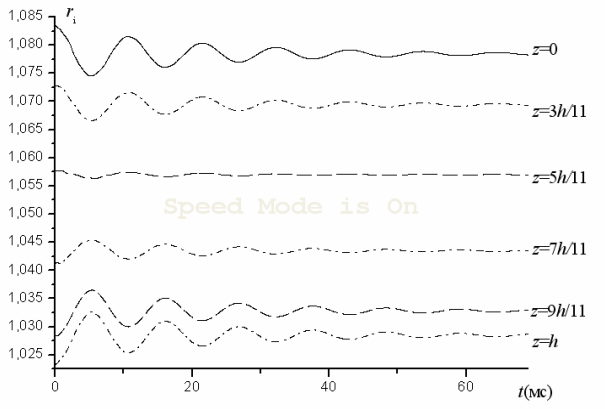


Рис. 2. Временная эволюция радиусов поперечных сечений капли воды при релаксации в равновесное состояние

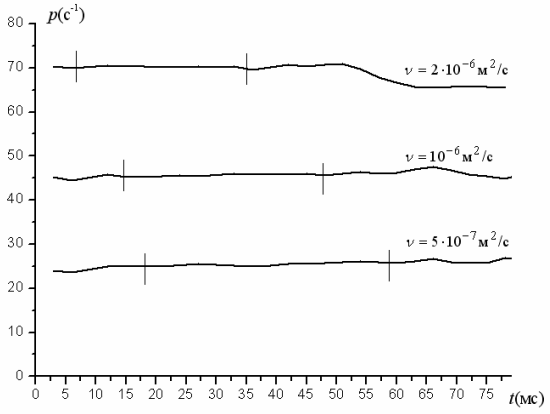


Рис. 3. Зависимость коэффициента затухания свободных колебаний капли от времени

жен на рис. 4. Расчеты были выполнены для модельных жидкостей с плотностью $\rho = 1000$ кг/м^3, $\sigma_{жг} = 0{,}073$ Н/м, $\sigma_{жг} - \sigma_{гт} = 0{,}005$ Н/м, параметры капли были равны R = 1,5 мм, H = 1,2. Коэффициент кинематической вязкости изменялся в расчетах в пределах $0{,}5 \cdot 10^{-6}$ м^2/с … $3{,}0 \cdot 10^{-6}$ м^2/с. Как видно из рисунка, с увеличением вязкости происходит увеличение коэффициента затухания, расчетные точки графика $p(\nu)$ хорошо подгоняются зависимостью $p = 63{,}664(\nu - 0{,}255)^n$ (на рис. 4 изображена пунктирной кривой), где n с точностью до 1% оказывается равным 1/2. Наибольшая чувствительность метода, соответствующая наибольшему углу наклона этой кривой, наблюдается при малых вязкостях. Коэффициенты вязкости, превышающие $3 \cdot 10^{-6}$ м^2/с в подобном опыте определить невозможно вследствие трудностей в определении коэффициента затухания, о которых говорилось выше, однако при увеличении радиуса равновеликой капли кривые $p(\nu)$ могут быть продолжены и для бóльших значений вязкости.

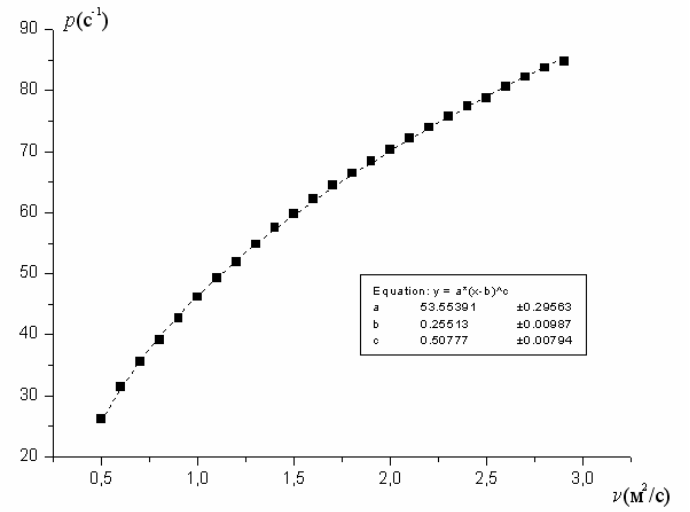


Рис. 4. Зависимость коэффициента затухания свободных колебаний капли от коэффициента вязкости жидкости

Таким образом, полученные в работе результаты могут быть положены в основу новой методики измерения вязкости жидкостей - по наблюдениям за временной релаксацией зажатой капли, выведенной из положения равновесия.

Литература

1. Hisao Azuma and Shoichi Yoshihara Three-dimensional large-amplitude drop oscillations: experiments and theoretical analysis // J. Fluid Mech. – 1999. – V. 393. – P. 309–332.

2. Cummings D. L., Blackburn D.A. Oscillation of magnetically levitated aspherical droplets // J. Fluid Mech. – 1991. – V. 224. – P. 1–8.

3. Hervieu E., Coutris N. and Boichon C. Oscillations of a drop in aerodynamic levitation // Nuclear Engineering and Design. – 2001. – V. 204. – № 1–3. – P. 167–175.

4. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. – М.: Мир, 1975. – 534 с.

5. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред. – М.: Наука, 1984. – 519 с.

Поступила в редакцию 3 октября 2006 г.

УДК 662.64

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЧАСТИЦ В ВЕРТИКАЛЬНОМ ВИХРЕВОМ ПОТОКЕ ГАЗА

Г.Ф. Кузнецов

Работа посвящена исследованию распределения твердых частиц, движущихся в закрученном газовом потоке.

Для оценки распределения частиц в закрученном потоке цилиндрической вертикальной камеры воспользуемся уравнением Больцмана [1–3]

$$N(r,v,t) = N_0(v) - \tau(v)\frac{dN}{dt}v\nabla T + \frac{e}{m}\tau(v)\varepsilon\frac{\partial N}{\partial v} + \frac{e}{mc}\tau(v)[v\times H]\frac{\partial N}{\partial v}, \quad (1)$$

в котором для нашей задачи второе и третье слагаемые правой части можно считать равными нулю, поскольку задача рассматривается в изотермических условиях без учета электрических сил. Тогда уравнение (1) можно записать следующим образом

$$N(r,v,t) = N_0 + \tau\omega^2 r\frac{dN(r,t,v_\varphi)}{dv_\varphi}, \quad (2)$$

где N_0 – стационарная концентрация, обусловленная постоянным потоком частиц со скоростью v_z, $N(r,t,v_\varphi)$ –локальная концентрация, угловая скорость, τ – время релаксации, т.е. время установления стационарного потока после прекращения внешнего возмущения.

После разделения переменных и подстановки выражения для $dv_\varphi = \frac{\mu}{3\eta}(R-2r)dr$ [4], получим

$$\frac{-\mu}{3\tau\omega^2\eta}(R/r-2)dr = \frac{dN(r,t,v_\varphi)}{N(r,t,v_\varphi)-N_0}, \quad (3)$$

и после интегрирования запишем распределение концентрации частиц

$$\frac{N(r,t,v_\varphi)-N_0}{N_0} = e^{\frac{-\mu(-R\ln\frac{r}{R}+2r)}{3\tau\omega^2\eta}}, \quad (4)$$

где в качестве произвольной постоянной была выбрана величина $\ln R$.

Более удобно полученный результат можно записать в виде

$$\frac{N(r,t,v_\varphi)-N_0}{N_0} = \exp\left[-\frac{\mu(-R\ln\frac{r}{R}+2r)}{3\tau\omega^2\eta}\right]. \quad (5)$$

Анализ полученного выражения показывает, что при $\mu \neq 0$ $N(r,t,v_\varphi) > N_0$. Это означает, что в периферийной области концентрация частиц всегда выше, чем в приосевой, что совпадает с результатами реальных исследований. При условии, что $\eta = 0, \omega = 0, r = 0$, либо равна нулю одна из этих величин, второе слагаемое выражения (5) обращается в нуль. Физически понятно, что при нулевой вязкости частицы не изменяют своего первоначального распределения. Если скорость вращения отсутствует $(\omega = 0)$, осевая скорость распределена вдоль радиуса равномерно и, следовательно, также первоначальное распределение в этом случае измениться не может. Очевидно, что на оси $(r = 0)$ содержание частиц не может быть большим первоначального.

При увеличении r величина концентрации увеличивается, достигая максимальной вблизи $r = R/2$, там, где наибольшее значение тангенциальной скорости. Отметим, что полученное распределение скоростей и концентраций частиц быстрее реализуется для мелких фракций, так как

для более крупных фракций требуется более продолжительное время для приобретения скорости потока газа и частиц.

Оценка характерного времени снижения до нуля тангенциальной скорости – времени релаксации – дает следующий результат. После прекращения действия давления, на поток действуют только силы, связанные с вязкостью (силы тяжести не учитываются)

$$m\frac{dv}{dt} = -6\pi\eta v r_0, \tag{6}$$

где r_0 – радиус частицы.

После разделения переменных и интегрирования находим

$$\ln v = v_e \exp(-t/\tau), \tag{7}$$

где $\tau = \dfrac{m}{6\pi\eta r_0}$ – время релаксации.

Для частиц размером ~3 мм это время составляет 1–3 секунды, что является достаточно близким к реальным условиям. Время контакта частиц, очевидно, будет такого же порядка.

Проделанный анализ неплохо объясняет сущность процессов при относительно небольших тангенциальных скоростях (диаметр камеры ~1,5 м, скорость ~30 м/с), так как в соотношении (2) принято, что $\omega \approx \text{const}$. Как известно, при больших скоростях центральные и периферийные слои вращаются по различным законам [4]. Для того, чтобы учесть эту особенность, воспользуемся уравнением Больцмана в следующем виде:

$$N = N_0 - \tau \frac{v_\varphi^2}{r}\frac{dN}{dv_\varphi}. \tag{8}$$

Из предыдущих выкладок следует, что

$$v_\varphi = \frac{\mu}{3\eta}(Rr - r^2); \qquad \mu = \frac{\Delta P}{2\pi R};$$

$$dv_\varphi = \frac{\mu}{3\eta}(R - 2r)dr; \qquad v_\varphi^2 = \frac{\mu^2}{9\eta^2}(R^2r^2 - 2Rr^3 + r^4). \tag{9}$$

Подставляя (9) в (8), получим

$$\frac{dN}{N - N_0} = \frac{3\eta r(R - 2r)dr}{\tau\mu(R^2r^2 - 2Rr^3 + r^4)}. \tag{10}$$

Введем безразмерную координату $\xi = r/R$

$$\frac{dN}{N - N_0} = \frac{3\eta}{\tau\mu R}\left[\frac{(1 - 2\xi)d\xi}{\xi(1 - \xi)^2}\right]. \tag{11}$$

Правую часть запишем в виде двух слагаемых

$$\frac{dN}{N - N_0} = -\frac{3\eta}{\tau\mu R}\left[\frac{d\xi}{\xi(1 - \xi)} - \frac{d\xi}{(1 - \xi)^2}\right]. \tag{12}$$

Тогда после интегрирования получим

$$-\frac{3\eta}{\tau\mu R}\left[\ln\frac{\xi}{1 - \xi} + \ln\left(e^{-\frac{1}{1-\xi}}\right)\right] = \ln\frac{N - N_0}{N_0}. \tag{13}$$

Потенцируя, имеем

$$\left(\frac{\xi}{1 - \xi}\cdot e^{-\frac{1}{1-\xi}}\right)^{-\frac{3\eta}{\tau\mu R}} = \frac{N - N_0}{N_0}. \tag{14}$$

Анализ последнего выражения позволяет сделать некоторые выводы. Концентрация частиц не отличается от начальной в центре камеры на максимальном радиусе, что соответствует известным представлениям закономерностей вихревых течений. Максимальное значение концентраций находится на расстояниях от оси, больших половины радиуса. В рассмотренной модели

не учитывалась сила трения со стороны стенки, действующая на частицы. Любое торможение частиц на стенке камеры приводит к снижению их скорости и, следовательно, повышенной вероятности шлакования.

Распределение частиц по размерам и, следовательно, массам также влияет на их концентрацию в камере. Анализ уравнения (8) показывает – времени пребывания наиболее крупных частиц в модельной камере достаточно, чтобы произошло выравнивание скоростей всех частиц. Это будет означать, что на стенке камеры окажутся, в первую очередь, крупные частицы, что и наблюдается в реальности.

Для дальнейшего анализа запишем уравнение (14) в виде

$$\frac{N-N_0}{N_0}=\left(\frac{\xi}{1-\xi}\cdot e^{-\frac{1}{1-\xi}}\right)^a, \quad \text{где } a=-\frac{3\eta}{\tau\mu R}. \tag{15}$$

Правая часть уравнения обращается в нуль при $\xi=0$ и $\xi=1$, поэтому между этими точками должен существовать хотя бы один экстремум.

Найдем точку экстремума, приравнивая нулю производную правой части

$$a\left[\frac{1}{(1-\xi)^2}e^{-\frac{1}{1-\xi}}+\frac{\xi}{1-\xi}\frac{-1}{(1-\xi)^2}e^{-\frac{1}{1-\xi}}\right]=0, \tag{16}$$

или

$$a\frac{1}{(1-\xi)^2}e^{-\frac{1}{1-\xi}}\left(\frac{1-2\xi}{1-\xi}\right)=0. \tag{17}$$

Откуда видно, что экстремум будет иметь место в точке $\xi=1/2$. Для определения будет ли в этой точке максимум или минимум, определим знак второй производной в этой точке. Обозначим выражение перед последней скобкой.

$$a\frac{1}{(1-\xi)^2}e^{-\frac{1}{1-\xi}}=A, \tag{18}$$

так это фиксированное число, не влияющее на знак второй производной, которая

$$A\frac{-2(1-\xi)-(1-2\xi)}{(1-\xi)^2}\le 0, \tag{19}$$

и, следовательно, при $\xi=1/2$ существует максимум распределения частиц. Этот результат соответствует анализу, проделанному при допущении $\omega=\text{const}$, свидетельство того, что для данного анализа такое допущение действительно можно принять.

Полученные результаты можно использовать для проектирования различных тепломассообменных аппаратов, использующих вихревые потоки.

Литература

1. Ферцигер Дж., Комер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. – М.: Мир, 1976. – 554 с.

2. Прохоров А.М. Физический энциклопедический словарь. – М.: Советская энциклопедия, 1983. – 928 с.

3. Пайерлс Р.Е. Квантовая теория твердых тел. – М.: Мир, 1956. – 340 с.

4. Кузнецов Г.Ф. Физико-химические процессы и технология газификации при сжигании твердых топлив. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2002. – 174 с.

Поступила в редакцию 24 октября 2006 г.

УДК 541.1

ВОЗДЕЙСТВИЕ НАНОСЕКУНДНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА КИНЕТИКУ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА γ-Al(OH)$_3$ $\rightarrow$ γ-AlOOH В ГИДРОТЕРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

В.И. Лопушан, В.В. Крымский, Д.Г. Клещев

Выявлен эффект инициирующего влияния наносекундных электромагнитных импульсов на кинетику фазового перехода гиббсит $\rightarrow$ бемит в гидротермальных условиях.

Введение. Мелкодисперсные кристаллические системы (МДС) с размером частиц от нескольких единиц до сотен нанометров по сравнению с аналогичными монолитными объектами обладают специфическими, а в ряде случаев, уникальными физико-химическими свойствами [1–4]. Оптимальные свойства МДС достигаются при определенном сочетании их химического, фазового и гранулометрического, включая морфологию индивидуальных кристаллов, составов, причем, чем уже функция распределения кристаллов по размеру, тем более высокими потребительскими свойствами обладают МДС. В связи с бурным развитием науки и техники в последние десятилетия неуклонно расширяется потребность в МДС. Поэтому разработка новых высокоэффективных экологически чистых технологий их синтеза является одной из актуальных проблем современной науки, в частности, физики и химии.

Типичными представителями таких систем являются мелкодисперсные оксиды p- и 3d-металлов, которые широко используются в качестве неорганических пигментов, катализаторов химических реакций, магнитных порошков, полировальных и ионообменных материалов, компонентов для получения пластмасс, керамики и др. В зависимости от механизма и типа протекающих физико-химических реакций можно выделить следующие группы методов синтеза оксидных МДС: а) термического разложения солей или гидратированных оксидов p- и 3d-металлов; б) окисления металлических или восстановления оксидных порошкообразных объектов; в) твердофазного взаимодействия в системе порошкообразных оксидов; г) конденсации из газовой фазы; д) кристаллизации из растворов, в том числе, осложненной протеканием химических реакций; е) основанные на различного рода превращениях неравновесных гидратированных оксидов металлов при термообработке в растворах: кристаллизация рентгеноаморфных фаз, фазовые превращения (ФП).

Каждый из этих методов имеет присущие ему ограничения в фазовом, химическом и дисперсном составе формирующихся продуктов, которые детально проанализированы в [2]. В частности, из-за активации при высоких температурах процессов коалесценции и спекания твердофазные методы не позволяют получать нанокристаллические объекты. Напротив, при конденсации труднорастворимых оксидов из газовой фазы или растворов образуются нанокристаллические продукты, склонные к коагуляции с образованием плотных агрегатов из-за высокой дефектности их кристаллической структуры.

Показано [2, 5–7], что близкие к монодисперсным, не склонные к коагуляции оксидные МДС формируются при ФП или ХП неравновесных гидратированных оксидов металлов в процессе их термообработки в растворах, в том числе, в гидротермальных условиях. При этом средний размер кристаллов МДС можно варьировать в широком диапазоне (от десятков до тысяч нанометров) путем изменения параметров термообработки, фазового и дисперсного состава неравновесных соединений.

Отметим, что с заметной скоростью превращения неравновесных МДС протекают при относительно высоких температурах и давлениях, что требует разработки автоклавов специальной конструкции и препятствует широкому внедрению новых технологий. Известно [3, 8], что физические методы воздействия инициируют протекание в МДС процессов, приводящих к понижению ее свободной энергии. К таким методам, в частности, относится воздействие на МДС наносекундных электромагнитных импульсов (НЭМИ), которые влияют на протекание различных

процессов в твердых и жидких телах [9–11]. Целью данной работы является выявление воздействия НЭМИ на кинетику ХП гиббсита (γ-Al(OH)$_3$) в бемит (γ-AlOOH), которое согласно [12, 13] в системе Al_2O_3 – H2O макроскопически проявляется при температурах термообработки выше 170 °С.

Методика эксперимента. В качестве исходного образца гиббсита использовали фракцию минус 40 мкм технического гидроксида алюминия, который, по данным химического анализа, содержал (мас. %): $A1_2O_3$ – 64,2±0,5; H_2O – 35,5±0,5; M_2O (M^+ – K^+, Na^+) – 0,4±0,1. Образец предварительно тщательно отмывали от примесей гидроксидов щелочных металлов сначала 0,1 N раствором серной кислоты, а затем дистиллированной водой, высушивали при 110 °С до постоянной массы и измельчали.. По данным РФА, отмытый образец был однофазным – γ-A1(OH)$_3$, а его состав $Al_2O_3 \cdot 3{,}12H_2O$ – близок к стехиометрическому. Фазово-чистый образец бемита (состав $Al_2O_3 \cdot 1{,}05H_2O$) был получен термообработкой гиббсита в парах воды при 300 °С при парциальном давлении паров воды ~6 МПа.

Для исследования кинетики ФП γ-Al(OH)3 → γ-AlOOH образец гиббсита репульпировали в дистиллированной воде при массовом соотношение *Т*:*Ж* = 1:5. В первой серии опытов суспензию в количестве 2,4±0,1 мл загружали в автоклавы с рабочим объемом 3,0 см^3, изготовленные из нержавеющей стали, и герметизировали. Для максимального исключения влияния кинетики нагрева и температурного градиента в печи на ФП гидротермальную обработку суспензий проводили в двух муфельных печах. Вторую печь с широкой изотермической зоной (линейные размеры – 150×150 мм^2; разность температур на границах зоны – не более 0,5 °С) нагревали до заданной температуры T и термостатировали (точность поддержания температуры – ±0,3 °С), а первую – до температуры $T_1 = T + \Delta T$, где $\Delta T \approx 150$ °С. Кассету из 12 автоклавов с термопарами, вставленными в просверленные отверстия в верхних крышках крайних двух автоклавов, сначала помещали в первую печь, в которой их за время τ_1, не превышающее 15 мин, нагревали до температуры T, а затем – во вторую печь. С момента достижения автоклавами температуры T начинали отсчет времени τ термообработки. Температуру T варьировали от 180 до 220 °С, длительность τ – от 0,1 до 30 ч. По окончании термообработки автоклавы вынимали из печи, быстро охлаждали под струей воды и разгерметизировали.

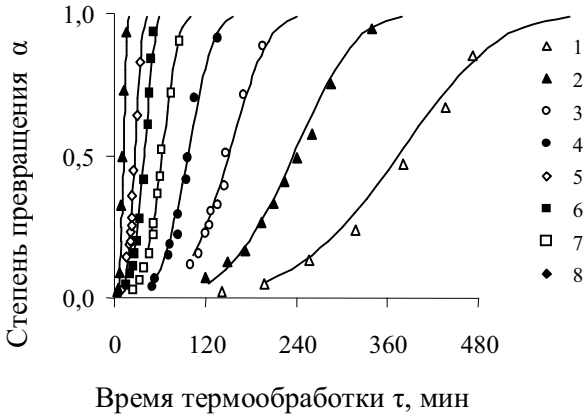
Для изучения влияния НЭМИ на кинетику ХП был изготовлен автоклав объемом 10 см^3 с двумя коаксиальными электродами. Одним из электродов служил корпус автоклава, который был заземлен. На второй центральный электрод, изолированный фторопластовой прокладкой, подавался положительный потенциал от генератора НЭМИ. Во второй серии опытов в автоклав загружали 8 мл суспензии γ-Al(OH)$_3$, его герметизировали, нагревали в первой печи до температуры 200±3 °С, подключали к электродам генератор НЭМИ, помещали в первую печь, термостатированную при 200 °С, и включали генератор импульсов. Термообработку вели в течение 0,5 ч при следующих режимах работы генератора: длительность импульса 0,5 нс; амплитуда импульсов 8 кВ; частота повторения импульсов 1000 Гц. Была проведена серия из трех параллельных опытов.

Фазовый состав образцов контролировали методом порошковой дифрактометрии (рентгеновский аппарат ДРОН-3, фильтрованное $Cu_K\alpha$-излучение). Идентификацию фазового состава исходного и подвергнутых термообработке образцов проводили путем сопоставления экспериментально определенных значений межплоскостных расстояний d_{hkl} и относительных интенсивностей I_{hkl} дифракционных максимумов с табличными данными [14]. Для обнаружения следовых количеств бемита в подвергнутых термообработке образцах проводили сканирование рефлекса (020) бемита по точкам (время счета – 40 с; шаг сканирования по 2Θ – 0,1 град на крыльях и 0,02 град в центральной части дифракционного максимума). Степень химического превращения гиббсита в бемит рассчитывали из данных РФА по стандартной методике [15]. В качестве аналитических использовали рефлексы (002) γ-Al(OH)$_3$ и (020) γ-AlOOH. Химический состав объектов контролировали методами объемного химического анализа и термогравиметрии (дериватограф Paulik-Erdey).

Результаты и обсуждение. Для выявления эффекта влияния НЭМИ на кинетику ФП гиббсита в бемит и определения условий проведения эксперимента в первой серии опытов была изучена кинетика данного ХП в отсутствии внешних воздействий.

Рентгенограммы всех исследованных образцов в зависимости от температуры T и продолжительности τ термообработки содержали только рефлексы гиббсита, или бемита, или смеси вышеуказанных фаз. При T = const с ростом τ, либо при τ = const и увеличении T, проявляется тенденция к уменьшению относительных интенсивностей рефлексов γ-$Al(OH)_3$ и, напротив, возрастание интенсивности рефлексов фазы γ-AlOOH, что свидетельствует о протекании ФП гиббсита в бемит.

Кинетические кривые этого ФП имеют сигмоидный вид (см. рисунок) с ярко выраженным латентным периодом. С увеличением T наблюдалось сокращение длительности латентного периода, а при τ = const – возрастание полноты α ФП, что свидетельствует об его активационном характере.



Кинетические кривые фазового превращения гиббсит → бемит: температуры термообработки 1 – 180, 2 – 185, 3 – 190, 4 – 192, 5 – 195, 6 – 200, 7 – 205, 8 – 210 °С

Согласно [16] кинетические уравнения ФП можно представить в виде

$$g(\alpha^{(T,\tau)}) = k\tau, \qquad (1)$$

где g – интегральная функция кинетического уравнения, аналитический вид которой зависит от механизма реакции; k – константа скорости реакции. Математическую обработку экспериментальных данных проводили согласно рекомендациям [17, 18] с учетом наиболее распространенных кинетических моделей ФП (таблица). Для этого на первом этапе кинетические кривые линеаризовали в координатах $g(\alpha) - \tau$, для каждой из моделей рассчитывали выборочные статистики Фишера $F_{1,k-2}$ (см. таблицу), по значению которых судили о возможности реализации данного механизма ХП.

Аналитический вид интегральных функций g(α) и средние значения выборочных статистик Фишера $F^{cp}_{1,m-2}$ для ФП гиббсит → бемит

Лимитирующая стадия (символ модели)	$g(\alpha)$	$F^{cp}_{1,m-2}$
Одномерная диффузия (D_1)	α^2	56,3
Двумерная диффузия (D_2)	$\alpha + (1-\alpha)\cdot\ln(1-\alpha)$	93,9
Трехмерная диффузия (D_3)	$[1-(1-\alpha)^{1/3}]^2$	35,8
Топохимические реакции на границе раздела фаз (R_n: $1 \le n \le 3$)	$1-(1-\alpha)^{1/n}$	190,4
Зародышеобразование и рост кристаллов (модель Аврами–Ерофеева–Колмагорова – An: $0,5 \le n \le 4,0$)	$[-\ln(1-\alpha)]1/^n$	429,3

Из проведенных расчетов следует (таблица), что во всем исследованном температурном интервале наибольшие значения $F_{1,k-2}$ достигаются для модели Аврами–Ерофеева–Колмагорова (А–Е–К), лимитирующими стадиями которой выступают процессы зародышеобразования и (или) роста кристаллов равновесной фазы.

На втором этапе математической обработки в модель А–Е–К была введена поправка, учитывающая возможную погрешность начала отсчета времени τ_0.

Из линеаризованных по скорректированной модели кинетических кривых для каждой из температур определены значения константы скорости k ФП гиббсита в бемит и параметра реакции n. Зависимости $k = k(T)$ линеаризуются в координатах $\ln k(T) - 1/T$, что свидетельствует об активационном характере протекающих ХП:

$$k(T) = A \cdot \exp[-E/(RT)], \quad (2)$$

где A – некоторая постоянная для данного ФП величина; E – кажущаяся энергия активации ФП; R – универсальная газовая постоянная. Экспериментально определенное значение энергии активации: E = 157±12 кДж/моль. По своей величине E согласуется с суммарным изменением энтальпии (148,49±2,20) при ФП γ-Al(OH)$_3$ → γ-AlOOH и γ-AlOOH→ γ-Al$_2$O$_3$ [19], а также с энергиями активациями ХП при прокалке на воздухе гидроксидов и оксигидроксидов других металлов [2, 18].

С учетом полученных данных по кинетике ФП (см. рисунок) были выбраны следующие режимы термообработки γ-Al(OH)$_3$: $T \approx 200$ °С; τ = 0,5 ч. Для исключения артефакта, связанного с изменением объема и конструкции автоклава, сначала была проведена серия из трех контрольных опытов с выключенным генератором. Сканирование по точкам образцов, подвергнутых термообработке, в области углов дифракции рефлексов бемита на обнаружение его следовых количеств дали отрицательный результат: все три образца были однофазными – γ-Al(OH)$_3$.

На рентгенограммах всех трех образцов, полученных при тех же режимах термообработки с включенным генератором НЭМИ, наряду с рефлексами гиббсита присутствуют отчетливые дифракционные максимумы бемита. Степень превращения α гиббсита в бемит, определенная из данных количественного РФА, в них составила: 29; 20 и 36 мас. %. Таким образом, полученные результаты позволяют сделать вывод об инициирующем влиянии НЭМИ на ФП гиббсита в бемит.

Обратимся к анализу возможных причин данного явления. Как показано в работах [2, 5–8], фазовые и химические превращения неравновесных гидратированных оксидов p- и 3d-элементов при термообработке в растворах осуществляются по механизму «растворение–осаждение» (РОМ), путем растворения кристаллов неравновесной фазы, образования зародышей и роста (через раствор) кристаллов равновесной фазы. При относительно низких температурах термообработки лимитирующей стадией этих превращений выступает процесс растворения кристаллов неравновесной фазы, связанный с разрывом связей между атомами (ионами) поверхностного слоя кристаллов. При воздействии НЭМИ с высокой напряженностью электрического поля (до 10^9 В/м) происходит деформация валентных орбиталей атомов (ионов), что ведет к снижению энергии разрыва связей. Проявлением этого является ускорение процесса фазовых и химических превращений неравновесных фаз, снижение температуры макроскопического проявления превращений.

Выводы. Установлено инициирующее влияние наносекундных электромагнитных импульсов на кинетику химического превращения гиббсита в бемит.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований: гранты 05-08-01356.

Литература

1. Петров Ю.И. Кластеры и малые металлические частицы. – М. Наука, 1986. – 368 с.

2. Клещев Д.Г., Шейнкман А.И., Плетнев Р.Н. Влияние среды на фазовые и химические превращения в дисперсных системах. – Свердловск: УрО АН СССР, 1990. – 248 с.

3. Бучаченко А.И. Химия на рубеже веков: свершения и прогнозы // Успехи химии. – 1999. – Т. 68. – № 2. – С. 99–117.

4. Основы физикохимии веществ в метастабильном состоянии и перспективы их использования / И.А. Тананаев, В.Б. Федоров, И.Д. Морохов, Л.В. Малюкова // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1984. – Т. 20. – № 6. – С. 1026–1033.

5. Клещев Д.Г. Получение нанокристаллических оксидов Ti, Mn, Co, Fe и Zn в водных растворах при термообработке // Неорган. материалы. – 2005. – Т. 41. – № 1. – С. 46–53.

6. Толчев А.В., Багаутдинова Р.Р., Клещев Д.Г. Кристаллохимический аспект фазообразования в системе γ-FeOOH – H$_2$O – NaOH // Журн. прикл. химии. – 2001. – Т. 74. – № 1. – С. 389–394.

7. Агафонов Г.И., Клещев Д.Г., Толчев А.В. Универсальная гидротермальная технология синтеза железоокисных пигментов // Лакокрасочные материалы и их применение. – 1999. – № 7–8. – С. 41–46.

8. Бажал И.Г., Куриленко О.Д. Переконденсация в дисперсных системах. – Киев: Наукова думка, 1975. – 287 с.

9. Взаимопревращения различных элементов / В.Ф. Балакирев, В.В. Крымский, Б.В. Болотов и др.; Под ред. В.Ф. Балакирева. – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 96 с.

10. Наносекундные импульсы и их применение / В.С. Белкин, В.А. Бухарин, В.К. Дубровин и др.; Под ред. В.В. Крымского. – Челябинск: Изд-во Татьяны Лурье, 2001. – 119 с.

11. Крымский В.В., Балакирев В.Ф. Воздействие наносекундных электромагнитных импульсов на свойства веществ // Доклады РАН. – 2002. – Т. 385. – № 6. – С. 786–787.

12. Ervin G., Osborn E.P. $Al_2O_3 – H_2O$ system // J. Geol. – 1951. – V. 59. – № 2. – P. 381–394.

13. Химическая энциклопедия / Под ред. Кнунянц И.Л. и др. – Т. 1. М.: Сов. энциклопедия, 1988. – 623 с.

14. Powder Diffraction File: Search Manual Fink Method Inorganic. Swarthmore, 1978.

15. Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. – М.–Л.: ГИТТЛ, 1952. – 588 с.

16. Третьяков Ю.Д., Лепис Х. Химия и технология твердофазных материалов. – М.: Издательство МГУ, 1985. – 251 с.

17. Koga N, Haruhiko Tanaka A physico-geometric approach to the kinetics of solid-state reactions as exemplified by the thermal dehydration and decomposition of inorganic solids // Thermochimica Acta. – 2002. – V. 388. – № 1. – P. 41–61.

18. Koga N., Takemoto S., Okado S., Tanaka H. A kinetic study the thermal decomposition of iron(III) oxides. Part I. α-FeOOH in banded iron formations // Thermochimica Acta. – 1995. – V. 254. – № 2. – P. 193–207.

19. Wenming Z., Nianya C., Qiyuan C. Thermodinamics of thermal decomposition of aluminium hydroxide // Trans. Noneferrous Metals Soc. China. – 1997. – V. 7. – № 3. – P. 132–139.

Поступила в редакцию 15 сентября 2006 г.

УДК 548.51 538.953

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АСПЕКТ ВЫДЕЛЕНИЯ РАСТВОРЕННОГО ВОДОРОДА В МИКРОПОРАХ МЕТАЛЛА

Д.А. Мирзаев, А.А. Мирзоев

В работе предложена простая и наглядная теория заполнения водородом, растворенным в образце, пор и микротрещин в объеме металла на основе уравнения состояния газа и закона Сивертса. Выведенное аналитическое выражение для давления водорода в поре иллюстрируется численными расчетами для различных значений температур и содержаний водорода в железе. Полученные результаты применены для обсуждения проблемы зарождения флокенов в сталях.

Введение

К настоящему моменту можно считать доказанным [1, 2], что флокены – распространенные дефекты массивных стальных поковок, представляют собой внутренние микрополости (поры), заполненные водородом. Наполнение поры водородом происходит путем атомной диффузии растворенного газа из объема металла. По мере натекания водорода давление газа в поре возрастает, пока не достигнет критического значения $P_{H_2}^{(c)}$, при котором интенсивность механических напряжений на границе трещины достигает критического уровня разрушения K_c:

$$K_c = \alpha P_{H_2}^{(c)} \sqrt{L}\,, \tag{1}$$

где величина критического уровня K_c определяется вязкостью разрушения и, вероятно, сегрегацией атомов водорода в вершине трещины [3]. Выполнение условия $P > P_{H_2}^{(c)}$ приводит к росту зародыша трещины с характерной длиной L. Рост флокена приводит к падению давления и остановке развития трещины. Требуется некоторое время для дальнейшего повышения давления из-за «натекания» газа и начала следующего «рывка» вершины трещины.

Несмотря на то, что приведенная выше общая физическая картина развития флокенов является признанной, вопросы количественного описания и прогнозирования явления все еще остаются дискуссионными. Известно, что флокены зарождаются в ходе охлаждения поковок при температуре ниже 150 °С [1]. Вопрос о том, какие давления возникают при этом внутри микрополостей, которые, безусловно, существуют в поковках, остается открытым и наиболее спорным. Равновесное давление молекулярного водорода в порах регулируется законами физической химии: законом Сивертса растворения водорода в железе или стали

$$C_H\left[\frac{\text{см}^3}{100\,\Gamma}\right] = \Lambda \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot \sqrt{P_{H_2}\left[\text{атм}\right]}\,, \tag{2}$$

и уравнением состояния газа H_2 в полости

$$P_{H_2} \cdot V = \frac{m_{H_2}}{\mu_{H_2}} RT\,. \tag{3}$$

Концентрация водорода в (2) выражена с помощью практической единицы измерения [см^3/100 г], которая показывает количество газообразного H_2 в кубических сантиметрах выделяемого 100 г металла при нормальных условиях (0 °С, 1 атм). Измерив экспериментально величину C_H, можно определить массу водорода в образце объемом V_0 (см^3) из выражения:

$$m_{H_2} = \beta \cdot V_0 \cdot C_H\,, \tag{4}$$

где

$$\beta = \frac{\mu_{H_2} \cdot \rho_0}{22{,}4 \cdot 10^3} = 7{,}018 \cdot 10^{-4}\,, \tag{5}$$

ρ_0 = 7,86 г/см^3 – плотность стали, $\mu_{H_2} = 2$ г/моль – молярная масса водорода. Тогда отношение масс водорода в образце и самого образца, которое можно найти как

$$\frac{m_{H_2}}{V_0 \cdot \rho_0} = \frac{\beta}{\rho_0} \cdot C_H = 8{,}929 \cdot 10^{-5} \cdot C_H ,$$

представляет массовую долю водорода в растворе. Удобной единицей измерения в последнем случае является 1 propromille (1 весовая часть на миллион). Очевидно, что 1 (см^3 / 100 г) = = 0,893 ppm = 0,893·10^{-4} мас.%. Для раствора водорода в α-железе по данным [5]:

$$\Lambda = 47{,}534 \frac{1}{\text{атм}^{1/2}} \cdot \frac{\text{см}^3}{100\ \text{г}},$$

а энергия активации растворения E = 27,180 кДж/моль.

Формула (3) определяет концентрацию водорода в железе, если оно при некоторой температуре Т находится в равновесии с атмосферой молекулярного водорода, характеризующейся давлением P_{H_2}. Но закон Сивертса применим и для обратного процесса выделения водорода из металла. Допустим, что при высокой температуре образец имеет равновесную концентрацию водорода C_H^0. При относительно быстром охлаждении образца вне водородной атмосферы некоторое количество водорода, выйдя путем диффузии на поверхность, испарится, но основная часть газа в глубине образца сохранится в неизменной концентрации. Предположим, что здесь возникла бесконечно малая по размеру пора. Тогда давление водорода в ней будет определяться условием равновесия с растворенным в стали газом:

$$P_{H_2} = \frac{1}{\Lambda^2} \exp\left(\frac{2E}{RT}\right) \cdot \left(\tilde{N}_H^0\right)^2, \text{ àòì} \quad . \tag{6}$$

Если, например, C_H^0 = 5 (см^3/100 г), то при 1000, 500, 300 и 100 К равновесное давление окажется равным соответственно 7,65; 5300; 3,24·10^7 и 2,8·10^{26} атм или 0,77; 535,3; 3,3·10^6 и 2,85·10^{25} МПа. Согласно [7] окружное растягивающее напряжение у поверхности сферической полости составляет P_{H_2}/2. Таким образом, уже в районе 450 К у поверхности будет достигнуто напряжение, превышающее $\sigma_B \approx 1000$ МПа, и начнется разрушение. Для комнатной температуры возникающие вокруг поры напряжения примерно в 15 000 превышают $\sigma_{\hat{A}}$. Однако, нам необходимо учесть, что реальные образцы содержат достаточно большое количество пор, обладающих конечным суммарным объемом V_i. Тогда может оказаться, что найденные выше значения давления не будут достигаться в силу ограниченности количества газа, заключенного в образце. Поэтому проведем оценку возникающего давления, предположив, что доля образца, занятая порами, равна $f = V_n / V$, и весь водород, запасенный в металле, полностью выделится в них:

$$P_{H_2} = \frac{m_{H_2}}{\mu_{H_2} \cdot V_n} RT = \frac{2{,}88 \cdot 10^{-2}}{f} C_H^0 \cdot T \text{ (атм)} . \tag{7}$$

При выводе (7) мы неявно предполагали, что концентрация водорода в образце уменьшается однородно, поэтому давление в порах разного размера возрастает одинаково. В частности, если f = 0,001, т.е. объем пор составляет 0,1 % от объема образца, то реально достижимое давление составит $P_{H_2} = 28{,}8 \cdot C_H^0 \cdot T$ (атм). При T = 300 К и C_H^0 = 5 (см^3/100 г) получаем давление $P_{H_2} = 43200$ атм. Это значительное давление, но существенно меньшее, чем определенное по уравнению Сивертса (6)! Таким образом, необходима теория, позволяющая учесть совместное действие обоих факторов. К выводу уравнений такого рода мы и перейдем.

Вывод основных уравнений

После проведенных оценок, очевидно, что истинное давление можно определить лишь совместным решением уравнений (6) и (7) с учетом закона постоянства массы водорода в образце. С этой целью рассчитаем:

а) количество водорода в порах $m_{\mathrm{H}}^{(1)}$

$$m_{\mathrm{H}}^{(1)} = \frac{2P_{\mathrm{H}_2} \cdot V_0 f}{RT}; \tag{8а}$$

б) количество растворенного в стали водорода $m_{\mathrm{H}}^{(2)}$:

$$m_{\mathrm{H}}^{(2)} = \beta V_0 C_{\mathrm{H}}, \tag{8б}$$

полагая, что выделившийся в порах и растворенный в металле водород находятся в равновесии при неизменной сумме

$$m_{\mathrm{H}}^{(1)} + m_{\mathrm{H}}^{(2)} = m_{\mathrm{H}} = \beta V_0 C_{\mathrm{H}}^0, \tag{8в}$$

где C_{H}^0 – концентрация растворенного водорода в стали, не содержащей поры, приближенно совпадающая с исходной высокотемпературной концентрацией. После подстановки (8а) и (8б) в (8в) получаем:

$$C_{\mathrm{H}}^0 = C_{\mathrm{H}} + P_{\mathrm{H}_2} \cdot \frac{2f}{RT\beta} \quad , \tag{9}$$

и далее, с учетом (2), приходим к окончательному выражению

$$P_{\mathrm{H}_2} + \frac{RT\beta\Lambda_1}{2f}\sqrt{P_{\mathrm{H}_2}} - \frac{RT\beta}{2f}C_{\mathrm{H}}^0 = 0, \tag{10}$$

которое представляет собой квадратное уравнение относительно $\sqrt{P_{\mathrm{H}_2}}$. Через Λ_1 обозначен коэффициент растворимости $\Lambda_1 = \Lambda e^{-E/RT}$, имеющий смысл концентрации водорода в стали при давлении водорода в 1 атмосферу. Решение уравнения (10) имеет вид

$$\sqrt{P_{\mathrm{H}_2}} = \frac{RT\beta\Lambda_1}{4f}\left[\sqrt{\frac{4f \cdot C_{\mathrm{H}}^0}{RT\beta\Lambda_1^2} + 1} - 1\right]. \tag{11}$$

В области низких температур при $T \to 0$ параметр Λ_1 также стремится к нулю. Поэтому первое слагаемое под знаком радикала неограниченно возрастает, по сравнению с ним можно пренебречь единицей, тогда

$$\sqrt{P_{\mathrm{H}_2}} \simeq \frac{(RT\beta)^{1/2}}{\sqrt{2} \cdot f^{1/2}}(C_{\mathrm{H}}^0)^{1/2} \tag{12а}$$

и, следовательно,

$$P_{\mathrm{H}_2} = \frac{RT\beta}{2f}C_{\mathrm{H}}^0, \tag{12б}$$

что совпадает с (7). Как и следовало ожидать, при низких температурах реализуется ситуация, когда весь водород концентрируется в порах. Наоборот, в другом предельном случае при $T \to \infty$ первое слагаемое становится малым параметром. Разлагая подкоренное выражение в ряд по этому параметру и ограничиваясь первым членом разложения, находим соотношение, аналогичное (6):

$$\sqrt{P_{\mathrm{H}_2}} = \frac{C_{\mathrm{H}}^0}{\Lambda_1}. \tag{13}$$

Таким образом, при высоких температурах давление в порах определяет концентрация газа, растворенного в металле.

Представленная нами теория является достаточно простой и очевидной. Несмотря на то, что она не приводится в современной литературе, трудно представить, что эти расчеты до сих пор не были сделаны. Например, В.Я. Дубовой в своей книге [1] ссылается на статью Хонда и Хироне [8], опубликованную в 1936 г. Ознакомится с содержанием этой статьи сейчас затруднительно, но, судя по графику температурной зависимости давления водорода в порах, приведенному в [1], подход авторов к проблеме был аналогичен нашему. Однако, данные о растворимости водорода в α-железе в те годы были недостаточно точны, так что авторы получили максимум давления в порах в районе 250 °С. В.Я.Дубовой отвергал теорию образования флокенов Хонда и Хироне по той причине, что он наблюдал для многих сталей образование флокенов ниже 100 °С. Похожие расчеты были сде-

ланы в ряде работ, обзор которых приведен в [6, 8]. Однако их цель заключалась в выяснении влияния пористости на коэффициент диффузии, а оценки давления не проводились.

Результаты численных расчетов

Для иллюстрации результатов приведенной теории были проведены численные расчеты на основе формулы (11) для трех значений концентрации водорода 2,5; 5 и 7,5 ($см^3$/ 100 г) и трех значений f от $f = 10^{-2}$ до $f = 10^{-3}$. Результаты расчета приведены на рис. 1 а, б, в. Каждый график, если двигаться вдоль оси температур, имеет восходящий участок, заканчивающийся максимумом, и последующий нисходящий участок в области высоких температур.

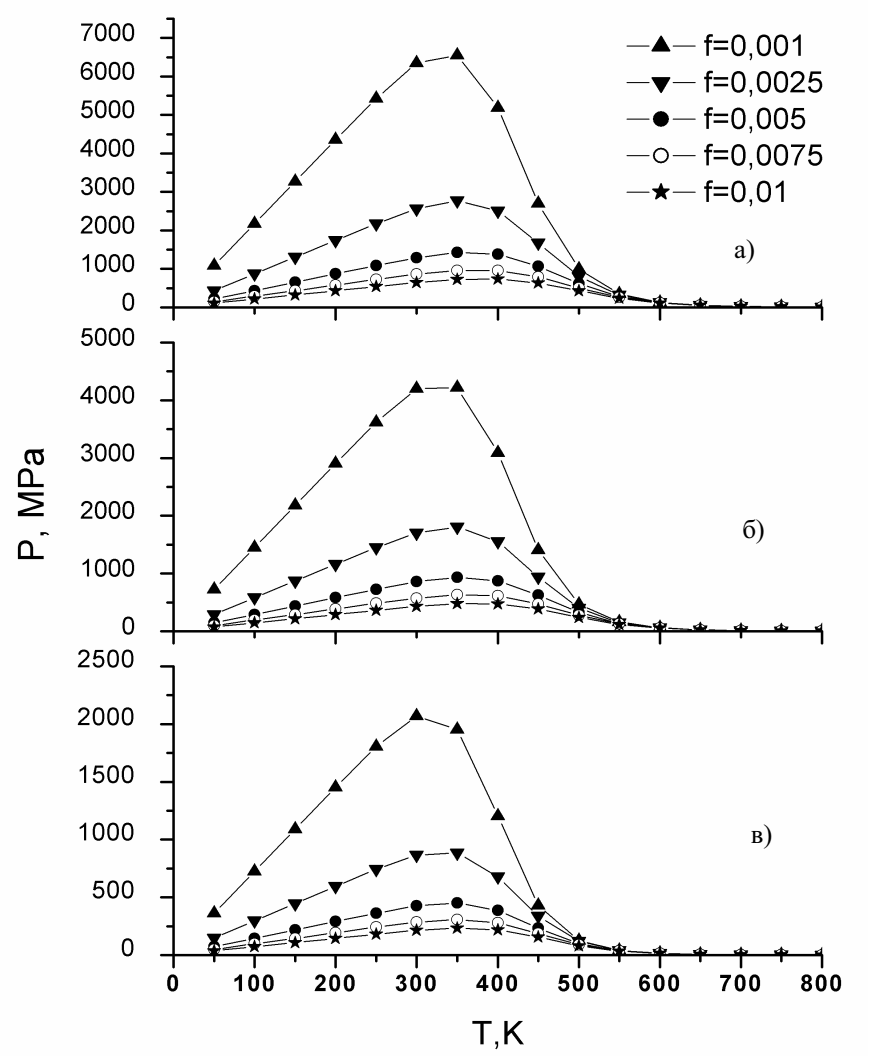


Рис. 1. Влияние температуры и объемной доли пор *f* на давление водорода для различного содержания водорода в железе: а – 2,5; б – 5; в – 7,5 $см^3$/г

Восходящий участок обусловлен действием уравнения состояния газа (7), согласно которому давление пропорционально температуре; нисходящий участок – действием закона Сивертса, в соответствии с которым растворимость газа в металле растет при увеличении температуры, а выделение газа в поры падает. Тенденции изменения давления, определяемые указанными законами, взаимно противоположны, поэтому всегда возникает довольно резкий максимум в районе 300–400 К. Зависимость температуры $T_м$, соответствующей максимальному давлению, от концентрации водорода и доли пустот f, приведен рис. 2. При повышении концентрации или параметра f температура $T_м$ несколько повышается, но остается в пределах того температурного интервала, в котором наблюдается возникновение флокенов [1]. Уровень максимального давления в зависимости от аналогичных параметров представлен на рис. 3. Формально, мы можем указать те зна-

чения C_H и f, при которых $P_{H_2}^{max}$ превзойдет значение 2000 МПа, и растягивающее напряжение $\sigma = 0,5P_{H_2}^{max}$ окажется выше $\sigma_{\hat{A}}$. Такой подход возможен, и часто используется. Однако поры не обязательно имеют сферическую форму. А при иной форме необходимо учитывать коэффициенты концентрации напряжений и, в конечном итоге, мы придем к условиям (1), вытекающим из линейной механики разрушения. Вероятно, условие $P_{H_2}^{max} \geq 2\sigma_B$ определяет верхний предел разрушающего давления, но за неимением данных об L и K_c приходиться использовать именно его.

Для концентрации водорода 2,5 (см^3/ 100 г) принятое условие разрушения выполняется только для f = 0,001 и $T = T_м$. Этот факт согласуется с наблюдениями производственников о том, что флокены не наблюдаются у сталей, с концентрацией водорода менее 2 (см^3/ 100 г) [4]. В случае концентраций 5 и 7,5 (см^3/ 100 г) условия разрушения выполняются для f = 0,001 в довольно широком диапазоне температур.

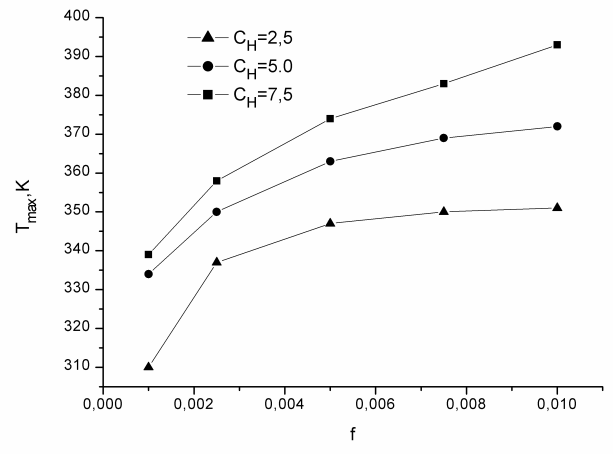


Рис. 2. Влияние концентрации водорода в железе и доли пор *f* на температуру T_m, при которой давление водорода максимально

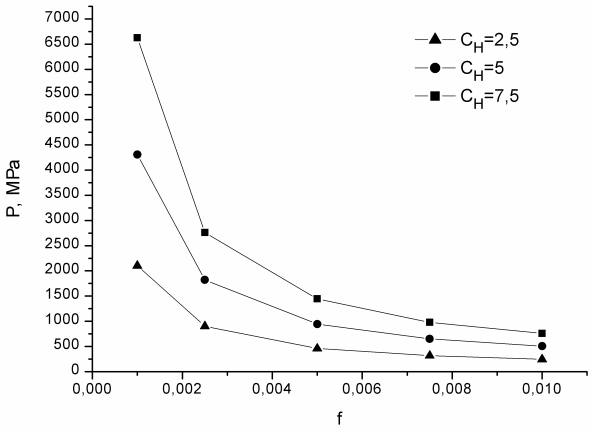


Рис. 3. Зависимость величины максимального давления в порах от концентрации водорода и степени пористости *f*

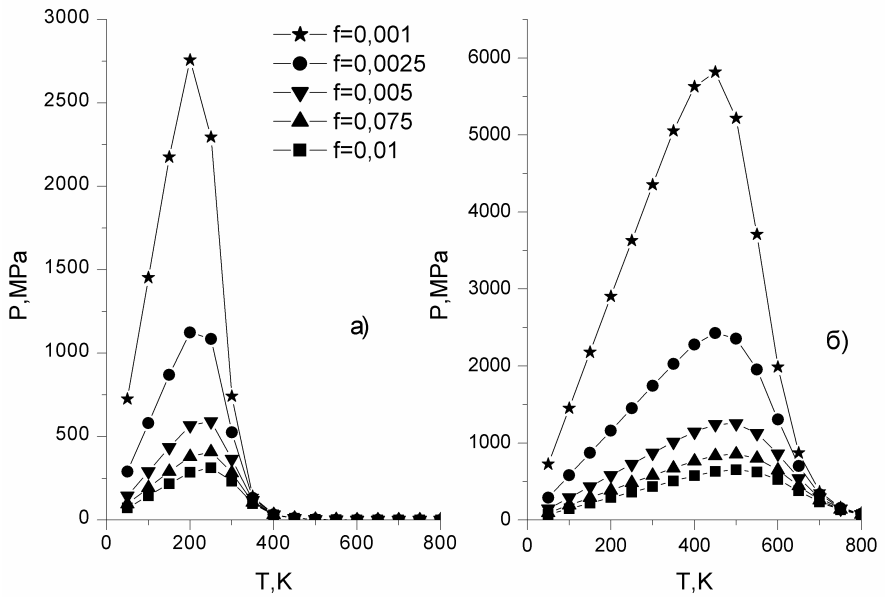


Рис. 4. Зависимость давления водорода в порах от температуры и доли пор при различных значениях энергии активации растворения водорода: *E* = 17 185 Дж/моль (а) и *E* = 37 185 Дж/моль (б). Данные для промежуточного значения *E* = 27 185 Дж/моль приведены на рис.1б

Давно известно [4], что некоторые легирующие элементы, такие как Pd и Ti, подавляют процесс флокенообразования в сталях. Существует мнение [6], что такие добавки увеличивают растворимость водорода в стали. Чтобы проверить влияние растворимости водорода, были выполнены расчеты, в которых энергии активации растворения E придавали значения 17 185 и 37 185 Дж/моль, меньшее и большее, чем в действительности (рис. 4). В первом случае растворимость водорода при 300 К увеличивается в 55 раз, а во втором – уменьшается в 55 раз. Повышение растворимости при неизменной концентрации C_{H}^{0} приводит, как это видно из сравнения рис.1б и 4а, к смещению пика давления примерно на 200 К вниз по температурной шкале и снижению его высоты с 4200 до 2690 МПа. При этом давление водорода в порах при 300 К (конечная температура охлаждения поковок) существенно снижается (с 4200 МПа до 750 МПа), т.к. точка $T = 300$ К оказывается правее $T_{\text{м}}$.

Уменьшение растворимости в 55 раз вызывает перемещение максимума давления к более высокой температуре 440 К, при этом сам максимум возрастает до 5800 МПа (ср. рис. 1а и 4б). Однако давление водорода при 300 К остается практически таким же, как и в исходном варианте. Это связано с тем, что в обоих случаях точка $T = 300$ К оказывается ниже $T_{\text{м}}$, поэтому лежит на прямолинейном участке, определяемом уравнением состояния газа (7). Поэтому для одной и той же температуры (300 К) получаем одинаковые значения давления, независимо от величины коэффициентов растворения Λ_1.

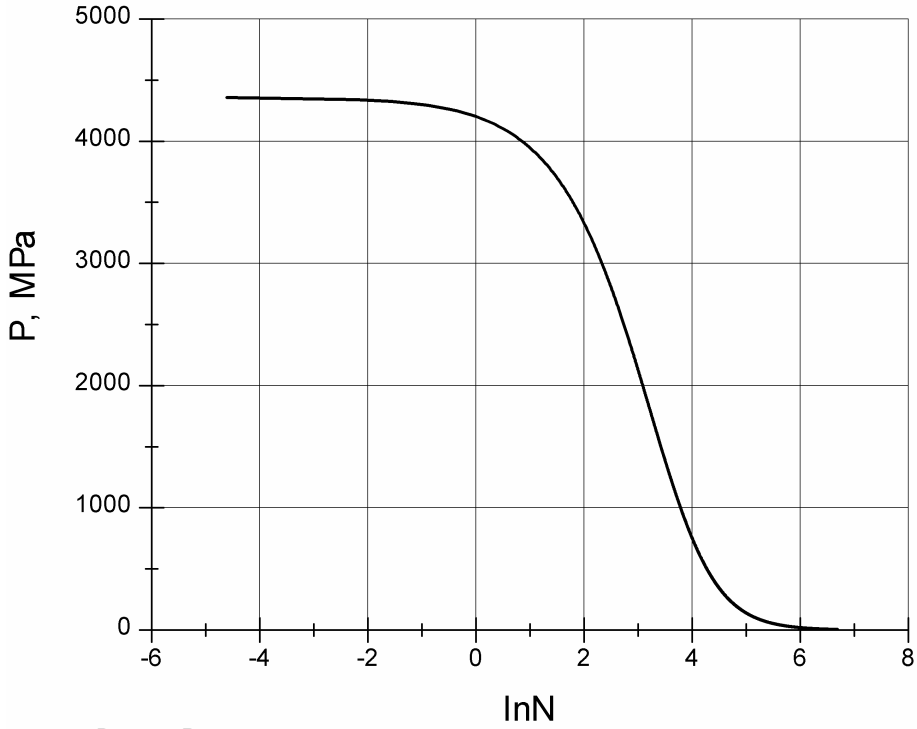


Рис. 5. Влияние растворимости водорода в железе на давление водорода в порах: $N = \Lambda_1 / \Lambda_1(\text{Fe})$, где $\Lambda_1(\text{Fe}) = 8{,}78 \cdot 10^{-4}$ см^3/100 г – коэффициент растворимости водорода в железе, а Λ_1 – различные возможные значения данного коэффициента для сплавов железа

Более детальная зависимость давления водорода при 300 К как функция растворимости приведена на рис. 5. За единицу растворимости принято значение $\Lambda_1\,(\text{Fe}) = 8{,}78 \cdot 10^{-4}$ (см^3/100 г), характеризующее растворимость водорода в железе при 300 К и $P_{\text{H}_2} = 1$ атм. Резкое уменьшение давления в порах достигается при весьма значительном возрастании растворимости. Например, десятикратное возрастание N приводит уменьшению давления на 45 %, тридцатикратное – к уменьшению на 64 %, пятидесятикратное – к уменьшению в 5 раз. Напротив, уменьшение растворимости водорода ($\ln N < 0$), действительно, почти не влияет на уровень давления водорода при 300 К.

Следует отметить, что расчеты проведены в предположении, что поры, заполненные водородом, имеют равное давление газа, независимо от размера пор. Данное условие необходимо для того, чтобы в пространстве между порами отсутствовали диффузионные потоки. Однако наполнение пор хотя бы на начальном этапе может оказаться нескоррелированным, и этот вопрос нуждается в дополнительном исследовании.

Выводы

1. Вопреки распространенному мнению о приоритете закона Сивертса, наши расчеты показали, что установление равновесного давления водорода в порах является компромиссом между законом Сивертса и законом состояния газа.
2. Именно этот компромисс приводит к появлению максимума давления водорода в районе 300 К. Точное значение температуры, при которой давление водорода максимально, зависит от концентрации водорода, степени несплошности и растворимости водорода, но во всех случаях оно расположено в том интервале температур, в котором возникают флокены при охлаждении поковок.
3. Возрастание растворимости водорода в стали, при соответствующем легировании, действительно может привести к значительному уменьшению давления водорода благодаря смещению пика давления в область отрицательных температур.
4. Результаты расчета показали, что снижение растворимости водорода, хотя и приводит к смещению максимума давления в область более высоких температур, но оставляет практически неизменным давление газа в порах при T = 300 К (конечная температура поковок). Это указывает на то, что отрицательная роль, которую в литературе приписывают легирующим добавкам, снижающим растворимость водорода, возможно, преувеличена.

Литература

1. Дубовой В.Я. Флокены в металлах. – М.: Металлургиздат, 1950. – 330 с.
2. Штремель М.А., Князев А.А., Либенсон А.Г. Кинетика роста флокенов // ФММ. – 1982. – Т. 54. – № 4. – С. 804.
3. Штремель М.А., Князев А.А. Кинетика раскрытия внутренней зернограничной трещины водородом // ФММ. – 1986. – Т. 62. – № 4. – С. 645–651.
4. Шаповалов В.И., Трофименко В.В. Флокены и контроль водорода в стали. – М.: Металлургия, 1987. – 161 с.
5. Колачев Б.А. Водородная хрупкость металлов. Итоги науки и техники. Серия «Металловедение и термическая обработка». – М.: Наука, 1989. – Т. 23. – 221 с.
6. Гельд П.В., Рябов Р.А. Водород в металлах и сплавах. – М.: Металлургия, 1974. – 272 с.
7. Гельд П.В., Рябов Р.А., Кодес Е.С Водород и несовершенства структуры металла. – М.: Металлургия. – 1979. – 221 с.
8. Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости. – М.: Наука, – 1975. – С. 395–400.
9. Хонда К., Хироне // Science Report of the Tohoku Imperial University. – 1936. – V. 25. – № 4. – P.713–725. (цитируется по [1]).

Поступила в редакцию 2 октября 2006 г.

УДК 538.913

СТРУКТУРНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ И ФОНОННЫЕ СПЕКТРЫ В СИСТЕМЕ Ni–Al: РАСЧЕТ МЕТОДОМ РЕКУРСИИ

А.А. Мирзоев, Е.А. Каблиман

Основываясь на межатомных потенциалах, найденных методом погруженного атома, рассчитаны фононные спектры мартенситного сплава $Ni_{62.5}Al_{37.5}$ с помощью метода рекурсии. Кривая фононной дисперсии сплава имеет «смягчение» для значения волнового вектора 0,16, которое согласуется с экспериментом. При этом спектральная функция для данного значения имеет пик на частоте колебаний 1,6 ТГц. Данное поведение фононных спектров связано с возможной локализацией мод на частоте 1,7 ТГц, что ведет к зарождению мартенситной структуры 7*R* сплава.

В последнее время в металлургии особое внимание уделяется широкому изучению мартенситных превращений (МП), механизма их зарождения [1] и предмартенситным эффектам, например, аномальное поведение кривой фононной дисперсии. Данные эффекты являются предвестниками возможного существования у исследуемого сплава низкотемпературной фазы и указывают на ее наиболее вероятную структуру. В металлургии МП нашли широкое применение в связи с развитием высокопрочных сплавов (сталь), конструкционных сплавов (Ni–Al), а также сплавов с такими свойствами как эффект «памяти формы», например Ni–Ti, Ni–Mn–Al, Ni–Al [2]. Одним из наиболее известных материалов, претерпевающих МП, является сплав Ni_xAl_{1-x} с концентрацией атомов никеля x в пределах от 60 до 64%. В свою очередь, сам сплав Ni_xAl_{1-x}, как конструкционный материал, представляет интерес для изучения. Благодаря тому, что Ni–Al является легким и жаростойким материалом, он широко используется в авиационной промышленности, ракетной технике, приборостроении и т.д. Следовательно, изучение фазовых переходов (или МП) данного сплава, особенно при температурах выше характерных фазовому переходу (или МП) значений, полезно и необходимо с точки зрения практического применения Ni_xAl_{1-x}.

При температурах выше температуры МП (T_M) он обладает $B2$ или структурой типа CsCl (ОЦК решетка, вершины которой заняты атомами Ni, а центр произвольно занят либо Ni, либо Al в соответствии с концентрацией x), характеризующей β_2 фазу. Низкотемпературная фаза может изменяться в зависимости от состава, что представляет интерес для изучения. Ni_xAl_{1-x} подвергается МП из высокотемпературной β_2 фазы в низкотемпературную структуру типа $7M$ для концентрации атомов никеля $60 < x < 63\%$ [3, 4] или структуру типа $3R$ для $63 < x < 68\%$ [4]. Мартенситная структура типа $7M$ характеризуется, так называемым, (5,–2) сложением. Под (n,m)-структурным обозначением подразумевается, что n плоскостей (110) смещено вдоль [1–10] направления и m плоскостей (110) смещено в противоположно направлении [–110]. Как мартенситный сплав, Ni_xAl_{1-x} обладает следующей особенностью (аномалией) фононной дисперсии. Она проявляется в поведении фононной ветви [110]–TA_2 (вторая поперечная акустическая мода), отвечающей атомным смещениям вдоль [–110] направления. Особенность заключается в том, что данная ветвь сильно зависит от состава сплава и имеет «перегиб» («смягчение» при определенном значении волнового вектора k), положение которого в k-пространстве (обратном пространстве) также зависит от концентрации атомов никеля x. Экспериментально [4] (электронная микроскопия) были обнаружены микроскопические отклонения от кубической структуры, что могло быть рассмотрено как зарождение низкотемпературной (5,–2) мартенситной фазы. Исследования [4] температурной зависимости показали «смягчение» фононной ветви в окрестности «перегиба», которое увеличивалось по мере того, как температура приближалась к T_M (температуре начала МП). При этом мода никогда не становится полностью «мягкой». Таким образом, изучение МП, механизма их зарождения и предмартенситных эффектов является актуальной проблемой с точки зрения практического применения мартенситных сплавов как конструкционных материалов. При этом выяснение природы данных явлений вызывает много вопросов. Теоретическое исследование в основном сводится к нахождению фононного спектра, расчет которого без использования

различных приближений и методов представляет собой довольно сложную задачу. Поэтому встает вопрос о способах решения этой задачи: построение модели сплава, выбор приближений и методов расчета.

В наших расчетах мы пользуемся известным их химии приближением метода сильной связи, которое учитывает взаимодействия атома только с ближайшими соседями. Такой подход универсален и применим к системам с любым типом беспорядка, включая жидкие металлы и сплавы. Для расчета плотности фононных состояний, а соответственно и фононной дисперсии, применяется метод рекурсии. Локальная плотность состояний на узле может быть выражена через узельную функцию Грина G_{ii}:

$$n_i(E) = -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im} G_{ii}. \tag{1}$$

где

$$G_{ii} = <\psi_i | \frac{1}{E - \hat{H} + i\delta} | \psi_i >. \tag{2}$$

Полная плотность состояний имеет вид:

$$n(E) = \sum_i n_i(E). \tag{3}$$

С помощью метода рекурсии матрицу гамильтониана H исследуемой системы можно привести к тридиагональному виду. Таким образом, плотность фононных состояний (ПФС) для колебаний определенного вида, характеризуемого вектором-состоянием $|\psi\rangle$, можно определить соотношением:

$$g_\Psi(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}\operatorname{Im}\left\langle\Psi\right|\frac{1}{\omega^2 - \hat{D} + i\delta}\left|\Psi\right\rangle, \quad \omega \geq 0, \tag{4}$$

где $\hat{D}$ – динамическая матрица в координатном пространстве:

$$D\left(\begin{smallmatrix} i \\ \alpha \end{smallmatrix}\begin{smallmatrix} j \\ \beta \end{smallmatrix}\right) = (M_i M_j)^{-1/2}\phi\left(\begin{smallmatrix} i \\ \alpha \end{smallmatrix}\begin{smallmatrix} j \\ \beta \end{smallmatrix}\right), \tag{5}$$

а матрица силовых констант связана с межатомным потенциалом $V(r)$ соотношением

$$\phi\left(\begin{smallmatrix} i \\ \alpha \end{smallmatrix}\begin{smallmatrix} j \\ \beta \end{smallmatrix}\right) = \frac{\partial^2}{\partial u_{i\alpha}\partial u_{j\beta}}\left[\frac{1}{2}\sum_{k,m} V(\vec{R}_k + \vec{u}_k - \vec{R}_m - \vec{u}_m)\right], \tag{6}$$

где $u_{i\alpha}$ – α-е компоненты ($\alpha = x, y, z$) импульса и вектора смещения i-го атома, имеющего массу M_i и равновесное положение $\vec{R}_i$. В зависимости от выбора состояния $|\psi\rangle$ формула (4) будет представлять собой:

1) локальную ПС колебаний атома i с поляризацией α для

$$\left|\psi\right\rangle = \begin{cases} u_{j\beta} = 1, \; j\beta = i\alpha, \\ u_{j\beta} = 0, \; j\beta \neq i\alpha; \end{cases} \tag{7}$$

2) спектр флуктуаций плотности коллективных колебаний системы для

$$\left|\Psi\right\rangle = N^{-1/2}\sum_{i\alpha} e_\alpha \exp(i\vec{k}\cdot\vec{R}_i). \tag{8}$$

Резольвента $\langle\psi\,|\frac{1}{\omega^2 - \hat{D} + i\delta}|\Psi\rangle$ может быть вычислена методом рекурсии в виде бесконечной дроби, обрываемой на некотором уровне, называемом глубиной рекурсии. Преимущество метода рекурсии состоит в том, что он позволяет рассчитать фононные спектры не только однокомпонентных, упорядоченных систем, а также бинарных, неупорядоченных систем, состоящих из большого числа атомов. В качестве примера применения метода рекурсии к данным системам можно привести: неупорядоченный мартенситный сплав Li–Mg [5], силикатные расплавы и стекла, например Ni–Zr стекла [6], упорядоченные системы V, Cu, Ni, Cu_3Au [7], жидкий Cs [8, 9] и т.д. Таким образом, выбор метода рекурсии в данной работе по исследованию фононной дисперсии атомно упорядоченного сплава вполне оправдан.

Для расчета фононного спектра методом рекурсии были использованы следующие параметры: вид кристаллической решетки – $B2$ или CsCl-тип, параметр решетки – 2,858 ангстрем [4],

атомные массы: Ni – 58,6934 а.е.м., Al – 26,9815 а.е.м., потенциал межатомного взаимодействия – [10], концентрация атомов Ni x = 62,5%, размер кластера (количество атомов) – 2000 атомов, глубина рекурсии (количество уровней) – 12. При этом знание потенциала межатомного взаимодействия в системе Ni–Al очень важно, поскольку вторые производные данного потенциала используются для расчета динамической матрицы (2). Но, в свою очередь, прямое нахождение межатомного взаимодействия довольно затруднительно. Для упрощения данной задачи существует различные методы. Используемые в данной работе межатомные потенциалы, найденные с помощью метода погруженного атома [10]. Данный метод точно воспроизводит основные свойства решетки фазы $B2$ системы Ni–Al, различного рода дефекты (точечные, линейные, двумерные) [10–12], а также энергии связи атомов и характеристику устойчивости рассчитываемых структур с другим составом. Таким образом, данный метод прекрасно подходит для нахождения потенциалов межатомного взаимодействия системы Ni–Al. Поскольку функция парного частичного взаимодействия является очень важной характеристикой любой исследуемой системы, то небольшое отклонение от точного значения может привести к довольно значительному изменению полученного результата. Проведенные в данной работе расчеты показали, что небольшие отклонения функции потенциала в нашем случае слабо влияют на производимые расчеты фононной дисперсии. На основе знания данных потенциалов могут быть сделаны предположения относительно природы МП. Рассмотрим одну из наиболее интересных теорий, касающихся механизма зарождения мартенситной фазы. В работе [13] речь идет о том, что неупорядоченность состава (атомов Al) может порождать области локализации мод в высокотемпературной фазе сплава Ni_xAl_{1-x} ($0{,}61 \le x \le 0{,}66$), соответствующие частотам 1,6; 5,8; 7,5 и 11 ТГц [13, 14]. При МП локализация мод исчезает за исключением сильно локализованных оптических мод атомов Al на частоте 11 ТГц. Каждую область локализации можно сопоставить особым локальным флуктуациям в составе, например, моды на частоте 7,5 ТГц относятся к области сплава с преобладанием атомов Ni. Эти моды характеризуют области высоких энергий, напряжений и локальных деформаций, что указывает на возможное образование мартенситной фазы. При этом локализованные области на частотах 5,8 и 7,5 ТГц являются слишком высокими, чтобы участвовать в определении фазового перехода. Наиболее возможно, что главную роль здесь играют моды на частоте 1,6 ТГц, относящиеся к атомам никеля. В данном случае рассчитанный параметр Грюнайзена [13], характеризующий изменение фононной дисперсии с расширением решетки, имеет отрицательное и большое значение. Данные моды имеют отношение к областям высоких энергий, напряжений и значительных локальных дефектов вдоль кристаллографического направления [110]. Это может являться предвестником зарождения мартенситной структуры.

С другой стороны, как уже говорилось, образование мартенситной структуры сплава может характеризоваться «смягчением» кривой фононной дисперсии. Для построения данной кривой, нужно определить закон, по которому можно найти фононную дисперсию. Сначала рассмотрим поведение спектральной функции (плотности фононных состояний) системы Ni–Al для продольных коллективных возбуждений с волновым вектором, имеющим произвольное направление в обратном пространстве (k-пространстве), но фиксированный модуль, равный k (рис. 1).

Как видно из рис. 1, при малых значениях k спектральная функция имеет форму острого пика, центрированного вблизи определенной частоты ω_{max}. Такой вид спектральной функции позволяет говорить о существовании коллективного колебания («фонона») с частотой ω_{max}. Существование достаточно хорошо определенной частоты «фонона» с данным модулем волнового вектора позволяет определить закон дисперсии колебаний как зависимость $\omega_{max}(k)$. Однако результаты расчета показывают, что пик спектральной функции сильно расплывается с ростом значения волнового вектора k, т.е. теряет лоренцевский вид. Следовательно, трактовка закона дисперсии, основанная на ω_{max}, становится неопределенной. По этой причине закон дисперсии для фононов будем рассматривать [8] как следующую зависимость:

$$\overline{\omega}(k) = \frac{\int_0^\infty \omega f(k,\omega) d\omega}{\int_0^\infty f(k,\omega) d\omega}, \qquad (9)$$

где $\overline{\omega}$ имеет смысл средней частоты спектра при данном значении k. Интеграл (9) был рассчитан численно методом Симпсона.

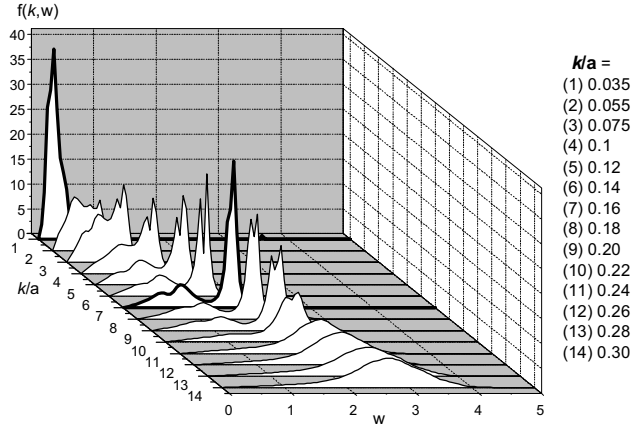


Рис. 1. Спектральная функция продольных колебаний в сплаве $Ni_{62,5}Al_{37,5}$. $f(k,\omega)$ – спектральная функция, ω – частота, k – волновой вектор

На рис. 2 представлены две кривые второй поперечной акустической моды (TA_2), найденные теоретически с помощью метода рекурсии и экспериментально при неупругом рассеянии нейтронов [4]. Данная фононная ветвь соответствует смещениям атомов вдоль кристаллографического направления [1–10] перпендикулярно первоначальному распространению волны [110]. Выбранные направления являются направлениями симметрии в данном кристалле. Как видно из графика мода TA_2 проявляет аномальное поведение, то есть имеет «смягчение» в области значения k/a = 0,13–0,16. Данный результат согласуется с экспериментальными данными [4]. Полученное значение k/a соответствует структуре 7R. Следовательно, можно предположить возможное зарождение структуры 7R, в которую переходит сплав $Ni_{62,5}Al_{37,5}$ при мартенситном превращении. Стоит отметить, что зарождение происходит при температурах выше температуры мартенситного перехода T_M. Данное явление принято называть предмартенситным эффектом. С чем может быть связано данное явление?

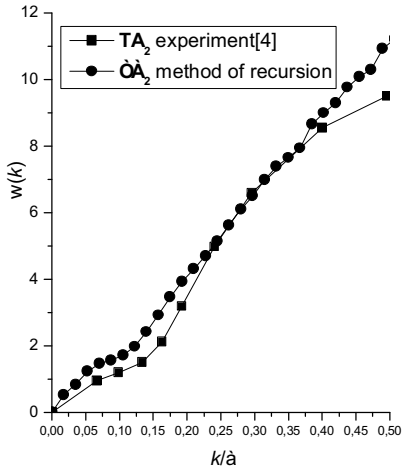


Рис. 2. Вторая поперечная акустическая мода сплава $Ni_{62,5}Al_{37,5}$

Рассмотрим поведение плотности фононных состояний системы в области значений k/a = 0,13–0,16. Рассчитанные спектральные функции (полной плотности состояний) $f(k, \omega)$ представлены на рис. 3. Как видно из графика, при очень малых значениях k/a функция $f(k, \omega)$ имеет ярко выраженную пикообразную форму, соответствующую области малых частот. При увеличении значения волнового вектора k пик резко уменьшается и постепенно переходит в область больших частот. При значении k/a = 0,16, соответствующем зарождению структуры 7R, происходит резкое возрастание на частоте $\omega \sim 1{,}7$ ТГц. При дальнейшем увеличении k значение $f(k, \omega)$ снова уменьшается. Формирование ярко выраженного пика на данной частоте говорит о слабом затухании колебаний вдоль кристаллографического направления [110]. Можно предположить, что полученное значение частоты $\omega \sim 1{,}7$ ТГц относится непосредственно к процессу фазового перехода. В работе [13] говорится, что наиболее возможно, в определении фазового перехода главную роль играют моды на частоте $\omega_0 \sim 1{,}6$ ТГц. Данные моды отвечают колебаниям кластеров никеля, к образованию которых могут привести неоднородности состава. Эти моды характеризуют области высоких энергий, напряжений и локальных деформаций, что указывает на возможное образование мартенситной фазы. Таким образом, полученное в данной работе значение частоты $\omega \sim 1{,}7$ ТГц, соответствующее резкому возрастанию спектральной функции при значении k/a = 0,16 и появлению незатухающих

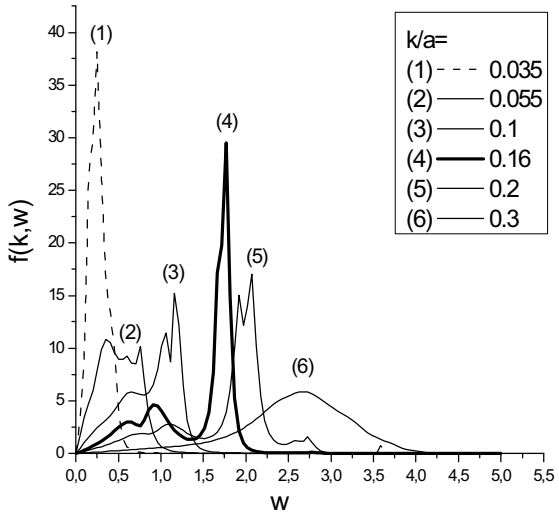


Рис. 3. Спектральная функция сплава $Ni_{62,5}Al_{37,5}$

колебаний, близко по значению для частоты $\omega_0 \sim$ 1,6 ТГц, на которой локализуются моды колебаний кластеров никеля [13]. Данное явление может быть рассмотрено как предвестник зарождения мартенситной структуры 7*R* сплава $Ni_{62,5}Al_{37,5}$.

Таким образом, в данной работе была исследована структурная устойчивость и рассчитаны фононные спектры системы Ni–Al. Сплав Ni_xAl_{1-x} с концентрацией атомов никеля $60\% < x < 64\%$ испытывает мартенситное превращение из высокотемпературной структуры *B*2 в низкотемпературную структуру 7*R*. При этом зарождение структуры 7*R* возможно при температуре выше температуры мартенситного превращения (предмартенситный эффект). Данное явление соответствует аномальному поведению кривой фононной дисперсии, а точнее второй поперечной акустической моды. Оно заключается в том, что данная мода имеет «смягчение» при значении $k/a = 0{,}16$, которое соответствует структуре 7*R*. Полученный результат согласуется с экспериментом [4]. При этом рассчитанная спектральная функция имеет резкое возрастание на частоте 1,7 ТГц при найденном значении $k/a = 0{,}16$. Данное явление может быть связано с появлением незатухающих колебаний на данной частоте и возможной локализацией мод на близкой частоте 1,6 ТГц [13]. Полученный результат может соответствовать зарождению мартенситной фазы сплава Ni_xAl_{1-x}. Расчет фононных спектров был основан на знании межатомных потенциалов взаимодействия в сплаве, найденных методом погруженного атома [10], и методе рекурсии для нахождения плотности фононных состояний. Использование совокупности этих методов показало хороший результат. Таким образом, метод рекурсии вместе с методом погруженного атома могут быть применены для моделирования неупорядоченных систем, состоящих из большого числа атомов.

Литература

1. Wang Y., Jiang X. The investigation of martensitic transformation origin mechanism // J. Hebei Univ. Technol. – 2004. – №33. – P. 102.

2. Busgen T., Feydt J., Hassdorf R., Thienhaus S., Moske M., Boese M., Zayac A., Entel P. Ab initio calculations of structure and lattice dynamics in Ni–Mn–Al shape memory alloys // Phys. Rev. B. – 2004. – V.70. – № 1. – P. 014111.

3. Fuchizaki K., Noda Y., Yamada Y. Pseudospin-phonon coupling model for martensitic transformation in bcc-based alloys // Phys. Rev. B. – 1989. – V.39. – № 13. – P. 9260.

4. Shapiro S.M., Yang B.X., Noda Y., Tanner L.E., Shryvers D. Neutron-scattering and electron-microscopy studies of the premartensitic phenomena in Ni_xAl_{1-x} alloys // Phys. Rev. B. – 1991. – V. 44. – №17. – P. 9301.

5. Hafner J., Punz G. Phonons and martensitic phase transitions in disordered Li–Mg alloys // Z. Phys. B. – Condens. Matter. – 1987. – V.65. – P. 465.

6. Hafner J., Krajčí M. Propagating and localized vibrational modes in Ni–Zr glasses // J. Phys. – Condens. Matter. – 1994. – V. 6. – P. 4631.

7. Chakrabarti A., Mookerjee A. A study of convergence of the recursion method for metals and compounds // J. Phys. – Condens. Matter. – 2002. – V. 14. – P. 3211.

8. Мирзоев А.А., Гельчинский Б.Р., Бушуев А.С. Некоторые возможности метода рекурсии для изучения электронных и фононных спектров конденсированных сред // Высокотемпературные расплавы. – 1996. – № 1. – С. 17.

9. Gelchinski B.R., Mirzoev A.A., Smolin N.P. Computer simulations of vibrational spectra and sound velocity in liquid cesium up to the critical point // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2002. – V. 312–314. – P. 138.

10. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Embedded-atom potential for *B*2 – NiAl // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 65. – № 224114.

11. Korzhavyi P.A., Ruban A.V., Lozovoi A.Y., Vekilov Yu. Kh., Abrikosov I.A., Johansson B. Constitutional and thermal points defects in *B*2 – NiAl // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 61. – № 9. – P. 6003.

12. Papanicolaou N.I., Chamati H., Evangelakis G.A., Papaconstantopoulos D.A. Second-moment interatomic potential for Al, Ni and Ni–Al alloys // Comput. Mater. Sci. – 2003. – № 27. – P. 191.

13. Rubini S., Ballone P. Phonon localization and martensitic transformation in Ni_xAl_{1-x} alloys // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50. – № 2. – P. 1297.

14. Rubini S., Ballone P. Quasiharmonic and molecular-dynamics study of the martensitic transformation in Ni–Al alloys // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 48. – № 1. – P. 99.

Поступила в редакцию 8 сентября 2006 г.

УДК 539.4

УПРУГО-ПЛАСТИЧЕСКОЕ РАЗРУШЕНИЕ ТРУБ С ПОВЕРХНОСТНОЙ ТРЕЩИНОЙ

А.А. Остсемин, П.Б. Уткин

Рассматривается задача о разрушающем кольцевом напряжении для относительно тонкостенных труб с осевой поверхностной трещиной. При решении материал считаем упругим, за исключением деформированных зон в нетто-сечении и концах трещины, которые заменяются эквивалентными напряжениями, являющимися граничными условиями для задачи при упруго-пластическом разрушении. Используя аппарат комплексной переменной, данная задача была аналитически решена при использовании некоторых предположений на граничные условия. Полученное решение дает возможность вычислить кольцевое напряжение в трубе. В качестве критериев разрушения берутся два условия. Во-первых, раскрытие трещины достигает критического значения для материала, во-вторых, напряжение в нетто-сечении трещины достигает напряжения разрушения для данного материала. По формулам были проведены вычисления для сравнения с экспериментальными данными для нескольких типов труб с поверхностной осевой трещиной.

1. Введение

В последние годы на магистральных газопроводах РФ отмечен рост аварийности связанный с стресс-коррозией. При обследовании участков газопровода Уренгой–Петровск протяженностью 1453 м было выявлено 744 стресс-коррозионных дефекта. Отдельные дефекты имели глубину до 7 мм и длину до 4,5 м. Ресурс работоспособности трубопровода определяется временем его эксплуатации до момента сквозного разрушения стенки. Еще более неопределенным является время зарождения порогового дефекта, способность к стабильному росту при эксплуатации магистралей, трубопроводов, теплотрасс, водоводов и сосудов давления. Разрушение магистральных трубопроводов, изготовленных из трубной стали класса прочности К-52, явилось следствием зарождения на наружной поверхности трубы продольных коррозионно-механических трещин, расположенных в нижней части трубы вблизи продольного сварного шва. Работоспособность трубопроводов во многих случаях обуславливается наличием в них концентраторов напряжений – трещин, рисок, царапин, каверн. В настоящее время недостаточно изучено распределение напряжений и деформаций в трубах с поверхностной трещиной. В этом случае задача становится трехмерной и, при учете пластических деформаций, развивающихся в вершине трещины, трудноразрешимой и актуальной.

Рассмотрено напряженно-деформированное состояние трубы с поверхностной осевой трещиной при плоско-напряженном состоянии. Применяя модель Панасюка–Дагдейла и деформационные критерии разрушения (критическое раскрытие трещины) получены аналитические формулы, дающие связь между характеристиками материала и разрушающим кольцевым напряжением трубы.

2. Схематическое описание задачи

Труба считается бесконечной, с приложенным внутренним давлением перпендикулярным плоскости трещины. Трещина считается линейной, постоянной глубины. Из-за приложенного усилия трещина имеет тенденцию к раскрытию и деформации нетто-сечения, равно как и прилегающие зоны. Раскрытие трещины варьируется вдоль длины трещины и будет максимально в центре трещины. Предполагаем, что трещина вместе с некоторой окрестностью (пластической зоной) отсутствует, а силы, действующие в данной зоне, заменяются на граничные условия в соответствующей упруго-пластической задаче. Схема трещины дана на рис. 1. Разрез дан вдоль трещины, темно-серым показаны пластические зоны у концов трещины.

Математическую модель задачи можно описать в следующих терминах и предположениях.

1. Труба имеет поверхностную осевую трещину.

2. На трещину действуют растягивающие силы, которые при рассмотрении задачи заменяем напряжениями, действующие в нетто-сечении трещины.

3. На обоих концах трещины растягивающие силы заменены напряжениями, действующими в кончиках трещины (пластической зоне).

Если глубина трещины постоянна и материал идеально упругий, то силы, передающиеся через нетто-сечение трещины постоянны. С другой стороны если материал подвержен деформационному упрочнению, то эти силы есть функция от деформации и таким образом зависят от раскрытия трещины, достигая максимума в центре.

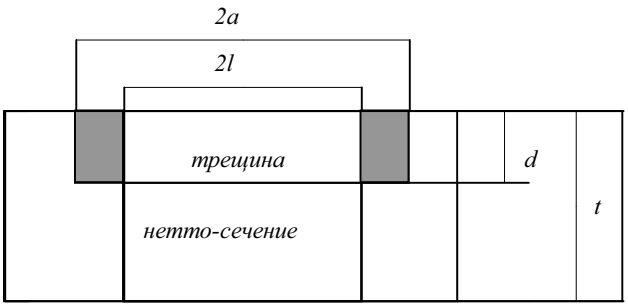


Рис. 1

3. Критерий разрушения нетто-сечения поверхностной трещины

Для описания разрушения необходимо определить критерий разрушения нетто-сечения поверхностной трещины трубы. По аналогии с критерием разрушения, мы предположим, что разрушение (распространение трещины) возникает когда:

1) напряжение в центре трещины достигло критического значения для материала;

2) раскрытие трещины в центре трещины достигло критического значения δ_c определенного для каждого материала.

4. Аналитическое решение

На основании схематического описания задачи возможно теоретическое определение напряженно-деформированного состояния трубы с поверхностной трещиной (d – глубина, $2l$ – длина трещины, t – толщина стенки трубы).

Для эллиптических трещин при решении задачи используется конформное преобразование плоскости [7] $z = \omega(\zeta) = n\left(\zeta + \frac{m}{\zeta}\right)$ где параметры $n = \frac{a+b}{2}, m = \frac{a+b}{a-b}$ определяются через параметры эллипса a (большая полуось) и b (малая полуось). В нашем случае для трещины считается, что малая полуось равна нулю. Это означает равенство $m = 1,\ n = a/2\omega$.

Мы предполагаем, что длина пластичной зоны равна действительной длине трещины $2l$ тогда как длина трещины включая зоны пластичности у концов трещины равны $2a$. Эти два параметра связаны соотношением $l = a\cos(\alpha)$,где α – есть вспомогательный параметр.

Граничные условия определяем так: напряжение на бесконечности равно кольцевому напряжению σ_θ , функцию распределения напряжения в нетто-сечении поверхностной трещины, которая зависит от расстояния x от вершины до центра трещины, предела текучести σ_T , предела прочности σ_B , напряжения пластического течения $\bar{\sigma} = k_1\sigma_B$ предполагаем равной:

$$P(x) = (d-t)(\bar{\sigma} - (\bar{\sigma} - k_2\sigma_T)(\sum_{i=1}^{k} a_i (x/l)^{2i})), \qquad (1)$$

где k_1 характеризует момент потери устойчивости (напряжение пластического течения $\bar{\sigma}$) пластического деформирования участка около вершины трещины, учитывает коэффициент двухосности нагружения стенки трубы m_0 и показатель деформационного упрочнения n степенной аппроксимации диаграммы деформирования; k_2 определяет границу локализованной пластической зоны и зависит от коэффициента поперечной деформации μ . Исходя из условий аналитического решения задачи предполагаем симметричность функции напряжений (1), которая является полиномом четной степени (например, 2 и 4). На рис. 2 показаны распределения напряжения в нетто-сечении для случая полинома 2 степени (вариант 1) и четвертой степени (вариант 2). Предполагаем также, что эти силы распределены независимо от глубины листа. Соответствующее распре-

деление напряжения, которое будет использовано как граничные условия соответствующей плоской задачи упругости, равно $\sigma(x) = P(x)/(d-t)$, в добавлении предполагаем, что напряжение на концах трещины равно $k_2\sigma_T$, что означает равенство $\sum_{i=1}^{k} a_i = 1$.

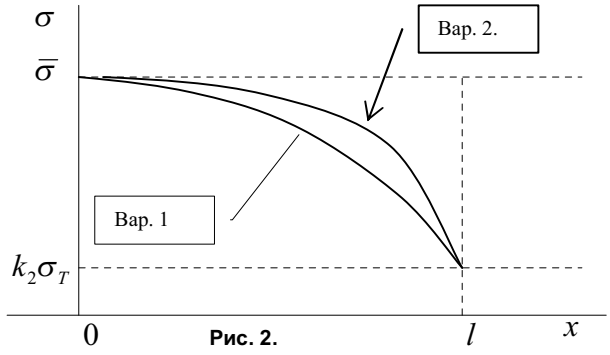


Рис. 2.

Используя аппарат функций комплексного переменного Колосова-Мусхелишвили [1–2] и разбив задачу на три подзадачи – первая задача состоит в вычислении комплексных потенциалов $\Phi(\zeta)$ и $\Psi(\zeta)$ для напряженного состояния в окрестности трещины (напряжение на границе трещины равно нулю) и напряжение на бесконечности равно σ_θ, вторая задача учитывает напряжение, передаваемое через нетто-сечение трещины, и последняя задача учитывает напряжение на кончиках трещины (в пластической зоне). В завершении для суммирования этих задач предполагаем, что результирующий комплексный потенциал может быть получен как сумма решений выше перечисленных задач с определенными весами, а именно мерой зоны действия соответствующих сил по принципу суперпозиции. Аналитические решения некоторых выше перечисленных задач можно взять из [1, 2].

В качестве результата теоретического анализа получаются следующие два комплексных потенциала $\Phi(\zeta), \Psi(\zeta)$ (громоздкие выкладки не приводятся):

$$\Phi = \frac{a}{\zeta}\left[\frac{\cos(\alpha)}{2}\left(1-\frac{d}{t}\right)\left(k_1\sigma_B - (k_1\sigma_B - k_2\sigma_T)\sum_{i=1}^{k}\frac{a_i C_{2i}^{i}}{2^{2i}}\right) - \frac{\sigma_\theta}{2}\left(\frac{d}{t} + \left(1-\frac{d}{t}\right)\cos(\alpha)\right) + \frac{\alpha\sigma_T}{\pi}\frac{d}{t}\right] +$$

$$+a\cos(\alpha)\left(1-\frac{d}{t}\right)\frac{k_1\sigma_B - k_2\sigma_T}{2}\sum_{i=1}^{k}\frac{a_i}{2^{2i}}\sum_{m=0}^{i-1}C_{2i}^{m}\left(\frac{\zeta^{2i-2m+1}}{2i-2m+1} - \frac{\zeta^{2i-2m-1}}{2i-2m-1}\right) -$$

$$-\frac{a\sigma_T}{2\pi i}\frac{d}{t}\left[\frac{z}{a}\ln\left(\frac{\zeta^2 - e^{2i\alpha}}{\zeta^2 - e^{-2i\alpha}}\right) - \cos(\alpha)\ln\left(\frac{1-\zeta^2+2i\zeta\sin(\alpha)}{1-\zeta^2-2i\zeta\sin(\alpha)}\right)\right] \qquad (2)$$

$$\Psi = \frac{2a\zeta}{\zeta^2-1}\left[\frac{\cos(\alpha)}{2}\left(1-\frac{d}{t}\right)\left(k_1\sigma_B - (k_1\sigma_B - k_2\sigma_T)\sum_{i=1}^{k}\frac{a_i C_{2i}^{i}}{2^{2i}}\right) - \frac{\sigma_\theta}{2}\left(\frac{d}{t} + \left(1-\frac{d}{t}\right)\cos(\alpha)\right) + \frac{\alpha\sigma_T}{\pi}\frac{d}{t}\right] +$$

$$+a\cos(\alpha)\left(1-\frac{d}{t}\right)\frac{k_1\sigma_B - k_2\sigma_T}{2}\sum_{i=1}^{k}\frac{a_i}{2^{2i}}\sum_{m=0}^{i-1}C_{2i}^{m}(2i-2m)\left(\frac{\zeta^{2i-2m+1}}{2i-2m+1} + \frac{\zeta^{2i-2m-1}}{2i-2m-1}\right) -$$

$$-\frac{a\sigma_T}{2\pi i}\frac{d}{t}\left[\cos(\alpha)\ln\left(\frac{1-\zeta^2+2i\zeta\sin(\alpha)}{1-\zeta^2-2i\zeta\sin(\alpha)}\right)\right] \qquad (3)$$

Аналогично подходу Дагдейла для исключения разрыва напряжений в концах трещины ($\zeta = \pm 1$), необходимо, чтобы коэффициент при $(\zeta^2-1)^{-1}$ в выражении (3) функции Ψ был равен нулю. Это приводит к следующему условию:

$$\left[\frac{\cos(\alpha)}{2}\left(1-\frac{d}{t}\right)\left(k_1\sigma_B - (k_1\sigma_B - k_2\sigma_T)\sum_{i=1}^{k}\frac{a_i C_{2i}^{i}}{2^{2i}}\right) - \frac{\sigma_\theta}{2}\left(\frac{d}{t} + \left(1-\frac{d}{t}\right)\cos(\alpha)\right) + \frac{\alpha\sigma_T}{\pi}\frac{d}{t}\right] = 0. \qquad (4)$$

Преобразовывая уравнение (4), получим:

$$\left(1-\frac{d}{t}\right)\left(k_1\frac{\sigma_B}{\sigma_T}\left(1-\sum_{i=1}^{k}\frac{a_i C_{2i}^i}{2^{2i}}\right)+k_2\sum_{i=1}^{k}\frac{a_i C_{2i}^i}{2^{2i}}-\frac{\sigma_\theta}{\sigma_T}\right)\cos(\alpha)+\frac{2\alpha}{\pi}\frac{d}{t}=\frac{\sigma_\theta}{\sigma_T}\frac{d}{t}. \quad (5)$$

Из данного уравнения можно найти параметр α и далее размер пластических зон согласно модели Панасюка–Дагдейла

$$a-l=a(1-\cos(\alpha)).$$

Далее через комплексный потенциал $\Phi(\zeta)$ из уравнения (2) можно определить раскрытие трещины δ:

$$v=-\frac{4}{E}\mathrm{Re}(i\Phi)=\frac{\delta}{2},$$

$$\delta=\frac{4l\sigma_{\grave{O}}}{\pi E}\left[\pi\left(1-\frac{d}{t}\right)\left(k_1\frac{\sigma_{\hat{A}}}{\sigma_{\grave{O}}}-k_2\right)\sum_{i=1}^{k}\frac{a_i}{2^{2i}}\sum_{m=0}^{i-1}C_{2i}^m\left(\frac{\sin((2i-2m+1)\theta)}{2i-2m+1}-\frac{\sin((2i-2m-1)\theta)}{2i-2m-1}\right)+\right. \quad (6)$$

$$\left.+\frac{d}{t}\left(\frac{\cos(\theta)}{\cos(\alpha)}\ln\left|\frac{\sin(\theta-\alpha)}{\sin(\theta+\alpha)}\right|-\ln\left|\frac{\sin\theta-\sin\alpha}{\sin\theta+\sin\alpha}\right|\right)\right].$$

Уравнение на перемещение *v* легко получим из следующих соображений: учитывая, что рассматривается случай плоско-напряженного состояния и интересующая точка есть $z=0$, можно, пользуясь уравнением для *v*, из [1] получить его в данном виде. Действительно, согласно [1, с. 149]:

$$2\mu(u(x,y)+iv(x,y))=\kappa\varphi(z)-z\overline{\varphi'(z)}-\overline{\psi(z)}, \quad (7)$$

$$\varphi(\sigma)+\sigma\overline{\varphi'(\sigma)}+\overline{\psi(\sigma)}=f_1+if_2, \quad (8)$$

где $\kappa=\dfrac{\lambda+3\mu}{\lambda+\mu}$ и $f_1+if_2=i\int_0^\sigma(X_n+iY_n)ds$. Если нам нужно раскрытие трещины в центре, то вычислим значение функции *v* в точке $z=0$. Складывая формулы (7) и (8) получим:

$$2\mu(u+iv)=(\kappa+1)\varphi(\sigma)-(f_1+if_2). \quad (9)$$

Из формулы (9) сравнивая мнимые части, получаем:

$$v=(1/2\mu)\left((\kappa+1)\,\mathrm{Im}(\varphi(\sigma))-f_2\right). \quad (10)$$

Далее заметим, что в случае линейной трещины и одноосного напряжения $f_2=0$. Данное замечание можно обобщить на случай симметричной трещины и симметричного распределения напряжения. Итого (10) превращается:

$$v=\frac{\kappa+1}{2\mu}\mathrm{Im}(\varphi(\sigma))=-\frac{\kappa+1}{2\mu}\mathrm{Re}(i\varphi(\sigma)) \quad (11)$$

Осталось учесть, что в плоском случае надо провести замену $\lambda\to\lambda^*=2\lambda\mu/(\lambda+2\mu)$ после чего, преобразовывая $\dfrac{\kappa+1}{2\mu}=4\dfrac{\lambda+\mu}{\mu(3\lambda+2\mu)}=\dfrac{4}{E}$ из уравнения (11), получаем первую формулу (6). Использование данной формулы возможно только на границе отверстия.

В уравнении (6) также учтено что $\zeta=e^{i\theta}$. Далее подставляя значение $\theta=\pi/2$ (что характеризует центр трещины) получаем:

$$\delta_c=\frac{4l\sigma_T}{\pi E}\left(\pi\left(1-\frac{d}{t}\right)\left(k_1\frac{\sigma_B}{\sigma_T}-k_2\right)\sum_{i=1}^{k}a_iA_i+\frac{2d}{t}\ln tg\left(\frac{\alpha}{2}+\frac{\pi}{4}\right)\right), \quad (12)$$

где

$$A_i=\frac{1}{2^{2i}}\sum_{m=0}^{i-1}C_{2i}^m(-1)^{i-m}\left(\frac{1}{2i-2m+1}+\frac{1}{2i-2m-1}\right).$$

Критическое раскрытие трещины δ_c есть характеристика материала [6]. Таким образом, формулы (4) и (12) устанавливают связь между геометрическими характеристиками трещины (длина и глубина), характеристиками материала (пределы текучести и прочности σ_T, σ_B) и разрушающим кольцевым напряжением σ_θ.

Из формулы (12) можно определить параметр α по формуле:

$$\alpha = 2\,\mathrm{tg}^{-1}\left(\exp\left(\frac{t}{d}\left(\frac{\delta_c \pi E}{8 l \sigma_T} - \frac{\pi}{2}\left(1-\frac{d}{t}\right)\left(k_1\frac{\sigma_B}{\sigma_T} - k_2\right)\sum_{i=1}^{k} a_i A_i\right)\right)\right) - \frac{\pi}{2} \qquad (13)$$

Далее воспользовавшись выражением (5) определяем отношение σ_θ/σ_T:

$$\frac{\sigma_\theta}{\sigma_T} = \frac{\frac{2\alpha}{\pi}\frac{d}{t} + \cos(\alpha)\left(1-\frac{d}{t}\right)\left(k_1\frac{\sigma_B}{\sigma_T}\left(1-\sum_{i=1}^{k} a_i \frac{C_{2i}^i}{2^{2i}}\right) + k_2\sum_{i=1}^{k} a_i \frac{C_{2i}^i}{2^{2i}}\right)}{\left(\frac{d}{t}\right) + \left(1-\frac{d}{t}\right)\cos\alpha}. \qquad (14)$$

Для проверки теоретического анализа были взяты экспериментальные данные, после чего проведено сравнение экспериментальных и аналитических результатов, вычисленных по формулам (13) и (14). В качестве примера приведены табл. 1, 2. Экспериментальные данные табл. 1 взяты из работ Даффи А., проведенных в США [4], для стали Х-52 и из [5] – для российских труб большого диаметра, испытанных в ООО «ВНИИСТ» (Москва) (см. табл. 2). Критическое раскрытие трещины δ_c трубных сталей приведено в [6]. Средняя погрешность полученных результатов составила менее 6% (см. табл. 1) и 5,5% (см. табл. 2).

Данные для труб из табл. 1: R = 380 мм, t = 9,5 мм, δ_c = 0,27 мм.

Таблица 1

№ п/п	Марка стали	σ_T, МПа	σ_B, МПа	d/t	l, мм	Разрушающее давление (МПА) и погрешности вычисления (в %)				
						$\sigma_\theta^{экс}$	σ_θ^{B1}	σ_θ^{B2}	погр. вар.1	погр. вар.2
1	Х-52	449,3	586,4	0,3895	180	372	363,03	370,56	2,41025	0,3867
2	--------	449,3	593,5	0,3895	111	406	383,5	390,16	5,54095	3,9014
3	--------	428,9	574,4	0,6	179	249	265,32	270,48	6,55605	8,6261
4	--------	428,9	574,4	0,6	103,5	287	298,83	303,39	4,12269	5,7107
5	--------	448,6	564,6	0,8105	36	390	350,97	351,83	10,007	9,7866
	Среднее								5,72748	5,6823

Данные для труб из табл. 2: δ_c = 0,27 мм; 08Г2ФБТ (R = 710 мм, t = 15,7 мм); Х-70 (R = 710 мм, t = 16,0 мм); 13Г1С (R = 610 мм, t = 12,0 мм).

Таблица 2

№ п/п	Марка стали	σ_T, МПа	σ_B, МПа	d/t	l, мм	Разрушающее давление (МПА) и погрешности вычисления (в %)				
						$\sigma_\theta^{экс}$	σ_θ^{B1}	σ_θ^{B2}	погр. вар.1	погр. вар.2
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	AISI 304	150,92	426,3	0,5	75	161,7	157,3	169,2	2,73754	4,6406
2	–------	147	416,5	0,77	75	95,2	89,98	95,4	5,53663	0,1488
3	–------	140,14	408,66	0,9	50	52,7	54,8	57,1	3,95382	8,2372
4	–------	146,02	414,54	0,914	20	86	77,9	79,53	9,48442	7,5698
5	Среднее								5,4281	5,1491

Окончание табл. 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
6	Х-70	435,4	622	0,6	225	317	286,95	293,37	9,48053	7,4556
7	13Г1С	402,2	519	0,5417	150	274	241,66	246,64	11,8046	9,9841
8	08Г2ФБТ	535,5	653	0,5172	260	328	333,07	338,41	1,54592	3,1734
9	08Г2ФБТ	546,9	667	0,5414	260	323	322,94	328,11	0,01797	1,5822
10	08Г2БТ	483	600	0,694	222,5	232	223,11	226,36	3,83149	2,4327
11	Среднее								5,33611	4,9256

В табл. 1, 2 приведены расчеты по двум различным вариантам для функции $P(x)$. В первом варианте функция взята равной $P(x) = x^2$, во втором – равной $P(x) = x^4$. Используя такие таблицы для различных параметров трещины, можно решить обратную задачу, а именно найти критические параметры (глубину и длину) трещины для заданного кольцевого напряжения. Такая трактовка задачи даст возможность нормировать поверхностные трещины из соображений безопасной эксплуатации трубопроводов.

5. Практическое применение полученных результатов

Для широко распространенной низколегированной марки стали 17Г1С-У σ_T = 360 МПа, σ_B = 520 МПа, $\sigma_\theta = \sigma_T(\sigma_B)/n$, где $n = 2$ – коэффициент запаса, с помощью предложенного теоретического аппарата при решении данной задачи построены ниже приведенные табл. 3, 4 с раскрытием трещины δ_c = 0,12 мм и δ_c = 0,09 мм по двум вышеописанным вариантам.

Если трубопровод подвергался внешним неблагоприятным воздействиям (старение, температура, длительный эксплуатация), то процесс разрушения характеризуется снижением раскрытия трещины с δ_c = 0,12 мм до δ_c = 0,09 мм. Поэтому получаются другие размеры поверхностного дефекта (длина трещины уменьшается).

Таблица 3

d/t	Длина трещины 2*l*									
	50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
0,5	31,56	28,28	26,83	26,002	25,464	25,085	24,805	24,588	24,416	24,276
0,6	29,08	24,84	23,01	21,994	21,346	20,897	20,567	20,314	20,115	19,953
0,7	26,29	21,1	18,96	17,787	17,052	16,548	16,181	15,902	15,683	15,506

Таблица 4

d/t	Длина трещины 2*l*									
	50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
0,5	31,97	28,93	27,54	26,734	26,205	25,831	25,552	25,337	25,165	25,025
0,6	29,45	25,36	23,58	22,572	21,929	21,482	21,152	20,9	20,701	20,539
0,7	26,58	21,5	19,38	18,214	17,482	16,98	16,614	16,335	16,116	15,939

С точки зрения новой теоретической модели согласно полученным табл. 3 и 4, задавшись внутренним статическим давлением и коэффициентом запаса 2, были вычислены предельная относительная глубина d/t и длина трещины $2l$ (мм) при δ_c = 0,12 мм при различных кольцевых напряжениях σ_θ (180 МПа и 260 МПа).

180 МПа

Таблица 5

	Вар. 1	Вар. 2
d/t	0,7	0,7
$2l$	250	275

260 МПа

Таблица 6

	Вар. 1	Вар. 2
d/t	0,5	0,5
$2l$	250	350

при δ_c = 0,09 мм

Таблица 7

180 МПа

	Вар. 1	Вар.2
d/t	0,7	0,7
$2l$	180	220

Таблица 8

260 МПа

	Вар. 1	Вар.2
d/t	0,5	0,5
$2l$	200	250

Таким образом, с увеличением разрушающего кольцевого напряжения σ_θ труб большого диаметра с 180 МПа до 260 МПа относительная глубина d/t поверхностного дефекта снижается с 0,7 до 0,5 для обоих вариантов и значений раскрытия трещины δ_c. Когда δ_c снижается с 0,12 мм до 0,09 мм длина поверхностной трещины уменьшается с 250 до 200 мм по первому варианту и с 350 до 250 мм по второму варианту.

6. Выводы

1. Проведен теоретический анализ методом теории функций комплексного переменного Мусхелишвили по определению разрушающего кольцевого напряжения при вязком разрушении тонкостенных труб, сосудов давления с продольной поверхностной трещиной на основе раскрытия трещины. Показано хорошее соответствие новых теоретических формул и экспериментальных натурных гидравлических испытаний А. Даффи и российских ученых. Погрешность составила не более 6 %.

2. Предложена новая математическая модель распределения напряжений в нетто-сечении поверхностной трещины трубы на основе напряжения пластического течения $\bar{\sigma}$; коэффициента определяющего границу локализованной пластической зоны с учетом коэффициента поперечной деформации и деформационного упрочнения трубной стали.

3. Получены нормы отбраковки поверхностных трещин трубопроводов, сосудов давления, теплотрасс, водоводов, которые полезны при их диагностике и капитальном ремонте. Максимальная относительная глубина трещины равна 70% от толщины стенки трубы, а максимальная длина трещины равна 180 мм при коэффициенте запаса равного 2.

Работа поддержана грантом РФФИ 05-08-18179а.

Литература

1. Мусхелишвили Н.И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. – М. 1966. – 708 с.

2. Гудьер Дж. Математическая теория равновесных трещин – Разрушение. – М.: Мир, 1975. – Т.2. – С. 13–82.

3. Dugdale D.S. Yielding of steel sheets containing splits. // J. Mech. Phys. Solids. – 1960. – V. 8. – P. 100–104.

4. Duffy A.R., Eiber R.J., Maxey W.A. Recent work on flaw behavior in pressure vessels. // Symp. Frac. Toughness Concepts, UKAEA, England. – 1965.

5. Применение модели вязкого разрушения труб с осевым дефектом для анализа результатов натурных экспериментов / И.В. Орыняк, С.В. Ляшенко, В.М. Тороп, В.Н. Горицкий // Проблемы прочности. – 1996. – № 6. – С. 5–15.

6. Красовский А.Я., Красико В.Н. Трещиностойкость сталей магистральных трубопроводов. – Киев: Наук. думка, 1990. – 176 с.

7. Шабат Б.В. Введение в комплексный анализ. Ч.1. Функции одного переменного. – М: Лань, 2004.

Поступила в редакцию 17 июля 2006 г.

УДК 669.017.3

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ОХЛАЖДЕНИЯ НА СТРУКТУРУ НИЗКОУГЛЕРОДИСТОЙ ТРУБНОЙ СТАЛИ

Д.А. Пумпянский, М.А. Смирнов,
Л.Г. Журавлёв, И.Ю. Пышминцев

Дилатометрическим методом построена термокинетическая диаграмма распада переохлаждённого аустенита стали 05Г2МФБ и проанализировано влияние скорости охлаждения на её структуру. Полученные данные свидетельствуют, что в малоуглеродистой стали при формировании структуры в процессе непрерывного охлаждения существенную роль играют процессы перераспределения углерода между аустенитом и образующимися фазами.

В трубной промышленности широко используются низкоуглеродистые легированные стали с феррито-перлитной структурой. Их упрочнение в сочетании с высоким сопротивлением хрупкому разрушению достигается при применении контролируемой прокатки и легирования карбидообразующими элементами, обеспечивающими эффект дисперсионного твердения.

Перспективным направлением создания высокопрочных трубных сталей является переход от феррито-перлитной структуры к кристаллографически упорядоченной бейнитной структуре [1]. Высокий уровень прочности такой структуры в сталях с низким содержанием углерода в основном связан с небольшими размерами кристаллов бейнитной α-фазы и значительной плотностью дефектов кристаллического строения в этих кристаллах. При проведении контролируемой прокатки и других видов обработки оптимальная структура с бейнитной α-фазой может быть получена лишь при правильном подборе условий охлаждения в температурном интервале протекания фазовых превращений. В связи с этим является целесообразным проведение обстоятельных исследований влияния скорости охлаждения на фазовые превращения, структуру и свойства рассматриваемой группы сталей.

В настоящей работе изучали влияние скорости охлаждения на структуру и дилатометрические эффекты стали 05Г2МФБ, содержащей 0,07% C; 1,64% Mn; 0,23% Mo; 0,075% V и 0,053% Nb. Из листа, подвергнутого контролируемой прокатке, вырезали дилатометрические образцы диаметром 3,5 и длиной 50 мм. Исследование проводили на модернизированном дилатометре Шевенара. В процессе нагрева и охлаждения непосредственно фиксировалась температура образца, для чего к нему приваривалась тонкая хромель-алюмелевая термопара. На записываемую потенциометром термограмму специальным устройством наносились метки, соответствующие началу, приостановке и концу превращений. Далее термограммы перестраивались в координатах «температура – логарифм времени». Дилатограммы снимались после аустенитизации при 1000 °C с пятиминутной выдержкой, в результате которой формировалось зерно аустенита 8–9 балла. Средняя скорость охлаждения образцов в интервале 1000–300 °C варьировалась от 0,04 до 34,6 град/с. Их структура изучалась в оптическом и электронных просвечивающем и сканирующем микроскопах.

На основании данных дилатометрического и структурного анализа построена термокинетическая диаграмма распада переохлаждённого аустенита стали 05Г2МФБ (рис. 1). Она имеет вид, типичный для низкоуглеродистых легированных сталей. При охлаждении с малыми скоростями температурные интервалы диффузионного и бейнитного превращений разделены. При больших скоростях охлаждения оба превращения накладываются друг на друга по температурной шкале. Соответственно, на дилатометрических кривых при медленном охлаждении наблюдаются два участка увеличения объёма, связанного с $\gamma \rightarrow \alpha$-превращением, а при быстром охлаждении – один участок.

При охлаждении со скоростями 0,04–1,26 град/с распад переохлаждённого аустенита по диффузионному механизму, происходящий в интервале 780–580 °C, сопровождается формированием структуры полигонального (равноосного) феррита. Зёрна феррита, размер которых оценивается 11–12 баллами, имеют низкую плотность дислокаций (рис. 2, *а*). В феррите присутствуют дисперсные карбидные частицы размерами 0,1–0,04 мкм, часть из которых находится на дислокациях и большеугловых границах. Нагрев на 1000 °C приводит лишь к частичному растворению

карбидной фазы. По-видимому, несвязанные с дефектами кристаллического строения частицы – это карбиды, нерастворившиеся при аустенитизации, а также выделившиеся в аустените при охлаждении от 1000 °С до температурного интервала $\gamma \rightarrow \alpha$-превращения. Карбиды, находящиеся на дефектах кристаллического строения, в основном, образовались непосредственно в феррите.

Кроме феррита, при диффузионном превращении возникают небольшие участки выродившегося перлита, объёмное содержание которого не превышает 8%. Так как количество перлита невелико, его появление заметно не сказывается на ходе дилатометрической кривой. В связи с этим на термокинетической диаграмме штриховой линией выделена лишь предполагаемая область формирования этой структурной составляющей. Цементит в участках выродившегося перлита присутствует либо в виде коротких пластин, нередко разбитых на отдельные части, либо частиц округлой формы, находящихся на разных стадиях сфероидизации.

Особенность данной стали заключается в том, что комплексное легирование марганцем и молибденом существенно замедлило развитие диффузионного превращения. Даже при очень малых скоростях охлаждения (10^{-2} град/с) оно не протекает полностью. Непревращённая часть аустенита при переохлаждении до 520–400 °С претерпевает бейнитное превращение. Судя по величине дилатометрического эффекта, количество образующегося бейнита невелико (менее 10%). При электронномикроскопическом исследовании в структуре стали, подвергнутой медленному охлаждению, были обнаружены небольшие участки, имеющие строение верхнего бейнита, характерного для среднеуглеродистых сталей. На границах пластин (реек) с высокой плотностью дислокаций располагаются достаточно крупные частицы цементита (рис. 2, *б*). Появление такого бейнита не является удивительным, если учесть, что в процессе образования феррита непревращённая часть аустенита обогащается углеродом.

При скоростях охлаждения более 2,2 град/с развитие диффузионного превращения существенно тормозится, что проявляется в уменьшении количества полигонального феррита и в практически полном исчезновении перлита. В образцах, охлаждённых со скоростями 5–10 град/с, феррит присутствует в основном в виде отдельных мелких зёрен.

Подавление диффузионного превращения при ускоренном охлаждении сопровождается увеличением количества бейнитной структурной составляющей. Но в этом случае не наблюдается формирования верхнего бейнита, как это имело место при медленном охлаждении, а образуется характерная для низкоуглеродистых сталей бейнитная α-фаза реечной (игольчатой) и глобулярной морфологии [2]. Внутри кристаллов этой фазы наблюдается высокая плотность дислокаций (рис. 2, *в*). На границах и в объёме кристаллов присутствуют дисперсные карбидные частицы. Как и в случае феррита, надёжно идентифицировать карбиды, нерастворившиеся при аустенитизации и выделившиеся при охлаждении в аустенитной области или после $\gamma \rightarrow \alpha$-превращения, не представляется возможным.

На электронограммах, снятых с образцов, охлаждённых с высокими скоростями, появились рефлексы остаточного аустенита. Как известно, бейнитное превращение в низкоуглеродистых легированных сталях не идёт до конца. Непревращённый аустенит частично остаётся между кристаллами бейнитной α-фазы при охлаждении вплоть до комнатной температуры. Частично он может претерпевать мартенситное превращение. Образовавшийся мартенсит имеет реечную морфологию, а остаточный аустенит находится в виде тонких прослоек между рейками мартенсита. Участки (островки) с мартенситно-аустенитной структурой получили название М/А-составляющей [2].

Увеличение скорости охлаждения до 34,6 град/с не только исключает развитие диффузионного распада, но и приводит к частичному подавлению бейнитного превращения. В структуре стали появляется значительное количество мартенсита. Соответственно, дилатометрическая кривая охлаждения, начиная с 210 °С (точка $M_н$), фиксирует заметное увеличение объёма образца.

Необходимо подчеркнуть, что точка $M_н$, определённая при максимальной исследованной скорости охлаждения, лежит значительно ниже точки $M_н$* (см. рис. 1). Этот эффект обусловлен обогащением непревращённой части аустенита углеродом в процессе бейнитного превращения. Ориентировочные расчёты с учётом положения мартенситной точки $M_н$ показывают, что количество углерода в аустените, а значит, и в мартенсите может достигать 0,6%. Заметим, что в работе [1] в структуре сталей, близких по химическому составу к исследованной в настоящей работе, после контролируемой прокатки наблюдали образование двойникованного мартенсита. Последнее также свидетельствует о повышенном содержании углерода в этой фазе.

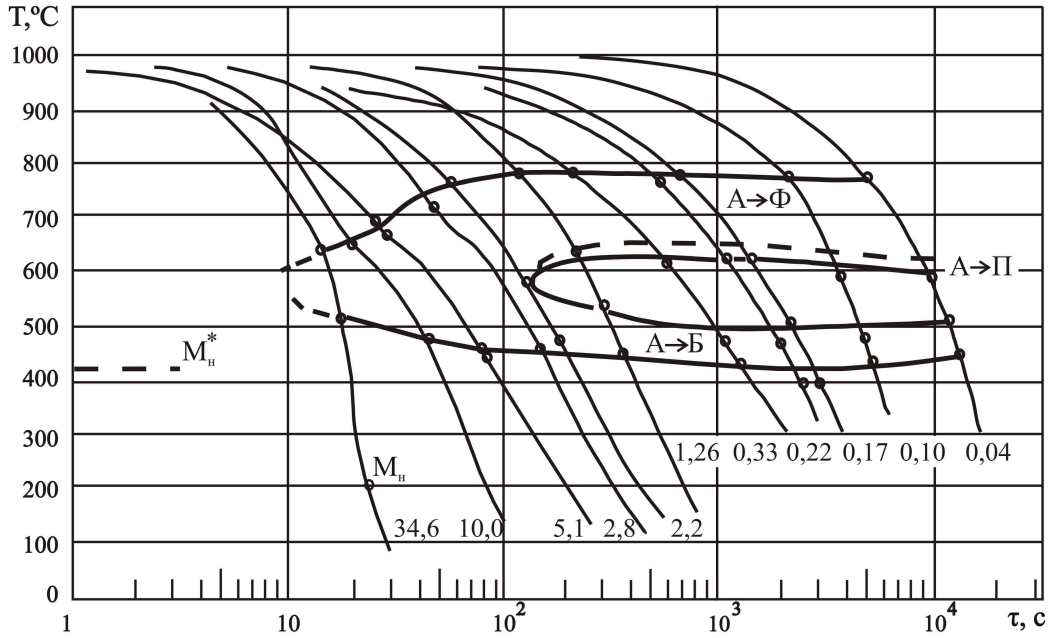
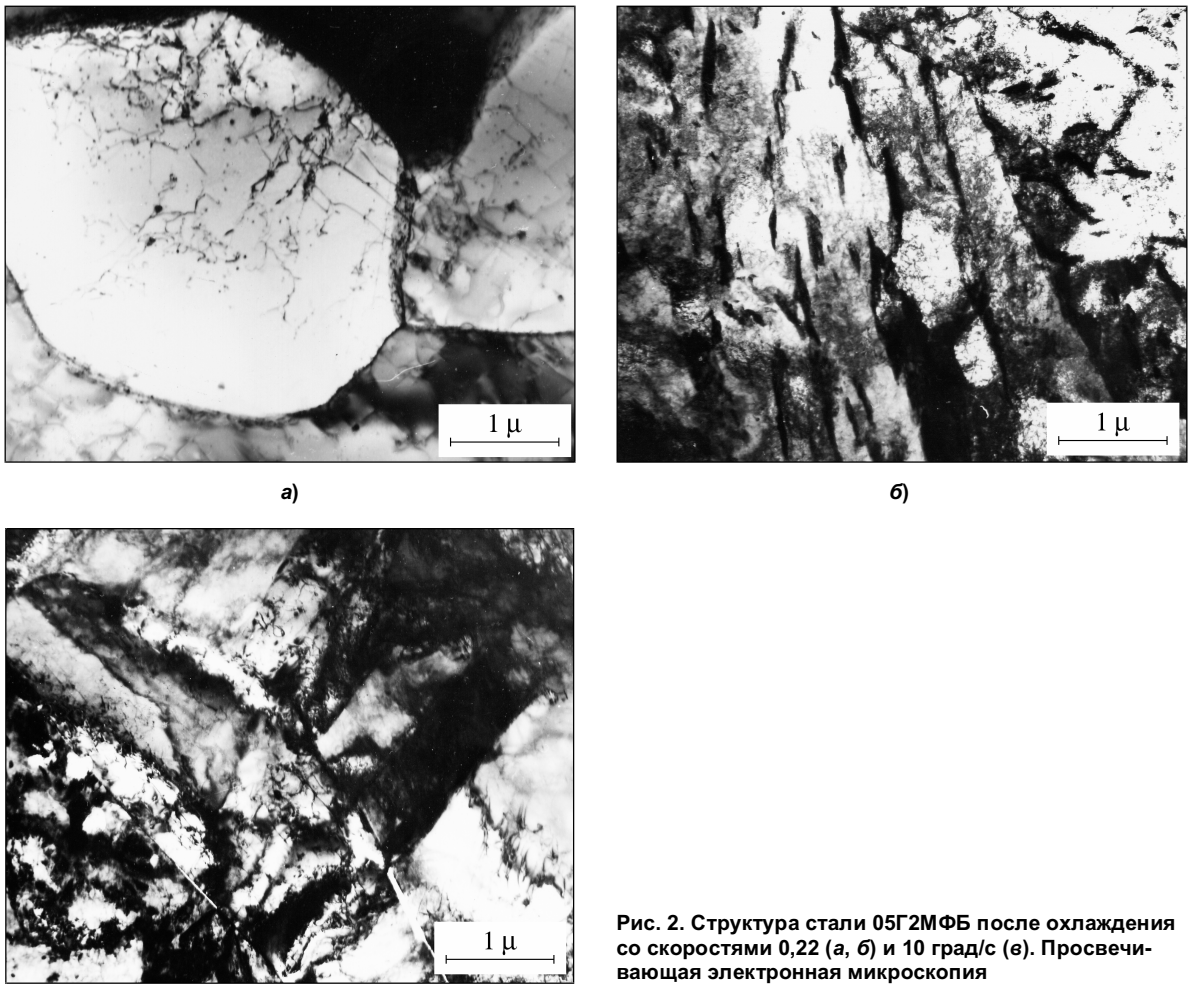


Рис. 1. Термокинетическая диаграмма распада переохлаждённого аустенита стали 05Г2МФБ. У кривых указана средняя скорость охлаждения. Точка $M_н^*$ получена расчётным путём



а) *б*)

в)

Рис. 2. Структура стали 05Г2МФБ после охлаждения со скоростями 0,22 (*а*, *б*) и 10 град/с (*в*). Просвечивающая электронная микроскопия

Таким образом, при анализе характера структуры низкоуглеродистых легированных сталей необходимо учитывать, что на её формирование при охлаждении из аустенитной области в существенной мере влияет перераспределение углерода между образующимися ферритом и бейнитной α-фазой с одной стороны и непревращённой частью аустенита с другой. Так, в стали 05Г2МФБ этот эффект обусловливает при малых скоростях охлаждения (порядка 0,1–0,01 град/с) образование верхнего бейнита, а при больших скоростях охлаждения приводит к возникновению мартенсита с повышенным содержанием углерода.

Литература

1. Металловедческие основы получения хладостойких трубных сталей путём высокотемпературной контролируемой прокатки / Л.И. Эфрон, В.И. Ильинский, А.В. Голованов, Ю.Д. Морозов // Сталь. – 2003. – № 6. – С. 69–72.

2. Krauss G., Thompson S.W. Ferritic Microstructures in Continuously Cooled Low- and Ultralow-Carbon Steels // ISIJ International. – 1995. – V. 35. – № 8. – P. 937–945.

Поступила в редакцию 30 июня 2006 г.

УДК 544.163.2

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПВДФ И ПРОДУКТОВ ЕГО ДЕГИДРОФТОРИРОВАНИЯ

Т.С. Сапожникова, А.А. Мирзоев, Л.А. Песин

В работе исследуется модификация электронной структуры поливинилиденфторида (ПВДФ) в процессе дегидрофторирования. Из первых принципов рассчитаны полная плотность состояний и парциальные плотности состояний фтора и углерода, определена ширина запрещенной зоны исследуемых молекул. Показано согласие результатов расчетов с имеющимися экспериментальными данными.

За последние полтора десятка лет возникло и бурно развивается новое направление – физика наноразмерных частиц и материалов, с которым связываются надежды на новый технологический скачок в микроэлектронике, материаловедении и биомеханике. При этом особое место занимают именно углеродные структуры благодаря их уникальным свойствам и широкой распространенности углерода. Но если для таких структур как нанотрубки и фуллерены определены оптимальные условия синтеза, то для линейной формы углерода (карбина) вопросы синтеза и идентификации в полной мере не решены до сих пор.

Наиболее доступным способом синтеза карбинов является дегидрогалогенирование галогенсодержащих полимеров [1–3], в частности поливинилиденфторида (ПВДФ) [4], но экспериментальные работы не позволяют полностью выяснить природу протекающих при этом процессов. Существуют также работы, в которых проводится расчет электронных, оптических и других свойств карбинов полуэмпирическими [5, 6] и первопринципными методами [7–9]. Однако теоретического исследования образования карбинов в процессе дегидрогалогенирования не проводилось. В данном контексте можно рассматривать работу [4], в которой предложена математическая модель радиационной деградации ПВДФ, согласно которой проводились наши расчеты, а также работу [10], в которой проведен расчет электронной структуры (а именно полной плотности состояний) ПВДФ и частично деградированного ПВДФ.

Целью данной работы является исследование модификации электронной структуры ПВДФ по мере карбонизации и возможности идентификации карбинов по данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и NEXAFS-спектрам.

Квантово-химические расчеты осуществлялись с использованием пакета программ GAMESS [11] на вычислительном кластере МВС-100 кафедры общей и теоретической физики Южно-Уральского государственного университета. Расчеты проводились методом функционала плотности (DFT) в базисе 6-31G. Для этого оптимизировалась геометрия молекулы ПВДФ, состоящей из пяти мономеров и оканчивающаяся метиловыми группами. Выбор метода DFT для проведения расчетов обусловлен тем, что он, в отличие от метода Хартри-Фока, позволяет достаточно хорошо воспроизводить электронный спектр свободных состояний и ширину запрещенной зоны. Процедура дегидрофторирования выполнялась согласно модели, предложенной в работе [4]. Согласно этой модели, карбонизация происходит в результате отщепления атомов фтора и водорода, образующих молекулы HF. Данный процесс осуществляется лишь при наличии определенной комбинации атомов. Для моделирования такого процесса с помощью генератора случайных чисел проводилось «возбуждение» атомов углерода в молекуле ПВДФ. В случае если возбужденный атом входит в состав группы CF_2 (CH_2) и в соседнем звене имеется группа CH_2 (CF_2) или если возбужденный атом входит в состав группы CF (CH) и в соседнем звене имеется группа CH (CF), происходит отщепление молекулы HF. Следует отметить, что исследование фотодеградации ПВДФ другими авторами [10, 12] также указывает на то, что под воздействием синхротронного излучения происходит разрыв именно связей C–F и C–H и не происходит разрыва связей C–C. По результатам оптимизации геометрии строились энергетические спектры молекул, и проводился их анализ.

Проведен расчет электронной структуры молекул с содержанием фтора 100% (ПВДФ), 70%, 50%, 20%, 10%, а также полиина (0%). Это позволило построить зависимости полной плотности состояний и парциальных плотностей свободных состояний фтора и остовного уровня углерода, а также определить ширину запрещенной зоны данных молекул в зависимости от степени дегидрофторирования.

Плотности свободных состояний фтора (рис. 1) сравнивались с NEXAFS-спектрами атомов фтора пленки ПВДФ, подвергшейся воздействию синхротронного излучения (рис. 2). Цифрами показано время экспозиции образца. Спектры получены на российско-германском канале электронного накопительного кольца в Берлине (BESSY). Из сравнения спектров видно, что результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными: расчеты воспроизводят дублетную структуру спектров и перераспределение интенсивности между пиками дублета по мере радиационной карбонизации.

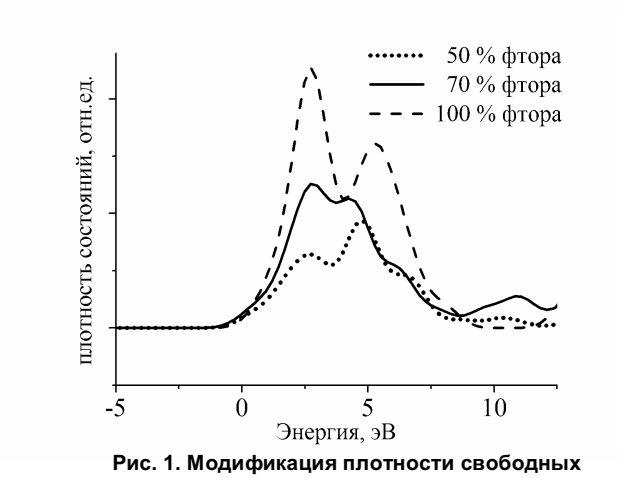


Рис. 1. Модификация плотности свободных состояний атомов фтора по мере карбонизации ПВДФ

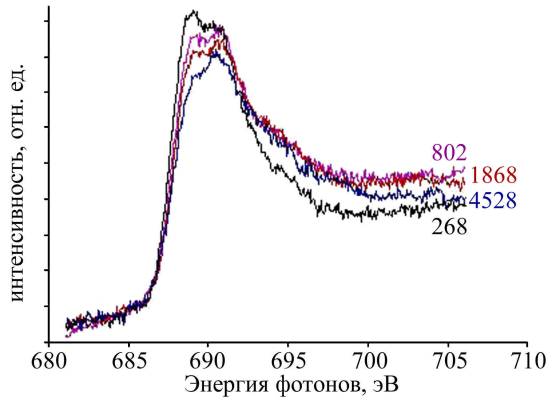


Рис. 2. NEXAFS-спектры атомов фтора пленки ПВДФ

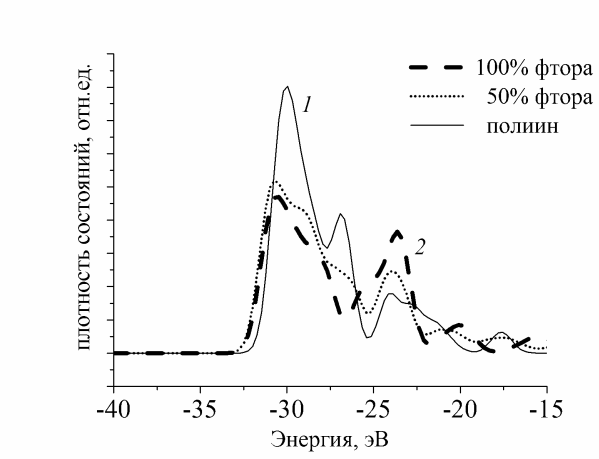


Рис. 3. Плотность состояний остовного уровня атомов углерода ПВДФ, полиина и промежуточного соединения

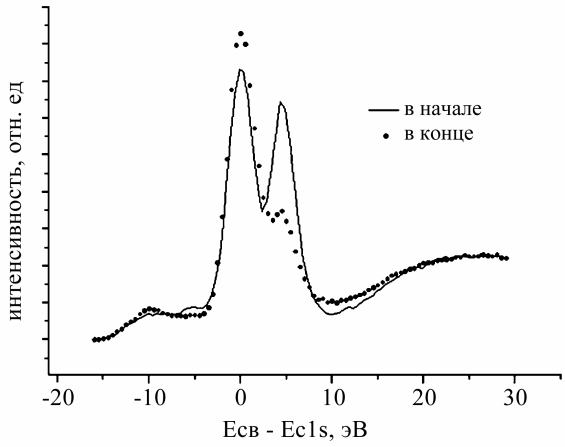


Рис. 4. Модификация спектров остовного уровня атомов углерода ПВДФ в процессе радиационной карбонизации

Плотность состояний остовного уровня углерода (рис. 3) сравнивалась с РФЭС, регистрируемыми при радиационной карбонизации ПВДФ (рис. 4). Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными: наблюдается рост интенсивности пика 1 дублета и снижение интенсивности пика 2.

Также в результате расчетов установлено, что по мере дегидрофторирования ширина запрещенной зоны уменьшается. Согласно нашим расчетам, ширина запрещенной зоны для ПВДФ составляет 9,3 эВ, а для полиина – 2 эВ. Это согласуется с экспериментально наблюдаемыми ростом проводимости и изменением цвета образца при дегидрофторировании [4].

Таким образом, показано, что применяемая методика моделирования ПВДФ и его карбонизованных производных реалистически воспроизводит их электронные свойства и может быть использована для объяснения существующих и предсказания новых экспериментально наблюдаемых закономерностей процесса дегидрофторирования.

Литература

1. Kijima M. *et al.* Synthesis of conjugated polymer with carbynoid structure by dehydrochlorination of chlorinated polyacetylene film // Synthetic Metals. – 1999. – Vol. 101. – P. 59–60.

2. Evsyukov S.E., Thomas B., Heimann R.B. Chemical dehydrohalogenation of poly(ethylene-*alt*-chlorotrifluoroethylene) // Materials Chemistry and Physics. – 2000. – Vol. 66. – P. 34–40.

3. Vointseva I.I. *et al.* Chemical dehydrochlorination of polytrichlorobutadienes – a new route to carbynes // Eur. Polim. J. – 1996. – Vol. 32. – № 1. – P. 61–68.

4. Voinkova I.V. *et al.* A model of radiation-induced degradation of the poly(vinylidene fluoride) surface during XPS measurements // Polymer Degradation and Stability. – 2005. – Vol. 89. – P. 471–477.

5. Scemama A. *et al.* Semi-empirical calculation of electronic absorption wavelengths of polyynes, monocyano- and dicyanopolyynes. Predictions for long chain compounds and carbon allotrope carbine // Chemical Physics Letters. – 2002. – Vol. 361. – P. 520–524.

6. Hino S. *et al.* Electronic structures of cumulene type carbine model compounds: a typical example of one-dimensional quantum well // Chemical Physics Letters. – 2003. – Vol. 372. – P. 59–65.

7. Karpfen A. Ab initio studies on polymers I: The linear infinite polyyne // J. Phys. C*:* Solid State Phys. – 1979. – Vol. 12. – P. 3227–3237.

8. Weimer M. *et al.* Electronic and optical properties of functionalized carbon chains with the localized Hartree–Fock and conventional Kohn–Sham methods // Chemical Physics. – 2005. – Vol.309. – P. 77–87.

9. El-Barbary A.A. *et al.* Electron spectroscopy of carbon materials: experiment and theory // Journal of Physics: Conference Series. – 2006. – Vol. 26. – P. 149–152.

10. Morikawa E., Choi J., Manohara H.M. Photoemission study of direct photomicromachining in poly(vinylidene fluoride) // J. Appl. Phys. – 2000. – Vol. 87. – № 8. – P. 4010–4016.

11. Shmidt M.W. *et al.* General atomic and molecular electronic structure system // J. Comp. Chem. – 1993. – Vol. 14. – № 11. – P. 1347–1363.

12. Okudaira K. K. *et al.* Photodegradation of poly(tetrafluoroethylene) and poly(vinylidene fluoride) thin films by inner shell excitation // Surface Review and Letters. – 2002. – Vol. 9. – № 1. – P. 335–340.

Поступила в редакцию 7 сентября 2006 г.

УДК 539. 25

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НЕОДНОРОДНЫХ ВОЛН С ПЛОСКОЙ ГРАНИЦЕЙ

Х.Б. Толипов

Анализ характеристик рассеянного волнового поля является классической задачей геофизики, ультразвуковой дефектоскопии, механики разрушения и др. При падении неоднородной волны на наклонную плоскость возникают как поверхностные, так и расходящиеся объемные волны, структура которых зависит от углового положения плоскости. Однако несмотря на продолжительное время изучения этих волн до сих пор некоторые вопросы остаются невыясненными. В ходе исследований в дополнение к известным свойствам поверхностных волн были выявлены новые особенности, характерные при распространении этих волн в твердых телах. Полученное в явном виде решение описывает как поле поверхностных волн, структура которого совпадает с известными экспериментальными данными, так и поле объемных волн, вносящих заметный вклад в энергетику процесса.

В публикуемом сообщении получено решение по определению структуры рассеянного поля при взаимодействии неоднородной поверхностной волны с препятствием (в данном случае – с наклонной плоскостью).

Начиная с пионерских экспериментальных работ [1, 2], интенсивно ведется изучение этого явления. Несмотря уже на полувековую историю исследования, вопрос взаимодействия поверхностных волн с плоскостью до сих пор остается открытым. Трудности при решении этой задачи связаны как со сложностью акустических процессов, происходящих вблизи излома поверхности, так и с применением сложного математического аппарата. Однако, как показано ниже, причины этих трудностей чисто физические и заложены в самой постановке задачи.

Допустим, что с наклонной плоскостью связана система координат (x, z), которая может быть получена путем поворота исходной системы координат (ε, η) на угол θ (рис. 1).

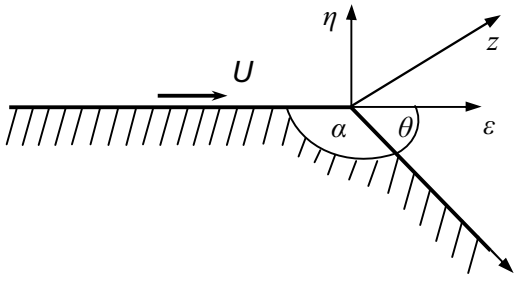


Рис. 1. Система координат

По нормали к линии раздела поверхностей распространяется поверхностная акустическая волна, пространственная структура которой считается известной:

$$\Phi_r = \exp[i(k_r\varepsilon - \omega t) - q_r\eta],$$

$$\psi_r = p\exp[i(k_r - \omega t) - s_r\eta],$$

здесь $q_r = \sqrt{k_r^2 - k_l^2}$, $s_r = \sqrt{k_r^2 - k_t^2}$, $p = -\sqrt{\frac{q_r}{s_r}}i$, $k_l = \frac{\omega}{c_l}$,

$k_t = \frac{\omega}{c_t}$, $k_r = \frac{\omega}{c_r}$, c_l, c_t, c_r – скорости распространения продольных, поперечных и поверхностных волн соответственно, ω – круговая частота.

При установившемся режиме колебаний, который и рассматривается дальше, зависимость всех величин от времени носит гармонический характер. Общий множитель $\exp(-i\omega t)$ в дальнейших выкладках опускается.

Структура профиля волновых возмущений на наклонной плоскости будет зависеть от угловой координаты θ и толщины слоя локализации поверхностной волны. Если набегающая на излом поверхности волна неоднородна по одной координате, направленной в глубь среды, то волновые возмущения на наклонной плоскости будут неоднородны уже по двум координатам. Взаимодействие всех неоднородных структур в двумерно-периодической системе колебаний должна

учитываться с использованием линейных представлений в пространстве возможных решений задачи.

Закономерности формирования акустического поля рассеянных от плоскости волн определяются неоднородной структурой профиля волновых возмущений, зависящей от угла наклона плоскости. С увеличением угла наклона уменьшается проекция волнового вектора падающей волны k_x на плоскость и при $k_x < k_t$ (k_t – волновой вектор сдвиговой волны) начинает формироваться объемная волна. Из физических соображений следует, что амплитуда прошедшей на плоскость поверхностной волны начнет уменьшаться с возникновением объемной, уносящей энергию в глубь среды.

Таким образом, проведенный физический анализ позволяет выделить две характерные области. При углах $\theta < \theta_0$ падающая поверхностная волна полностью проходит на наклонную плоскость с неизменной пространственной структурой. Во второй области $\theta > \theta_0$ происходит расщепление движений колебаний на объемную волновую компоненту, которая вносит заметный вклад в энергетику процесса, и пограничное движение поверхностных волн вдоль плоскости.

Рассеянные волны в силу неоднородности возмущающих сил представимы в виде набора спектра пространственных гармоник Фурье. Можно сказать, что наличие этой неоднородности приводит к появлению поверхностных и объемных волн (сдвиговых и продольных) с другими направлениями волнового вектора k, соответственно решение будет представлено линейной комбинацией волн с различными направлениями k.

Полученные ниже выражения справедливы для углов $\theta > \theta_0$, поскольку при $\theta < \theta_0$, как было замечено выше, имеет место вырождение задачи.

Решение этой задачи должно удовлетворять уравнению движения:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + k_l^2 \Phi = 0,$$
$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + k_t^2 \Psi = 0,$$

и граничным условиям: компоненты тензора напряжений на наклонной плоскости, создаваемые как падающей волной, так порождаемой ею волнами должны быть равны нулю:

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} + \sigma_{zz}^o &= 0, \\ \sigma_{xz} + \sigma_{xz}^o &= 0. \end{aligned} \qquad (1)$$

Постановку задачи замыкает условие излучения на бесконечности, вытекающего из принципа предельного поглощения [1].

Этот подход к решению задачи является классическим.

Используя формулы перехода от системы (η , ε) к системе (x, z):

$$x = \eta \cos\theta - \varepsilon \sin\theta \text{ ,}$$
$$z = \eta \sin\theta + \varepsilon \sin\theta \text{ ,}$$

получим для касательных и нормальных компонент тензора напряжений, вызываемых падающей волной, выражения:

$$\sigma_{xz}^o = \sigma_{xz}^{(x)} \sin(\theta) + \sigma_{zz}^{(z)} \cos(\theta),$$
$$\sigma_{zz}^o = \sigma_{xz}^{(z)} \sin(\theta) + \sigma_{zz}^{(x)} \cos(\theta),$$

с обозначениями:

$$\sigma_{xz}^{(x)} = P(k_{1x}) \exp(ik_{1x}x) + pQ(k_{2x}) \exp(ik_{2x}x),$$
$$\sigma_{zz}^{(x)} = R(k_{1x}) \exp(ik_{1x}x) + pS(k_{2x}) \exp(ik_{2x}x),$$
$$\sigma_{xz}^{(z)} = P(k_{1z}) \exp(ik_{1z}z) + pQ(k_{2z}) \exp(ik_{2z}z),$$
$$\sigma_{zz}^{(z)} = R(k_{1z}) \exp(ik_{1z}z) + pS(k_{2z}) \exp(ik_{2z}z),$$
$$P(k_i) = 2k_i \sqrt{k_l^2 - k_i^2} \text{ , } Q(k_i) = 2k_i^2 - k_t^2 \text{ ,}$$
$$R(k_i) = 2k_t^2 - k_i^2 \text{ , } S(k_i) = -2k_i \sqrt{k_t^2 - k_i^2} \text{ , } i = 1x, 1z, 2x, 2z \text{ .}$$

В этих выражениях проекции продольной и сдвиговой составляющих волнового вектора падающей волны на сопутствующие оси координат x и z

$$k_{1x}(\theta)=k_r\cos\theta+i\sqrt{k_r^2-k_l^2}\sin\theta,\ k_{2x}(\theta)=k_r\sin\theta+i\sqrt{k_r^2-k_l^2}\cos\theta,$$

$$k_{1z}(\theta)=k_r\cos\theta+i\sqrt{k_r^2-k_t^2}\sin\theta,k_{2z}(\theta)=k_r\sin\theta+i\sqrt{k_r^2-k_t^2}\cos\theta$$

выражаются в комплексном виде.

Решение поставленной задачи ищем в виде бесконечного ряда плоских волн:

$$\Phi=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi^*(k)e^{-ikx}dk\ ,\psi=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(k)e^{-ikx}dk \qquad (2)$$

Прямая подстановка (2) в граничные условия (1) приводит к алгебраической системе уравнений для определения потенциалов.

Применение обратного преобразования Фурье, приводит к соотношениям, связывающие комплексные амплитуды потенциалов с углом клина:

$$\Phi=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{\left[\left(\frac{P(k_{1x})}{k-k_{1x}}-p\frac{Q(k_{1x})}{k-k_{2x}}\right)S(k_r)+\left(\frac{R(k_{1x})}{k-k_{1x}}-p\frac{S(k_{2x})}{k-k_{2x}}\right)Q(k_r)\right]}{4k^2qs-(k^2+s^2)^2}\cos\theta+\right.$$

$$\left.+\frac{\left[\left(\frac{P(k_{1z})}{k-k_{1z}}-p\frac{Q(k_{2z})}{k-k_{2z}}\right)S(k_r)+\left(\frac{R(k_{1z})}{k-k_{1z}}-p\frac{S(k_{2z})}{k-k_{2z}}\right)Q(k_r)\right]}{4k^2qs-(k^2+s^2)^2}\sin\theta\right\}\exp(qz)dk,$$

$$\psi=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{\left[\left(\frac{P(k_{1x})}{k-k_{1x}}-p\frac{Q(k_{1x})}{k-k_{2x}}\right)R(k_r)+\left(\frac{R(k_{1x})}{k-k_{1x}}-p\frac{S(k_{2x})}{k-k_{2x}}\right)P(k_r)\right]}{4k^2qs-(k^2+s^2)^2}\cos\theta+\right.$$

$$\left.+\frac{\left[\left(\frac{P(k_{1z})}{k-k_{1z}}-p\frac{Q(k_{2z})}{k-k_{2z}}\right)R(k_r)+\left(\frac{R(k_{1z})}{k-k_{1z}}-p\frac{S(k_{2z})}{k-k_{2z}}\right)P(k_r)\right]}{4k^2qs-(k^2+s^2)^2}\sin\theta\right\}\exp(sz)dk. \qquad (3)$$

Представление (3) дает точную волновую картину во всем пространстве, описывающее как поле объемных волн, так и поверхностных.

На плоскости комплексного переменного k подынтегральные функции в (3) имеют ряд особых точек: полюсы, соответствующие распространению поверхностных волн, точки ветвления k_t, k_l. Методы выбора пути интегрирования и приемы вычисления аналогичных интегралов хорошо известны в акустике [3].

Применение метода перевала к интегральному представлению решения (3) приводит к выражениям для диаграммы направленности расходящихся объемных волн:

$$U_l=\sqrt{\frac{2\pi}{k_l\rho}}\frac{\cos^2\gamma}{k_l^3D_l}\left[\left(p\frac{2k_{2x}^2-k_t^2}{k_l\sin\gamma-k_{2x}}-\frac{2k_{1x}\sqrt{k_l^2-k_{1x}^2}}{k_l\sin\gamma-k_{1x}}\right)2k_r\sqrt{k_r^2-k_t^2}+\right.$$

$$\left.+\left(p\frac{2k_{2x}\sqrt{k_t^2-k_{2x}^2}}{k_l\sin\gamma-k_{2x}}+\frac{2k_{1x}{}^2-k_t^2}{k_l\sin\gamma-k_{1x}}\right)\left(2k_r^2-k_t^2\right)\right]\exp(ik_l\rho-i\frac{\pi}{4}),$$

$$U_t = \sqrt{\frac{2\pi}{k_t\rho}}\frac{\cos^2\gamma}{k_\ell^3 D_t}\left[\left(p\frac{2k_{2x}^2-k_t^2}{k_t\sin\gamma-k_{2x}}-\frac{2k_{1x}\sqrt{k_l^2-k_{1x}^2}}{k_t\sin\gamma-k_{1x}}\right)2k_r\sqrt{k_r^2-k_t^2}+\right.$$

$$\left.+\left(p\frac{2k_{2x}\sqrt{k_t^2-k_{2x}^2}-k_{2x}^2}{k_t\sin\gamma-k_{2x}}+\frac{2k_{1x}^2-k_t^2}{k_t\sin\gamma-k_{1x}}\right)\left(2k_r^2-k_t^2\right)\right]\exp(ik_t\rho-i\frac{\pi}{4}),$$

где $D_l = 4\sin^2\omega\cos^2\omega\sqrt{\sin^2\omega-\varepsilon^2}-(2\sin^2\omega-1)^2$, $D_t = 4\sin^2\gamma\cos^2\gamma\sqrt{\sin^2\gamma-\varepsilon^2}-(2\sin^2\gamma-\varepsilon^2)^2$, $\varepsilon = k_t/k_l$. Здесь γ – азимутальный угол, отсчитываемый от оси z.

Амплитуда смещений возрастает как для продольных волн (кривая *1*), так и для сдвиговых (кривая *2*) по мере уменьшения угла излома, достигая максимума при угловой координаты плоскости близких к 60° (рис. 2), а затем уменьшается до нуля. Объемные волны для приведенного дюралюминиевого материала возникают при угловой координате $\theta_0 = 15°$.

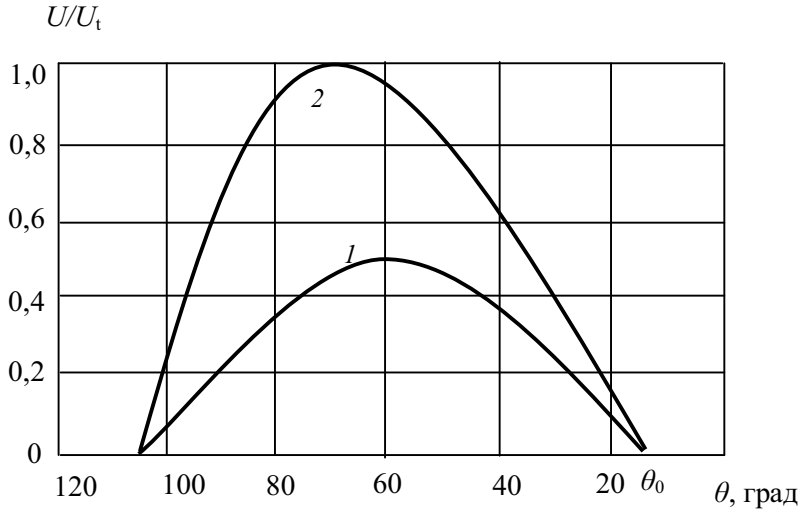


Рис. 2. Распределение амплитуд смещений в объемных волнах в зависимости от угла клина. *1* – продольные волны, *2* – сдвиговые волны

Максимумы смещений в объемных волнах у продольных (рис. 3а) и поперечных (рис. 3б) лежат в направлении азимутального угла 30°. При уменьшении угла излома происходит как изменение амплитуды смещений, так и небольшое смещение максимума диаграммы направленности.

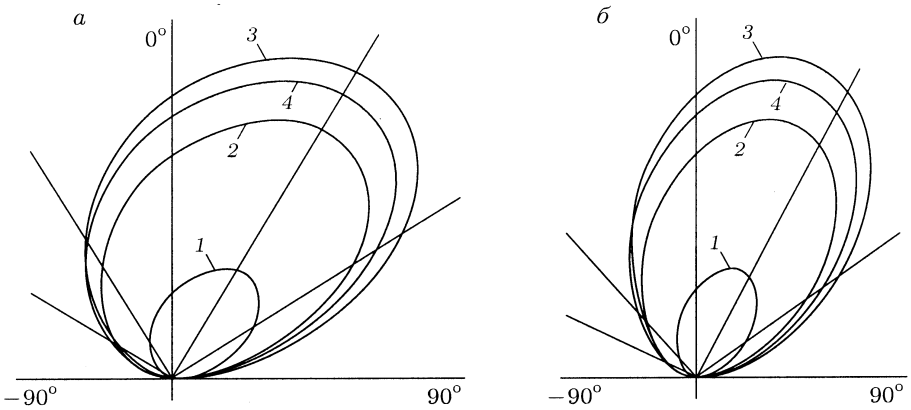


Рис. 3. Диаграмма направленности продольных (а) и сдвиговых (б) волн при различных углах клина.
1 – 150°, *2* – 140°, *3* – 120°, *4* – 100°

Рассмотрим важный с точки зрения понимания физических процессов – отражение от плоскости, составляющей прямой угол с поверхностью (рис. 4).

Поверхностная волна падает на плоскость по нормали, а максимальное смещение в отраженной объемной волне приходится на угол, примерно равный θ_0 (см. рис. 4). Это соответствует простым физическим представлениям о том, что направление упругой энергии не совпадает с направлением волнового фронта. Угол сноса между групповой и фазовой скоростью определяется соотношением: $\theta_0 = \arccos c_t/c_r$.

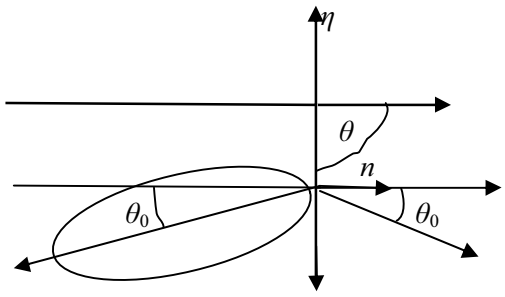


Рис. 4. Распределение амплитуд смещений в объемных волнах при падении на прямоугольный клин

Гармоники с $k = k_r$, создадут поле поверхностных, прошедших на наклонную поверхность волн, которые описываются вкладом вычетов, определяемыми полюсами в подынтегральном выражении:

$$\Phi = \left\{ \frac{\left[\left(\frac{P(k_{1x})}{k_r - k_{1x}} - p\frac{Q(k_{1x})}{k_r - k_{2x}}\right)S(k_r) + \left(\frac{R(k_{1x})}{k_r - k_{1x}} - p\frac{S(k_{2x})}{k_r - k_{2x}}\right)Q(k_r)\right]}{D(k_r)}\cos\theta + \right.$$

$$\left. + \frac{\left[\left(\frac{P(k_{1z})}{k_r - k_{1z}} - p\frac{Q(k_{2z})}{k_r - k_{2z}}\right)S(k_r) + \left(\frac{R(k_{1z})}{k_r - k_{1z}} - p\frac{S(k_{2z})}{k_r - k_{2z}}\right)Q(k_r)\right]}{D(k_r)}\sin\theta \right\} \exp(sz)$$

$$\psi = \frac{1}{2\pi}\left\{ \frac{\left[\left(\frac{P(k_{1x})}{k - k_{1x}} - p\frac{Q(k_{1x})}{k - k_{2x}}\right)R(k_r) + \left(\frac{R(k_{1x})}{k - k_{1x}} - p\frac{S(k_{2x})}{k - k_{2x}}\right)P(k_r)\right]}{D(k_r)}\cos\theta + \right.$$

$$\left. + \frac{\left[\left(\frac{P(k_{1z})}{k - k_{1z}} - p\frac{Q(k_{2z})}{k - k_{2z}}\right)R(k_r) + \left(\frac{R(k_{1z})}{k - k_{1z}} - p\frac{S(k_{2z})}{k - k_{2z}}\right)P(k_r)\right]}{D(k_r)}\sin\theta \right\} \exp(sz),$$

где $D(k_r) = -8k_r qs + 4k_r^3\left(\frac{q}{s} + \frac{s}{q}\right) - 8k_r\left(2k_r^2 - k_t^2\right)$.

Гармоники с $k_r > k > k_t$ описывают волны, скорости которых стремятся к скорости поверхностной волны по двум причинам. Во-первых, в твердых телах на границе сред происходит взаимная трансформация продольных волн в сдвиговые. Поэтому при распространении поверхностной волны, состоящей из сдвиговых и продольных составляющих, скорость волны будет постепенно падать, так как сдвиговая волна движется медленнее продольной. Во-вторых, с уменьшением скорости волны толщина пограничного волнового слоя растет. При этом происходит перестройка его пространственной структуры. Это ведет к тому, что плотность энергии волны снижается, рассредоточиваясь по большему объему. Скорость волны монотонно будет уменьшаться до тех пор, пока скорости продольной и сдвиговой составляющих не выровняются соответственно скорости поверхностной волны. Этот эффект является специфическим в твердых телах и не имеет аналогов в других средах.

Независимость волнового вектора от углового параметра плоскости свидетельствует о вырождении задачи.

Картина волн, возбуждаемых падающей неоднородной волной в алюминии, согласуется с приводимыми расчетами (опытные данные из работы [2], получены для дюралюминиевого клина) (рис. 5).

Как показывает анализ, амплитуда (см. рис. 5) прошедшей волны на плоскость для вырожденного случая ($\theta < \theta_0$) остается неизменной, а для другого – носит сложный характер, являясь результатом совместного действия и конкуренции нормальных и сдвиговых составляющих волновых возмущений, вызываемых падающей волной.

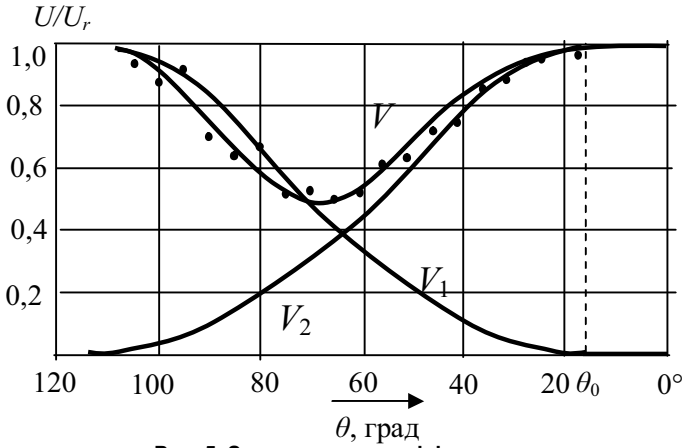


Рис. 5. Зависимости коэффициентов прохождения волны на плоскость от угла θ

При малых углах θ основной вклад в формирование пространственной структуры рассеянного акустического поля вносят касательные составляющие возмущающих сил (кривая V_1). С увеличением угла θ вклад этих сил падает, но в то же время увеличивается влияние нормальной составляющей (кривая V_2), монотонно достигающей максимума. Характер эволюции пространственной структуры поля существенно зависит от углового положения плоскости.

В данном сообщении получено решение задачи дифракции поверхностных волн на наклонной плоскости. Выявлены физические аспекты возникновения поля поверхностных и объемных волн, вызываемых падением на плоскость неоднородной волны. Трансформация первичной волны в объемные является основным механизмом, определяющим потери энергии колебаний при переходе поверхностной волны на наклонную плоскость.

Определено, что азимутальное направление максимума поля рассеянных объемных волн определяется волновым вектором фазовой скорости поверхностной волны, который не совпадает по фазе с волновым вектором групповой.

Литература

1. De Bremaecker J. Cl. Rayleigh wave propagation in elastic wedge // Geophysics. – 1958. – V. 23. – P. 253.

2. Викторов И.А. О влиянии несовершенств поверхности на распространение рэлеевских волн // ДАН СССР. – 1958. – Т. 119. – № 5. – С. 463–465.

3. Ворович И.И., Бабешко В.А. Динамические смешанные задачи теории упругости для неклассических областей. – М.: Наука, 1979. – 319 с.

Поступила в редакцию 27 сентября 2006 г.

УДК 521.52.17

МЕТОД ПАРАЛЛЕЛЬНОГО СИМПЛЕКТИЧЕСКОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ МАЛЫХ ТЕЛ СОЛНЕЧНОЙ СИСТЕМЫ

Е.А. Чегодаева

В статье предложен новый метод параллельного симплектического интегрирования уравнений движения для малых тел Солнечной системы, позволяющий использовать для решения небесно-механических задач кластеры и суперкомпьютеры.

Задачи, связанные с решением задачи N тел, – это сложные математические задачи, требующие применения эффективных численных методов и огромных компьютерных мощностей. Начиная со статьи Висдома и Холмана [4], симплектические методы стали популярным инструментом решения таких задач. Симплектические интеграторы являются наиболее быстрыми среди интеграторов N тел, а также имеют достаточно большую точность, что делает их подходящими для широкого спектра проблем динамической астрономии. Для наиболее эффективного использования симплектических интеграторов в статье предложен метод распараллеливания интегрирования, позволяющий производить вычисления на кластерах и суперкомпьютерах.

Симплектическое интегрирование проводится отдельно для планет и отдельно для частиц. Запишем гамильтониан для системы N тел в инерциальной системе отсчета

$$H(\vec{q}_i, \vec{p}_i) = \sum_{i=0}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} - G\sum_{i=0}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N} \frac{m_i m_j}{|\vec{q}_i - \vec{q}_j|}, \tag{1}$$

где $\vec{q}_i$ – обобщенные координаты, $\vec{p}_i$ – обобщенные импульсы, m_i – масса i-го тела, $i = 0$ соответствует Солнцу. Для планет будем использовать координаты Якоби. Обозначим координаты Якоби штрихом, первая координата Якоби $\vec{x}_0^{\,'}$ – центр масс. Тогда

$$\vec{x}_i^{\,'} = \vec{q}_i - \vec{X}_{i-1}, \tag{2}$$

где $\vec{X}_i$ определяет местоположение центра масс i тел

$$\begin{aligned} \vec{X}_i &= \frac{1}{\eta_i}\sum_{j=0}^{i} m_j \vec{q}_j, \\ \eta_i &= \sum_{j=0}^{i} m_j. \end{aligned} \tag{3}$$

Тогда (1) перепишем в виде

$$H = H_{\text{kepl}} - H_{\text{inter}}, \tag{4}$$

где

$$H_{\text{kepl}} = \sum_{i=1}^{n-1}\left(\frac{\vec{p}_i^{\,'2}}{2m_i} - \frac{Gm_i m_0}{\vec{r}_i^{\,'}}\right), \tag{5}$$

$$H_{\text{inter}} = \sum_{i=1}^{n-1} Gm_i m_0\left(\frac{1}{\vec{r}_i^{\,'}} - \frac{1}{\vec{r}_{i0}}\right) - \sum_{0<i<j}^{n} \frac{Gm_i m_j}{\vec{r}_{ij}}. \tag{6}$$

Интегрирование планет происходит с постоянным шагом по времени по схеме интегратора второго порядка $S_2(\tau)$, и для каждой частицы проводится дополнительное вычисление координат планет (Чегодаева [3]).Для решения задач связанных с кометами, астероидами и другими малыми телами Солнечной системы более удобен интегратор с переменным временным шагом Емельяненко [1].

Саха, Стадель и Тремэйн [2] показали, что параллельный алгоритм основанный на распараллеливании уравнений движении дает очень небольшую выгоду из-за больших затрат на обмене данными между потоками. Поэтому в данном методе использовалась простая, но эффективная схема, представленная на рисунке. Поскольку вычисления проводятся отдельно для планет и отдельно для частиц, то удобно разделить программу на N+1 процессов (потоков). Нулевой процесс занят расчетом планет и рассылкой данных между остальными N процессами, которые заняты более затратными вычислениями уравнений движения частиц. Такая схема распараллеливания наиболее эффективна.

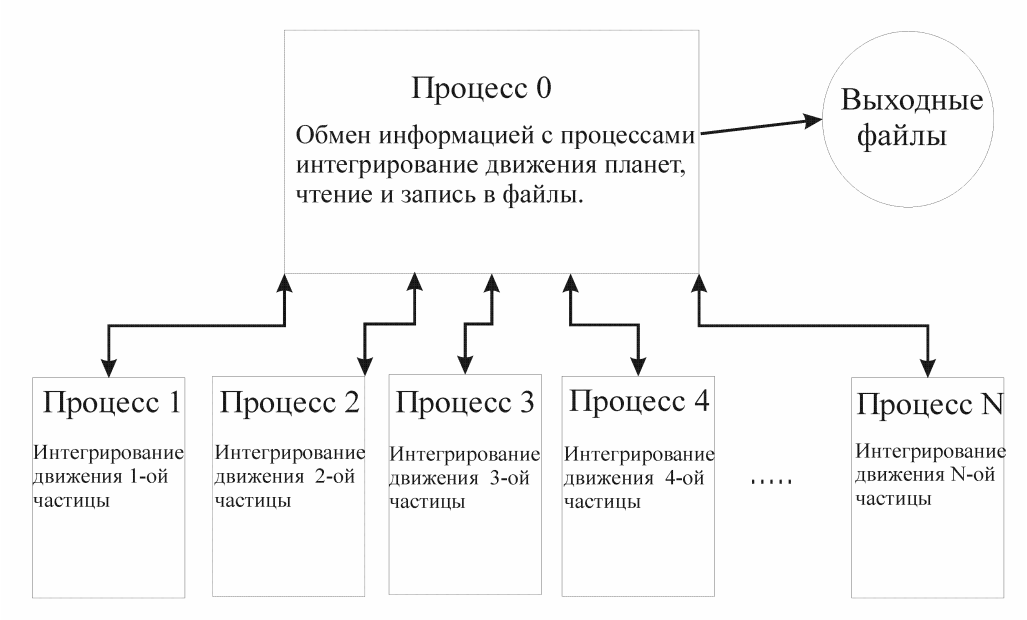


Схема занятости процессов

Заключение. На основе данного метода написана программа на Fortran с использованием MPI. Проведено тестирование на 52-х процессорном суперкомпьютере ЮУрГУ «Infinity». Данный метод позволит решать множество задач небесной механики и динамической астрономии.

Данная работа была поддержана грантами РФФИ 04-02-96042 и при финансовой поддержке Правительства Челябинской области.

Литература

1. Emel'yanenko V. An explicit symplectic integrator for cometary orbits // Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. − 2001. − V.74. − P. 287–295.

2. Saha P., Stadel J., Tremaine S. A parallel integration metod for solar system dynamics // The Astronomical Journal. − V.119. − P. 409−415.

3. Чегодаева Е.А. Метод симплектического интегрирования уравнений движения для малых тел Солнечной системы // Вестник ЮУрГУ, Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 5. – С. 49−55.

4. Wisdom J., Holman M. Symplectic maps for the N-body problem // The Astronomical Journal. − 1991. − P. 1528–1538.

Поступила в редакцию 30 сентября 2006 г.

УДК 669.715-154:537.87 + 537.87 + 669.715.02/.09

ВОЗДЕЙСТВИЕ НАНОСЕКУНДНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА РАСПЛАВЫ ЦВЕТНЫХ МЕТАЛЛОВ

Н.А. Шабурова

Работа посвящена исследованию способа воздействия на кристаллизующийся расплав, позволяющий существенно влиять на его физико-механические свойства. Исследуемый сплав Al–4%Cu предварительно подвергался облучению на стадии кристаллизации наносекундными электромагнитными импульсами (НЭМИ). После этого исследовалось влияние НЭМИ на протекание процессов старения, предварительно закаленных и деформированных образцов. Проводилось измерение таких физических характеристик металла, как твердость, удельное электросопротивление, микроструктура. Получены данные, подтверждающие влияние предварительной импульсной обработки на свойства металла.

В настоящее время на производстве применяется большое разнообразие способов улучшения качества металла, воздействуя на него на стадии кристаллизации. Новым способом обработки кристаллизующихся расплавов является воздействие наносекундными электромагнитными импульсами (НЭМИ).

В работе [1] приведены результаты воздействия НЭМИ на свойства жидкого металла. Изучали алюминиевые сплавы АК7, АК5М и цинковые сплавы ЦА4 и ЦА4М3 влияние импульсного воздействия на свойства жидкого и закристаллизовавшегося металла. Исследовали следующие свойства расплава: жидкотекучесть, вязкость, поверхностное натяжение, краевой угол смачивания, а также структуру и физико-механические свойства.

В проводимых экспериментах использовался генератор НЭМИ типа GNP со следующими характеристиками. Длительность импульса 0,5 нс, амплитуда более 5 кВ, мощность в одном импульсе более 1 МВт, частота повторения импульсов до 1000 Гц. Большая мощность и малая длительность импульса приводили к возникновению импульсов электромагнитных полей с напряженностью до 10^7 В/м [1]. Воздействие НЭМИ на расплав осуществляли погружением излучателя в металл, изолировав его от контакта с жидким металлом с помощью кварцевого стекла, прозрачного для наносекундных электромагнитных волн.

Плавку проводили в шахтной печи типа СШОЛ в тигле из жаропрочной стали, покрытом огнеупорной краской на основе электрокорунда. Температуру контролировали по показаниям платино-платинородиевой термопары, встроенной в печь, и дополнительно хромель-алюмелевой термопары непосредственно в расплаве. Излучатель был выполнен в виде латунной трубки диаметром 14 мм и помещен в кварцевую пробирку диаметром 20 мм. Длина трубки 500 мм.

Металл расплавляли, перегревали АК5М до 780 °С, ЦА4 до 480 °С, облучали НЭМИ 10 мин, в течение которых температура алюминиевого сплава опускалась до 660 °С, цинкового – до 420 °С, и заливали в формы. Сплавы без облучения обрабатывали аналогично.

Исследования показали, что у алюминиевого сплава повышается жидкотекучесть, уменьшается поверхностное натяжение, краевой угол смачивания, у цинкового сплава уменьшается поверхностное натяжение, краевой угол смачивания и жидкотекучесть. Прочность на разрыв для алюминиевого сплава несколько увеличивается, для цинкового не меняется. Относительное удлинение для алюминиевого сплава возрастает незначительно, для цинкового – более чем в 3 раза.

Было отмечено, что в обработанном НЭМИ образце кремний расположен в виде равномерных компактных включений, а в необработанном – неравномерных, иглообразных. В структуре цинкового сплава уменьшается количество и размер легкоплавких эвтектических включений ($\alpha_{Zn}+\alpha_1$) (из-за этого снижается жидкотекучесть).

Полученные данные позволили предположить, что под действием НЭМИ может измениться переохлаждение расплавов и увеличиться количество кристаллизационных зародышей, т.е. принцип действия НЭМИ близок к тому, что происходит при электромагнитном перемешивании металлов [1].

Ри Э.Х., Ри Хосен [2, 3] изучали влияние длительности облучения жидкой фазы НЭМИ на кристаллизацию, структурообразование и физико-механические свойства алюминия (гранулированный алюминий, 99,78 % Al), силумина А390 (17 % Si, 4 % Cu, 0,2 % Mg), а так же меди и оловянной бронзы Бр6.

Использовался генератор НЭМИ (ГНИ-01-1-6), имеющий следующие характеристики: полярность импульсов – положительная; амплитуда импульсов на нагрузке – 50 Ом – 6000 В; длительность импульсов на половинном уровне – 0,5 нс; максимальная допустимая частота следования генерируемых импульсов – 1 кГц.

Нагрев алюминия и его сплава производили до температуры 900 °С, после пятиминутной выдержки при этой температуре обрабатывали жидкий алюминий НЭМИ в течение 5, 10, 15, 20 и 25 минут. Затем после отключения генератора, определялась интенсивность гамма-проникающих изучений в процессе охлаждения со скоростью 20 °С/мин до температуры 300 °С. Параллельно строилась термограмма кристаллизации.

Определялись следующие кристаллизационные параметры: температура кристаллизации для алюминия и температуры ликвидуса и солидуса для А390; температура, при которой нарушается линейная зависимость изменения интенсивности гамма-проникающих излучений от температуры после затвердевания; интенсивность гамма-проникающих излучений; степень уплотнения гетерофазного расплава при кристаллизации алюминия и А390; продолжительность кристаллизации алюминия и А390 и охлаждения жидкой фазы от 900 °С до температуры кристаллизации; коэффициент термического сжатия при охлаждении в указанном интервале температур.

Полученные результаты исследования влияния облучения НЭМИ на кристаллизационные параметры жидкой фазы и физико-механические свойства гранулированного алюминия показали, что параметры и свойства Al существенно изменяются: четко прослеживается экстремальная зависимость кристаллизационных параметров и физико-механических свойств от продолжительности облучения НЭМИ. Так, теплопроводность алюминия и силумина А390 зависит от времени облучения жидкой фазы НЭМИ, максимальные ее значения наблюдаются при продолжительности обработки 7–10 минут [2].

Все кристаллизационные параметры меди и бронзы так же изменяются от продолжительности обработки НЭМИ по экстремальной зависимости [3].

Исследования автора посвящены изучению влияния НЭМИ на свойства отливок сплава Al–4 % Cu. Для проведения сравнения исследовался металл двух плавок. В первом случае расплав облучали НЭМИ в течение 15 минут при температуре 650 °С, во втором, расплав нагревался до 650 °С и выдерживался в течение 15 минут без облучения. Температурно-временные показатели изготовления отливок полностью совпадали.

Облучение расплавов проводили следующим образом. Специальным генератором создавался однополярный импульс тока. Один электрод генератора погружался в тигель с расплавом, а второй закреплялся на корпусе тигля. В проводимых экспериментах использовался генератор НЭМИ типа GNP со следующими характеристиками. Длительность импульса 0,5 нс, амплитуда более 5 кВ, мощность в одном импульсе более 1 МВт, частота повторения импульсов до 1000 Гц, напряженность до 10^7 В/м.

Во всех случаях, с облучением и без, металл разливался в земляную форму.

Из отливок облученного НЭМИ и необлученного металла были изготовлены образцы, которые затем подвергались термической обработке по следующему режиму: закалке с 505–510 °С с выдержкой 16 часов и последующему старению при температурах 100, 130, 160 и 190 °С. Помимо этого часть металла после закалки была подвергнута холодной пластической деформации на 15 %, после которой проводилось старение при 160 °С.

Далее проводилось измерение твердости по Виккерсу и электропроводности на приборе ИЭ-1М. Исследования микроструктуры проводил на оптическом микроскопе Neophot 21.

На рис. 1 приведены сравнительные кривые изменения твердости образцов в процессе старения при 100, 130, 160 °С.

Столь незначительное отличие исходной твердости свидетельствует об отсутствии влияния НЭМИ на упрочнение закаленного металла.

Видно, что старение при 100 °С (см. рис. 1а) как для облученного, так и для необлученного образца не позволило достичь максимума твердости за все время старения. Однако, если для необлученного образца характерно равномерное повышение данного показателя, то для облученно-

го имеется площадка. Во всем временном интервале появления площадки, значения твердости облученного образца практически не изменяются. Образование площадки при старении обусловлено, по-видимому, либо частичным растворением зон Г.П. и началом образования частиц метастабильных фаз, либо затуханием процесса образования зон при большом инкубационном периоде появления метастабильных фаз [4].

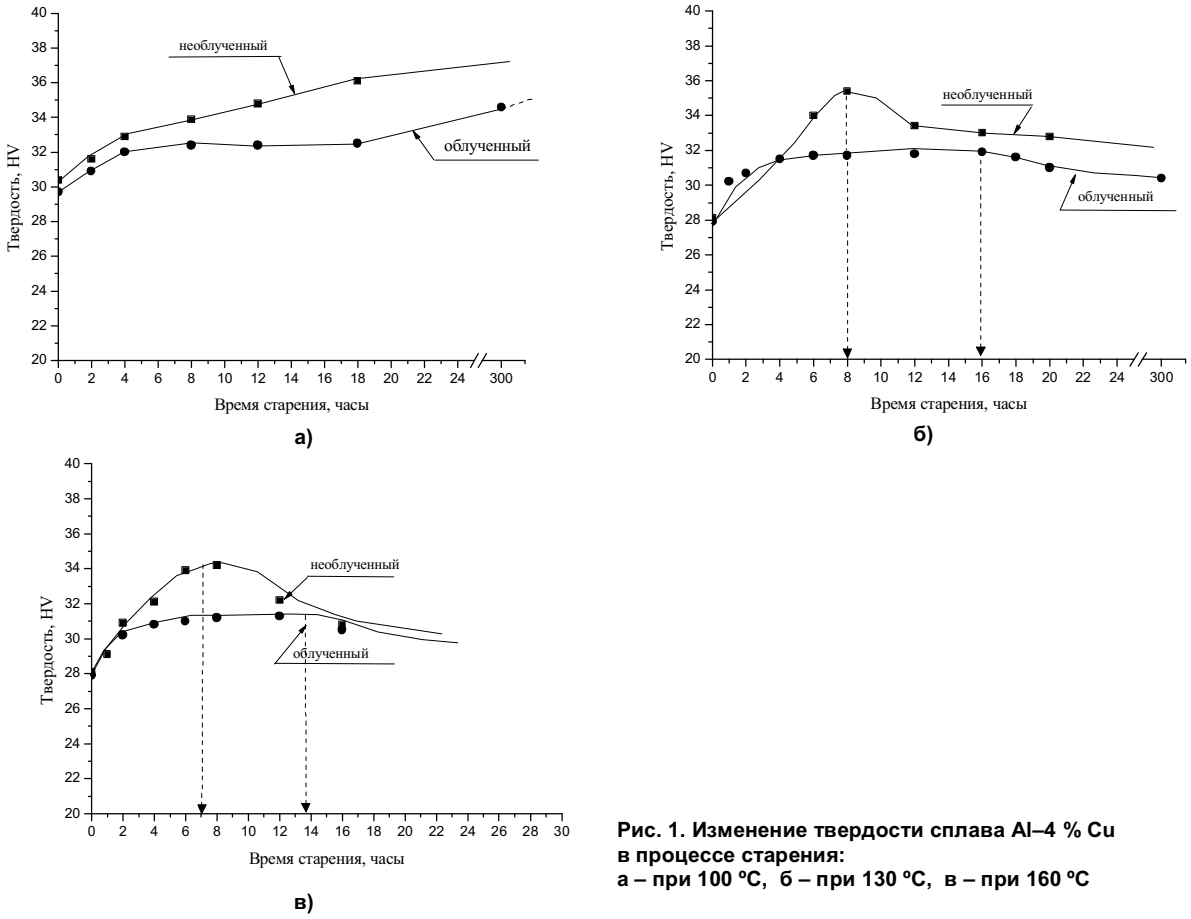


Рис. 1. Изменение твердости сплава Al–4 % Cu в процессе старения:
а – при 100 ºС, б – при 130 ºС, в – при 160 ºС

При повышении температуры старения характер зависимости твердости изменяется: на кривых появляются максимумы (см. рис. 1б, в), связанные с переходом от зонного старения к фазовому. Причем, чем выше температура старения, тем меньше эффект старения (прирост твердости относительно твердости закаленного образца) и достигается он за меньшее время. Так для необлученного образца максимум твердости 35,4 HV достигается через 8 часов выдержки при 130 °С. При 160 °С максимум твердости 34,2 HV достигается уже через 7 часов. При 130 °С наибольшая твердость облученного образца 31,9 HV достигается 16-часовой выдержкой. При 160 °С максимум твердости 31,3 HV достигается для облученного образца уже через 14 часов. При повышении температуры старения величина максимума снижается не столь значительно как для необлученного образца.

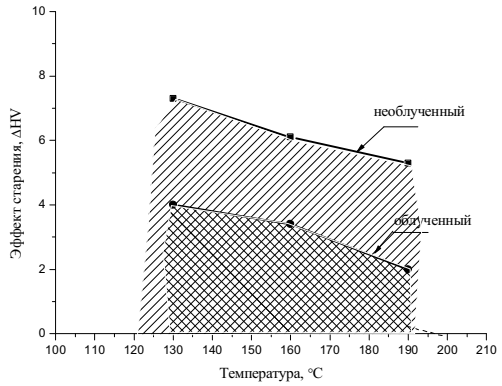


Рис. 2. Зависимость эффекта старения сплава Al-4%Cu от температуры старения

В целом, следует отметить, что облученный образец менее склонен к старению, чем необлученный. Для наглядности, на рис. 2 представлена зависимость эффекта старения для двух сплавов от температуры старения. Под эффектом старения понимается разница твердости закаленного образца и после соответствующего режима старения.

На образцах после закалки, пластической деформации при комнатной температуре и старении при 160 °С так же замерялась твердость на

приборе Виккерса. На рис. 3а показаны графики зависимости твердости этих образцов от длительности старения при 160 °С.

Проведенное контрольное старение закаленных образцов дало практически те же результаты, что и предшествующая термическая обработка.

Максимум твердости необлученного образца составляет 34 HV и достигается она за 8 часов старения. Максимальная твердость облученного образца 32 HV достигается за 15 часов старения.

Таким образом, как и в предыдущем случае можно говорить о замедлении и снижении эффективности процессов старения после облучения расплава металла НЭМИ.

Пластическая деформация на 15 % при комнатной температуре, предшествующая старению, существенно повышает прочностные свойства как облученного, так и необлученного металла (твердость непосредственно после деформации возрастает на 13,1 и 12,9 ед. HV соответственно). Помимо начального повышения твердости, очевидно, что деформация интенсифицирует процессы старения. В результате чего максимум твердости необлученного образца 49,2–49,5 HV наблюдается через 7–8 часов старения. Наибольшая твердость облученного образца 48,6 HV отмечена через 11–12 часов старения.

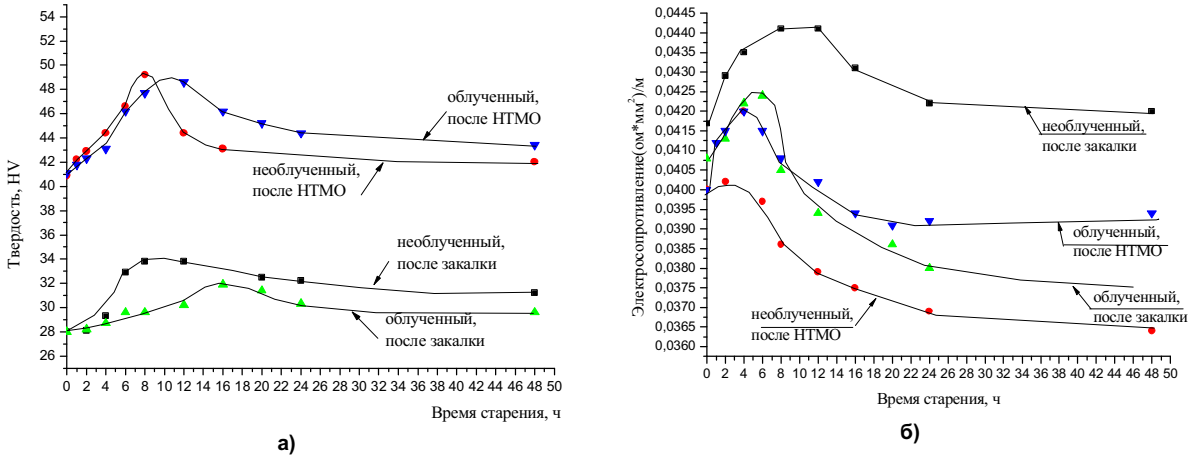


Рис. 3. Влияние длительности старения при 160 ºС образцов, закаленных и подвергнутых пластической деформации на твердость (а) и электросопротивление (б)

По всей видимости, предварительная пластическая деформация оказывает гораздо большее влияние на облученные образцы. Что выражается в более существенном снижении времени старения, необходимом для достижения максимальной твердости (с 15 ч до 11–12 ч у облученного образца, с 8 ч до 7–8 ч у необлученного). Так же, если для закаленных образцов, эффекты старения отличались существенно – 5,8 и 3,9 HV соответственно для необлученного и облученного образца, то после пластической деформации они, повышаясь по абсолютному значению, имеют уже меньшее различие (8,3 и 7,5 HV соответственно для необлученного и облученного образца).

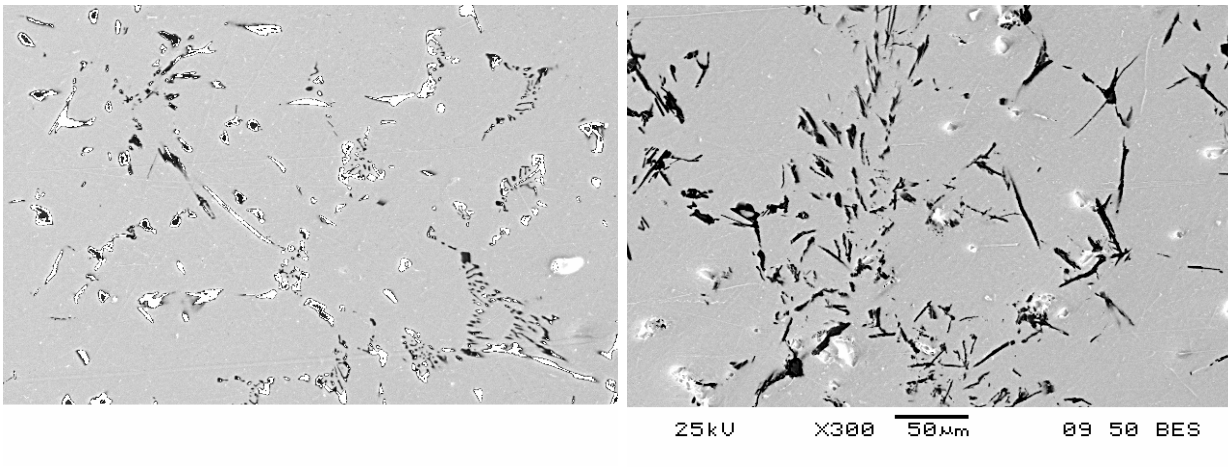
Для всех температур старения, кроме 100 °С наблюдается экстремальное изменение электросопротивления. Максимум данного показателя по временной шкале совпадает с соответствующим максимумом твердости. Что можно объяснить протекающими при старении процессами. Так на стадии образования зон Г.П. наблюдается повышение электросопротивления, при переходе к фазовому старению электросопротивление сплавов уменьшается. Отсутствие максимума данного показателя на кривых старения при 100 °С показывает, что при этой температуре протекает только зонная стадия.

Значения электросопротивления начальных гомогенизированных закаленных обработанных и необработанных НЭМИ образцов практически совпадают (0,0415 и 0,0418 Ом·м^2/м соответственно). По мере увеличения времени выдержки наблюдается повышение электросопротивления, причем как для облученного, так и для необлученного наиболее интенсивное повышение наблюдается при 130 °С и 190 °С. При этих же температурах достигается и наибольший прирост данного показателя.

Для всех закаленных и деформированных образцов, состаренных при 160 °С наблюдается достаточно резкое увеличение электросопротивления в процессе старения. Следует отметить, что максимальное значение данной характеристики для деформированных образцов достигается намного быстрее, чем максимум твердости (см. рис. 3б).

Несмотря на близкие свойства закаленных облученного и необлученного металла проведенный металлографические исследования позволили обнаружить существенные различия микроструктуры образцов – а именно – полное отсутствие эвтектической фазы в виде так называемых «иероглифов» в облученном образце. Фаза эвтектического состава $\alpha+CuAl_2$ выделяется в виде тонких игл по границам зерен (рис. 4). Структура же необлученного образца представлена как игольчатой фазой, так и характерной для данных сплавов иероглифообразной эвтектикой (см. рис. 4). Размеры зерен для двух сплавов близки.

В настоящее время работа продолжается. Планируется изучить влияние высокотемпературной механической обработки на свойства металла. А так же провести аналогичные эксперименты на сплаве другого состава.



а) б)

Рис. 4. Микроструктуры необлученного (а) и облученного (б) образцов соответственно после закалки и длительного старения при 190 °С, Х300

Таким образом, проведенные исследования наглядно свидетельствуют о наличии влияния НЭМИ на свойства сплава цветного металла. Это влияние проявляется в замедлении и снижении эффективности процессов старения, а так же изменении структуры сплава.

Литература

1. Знаменский Л.Г., Крымский В.В., Кулаков Б.А. Электроимпульсные нанотехнологии в литейных процессах: Монография. – Челябинск: Изд-во ЦНТИ, 2003. – 130 с.

2. Влияние облучения жидкой фазы наносекундными электромагнитными импульсами (НЭМИ) на кристаллизацию, структурообразование и физико-механические свойства алюминия (гранулированный алюминий, 99,78% Al) и силумина А390 / Э.Х. Ри, Хосен Ри, С.В. Дорофеев и др. // Повышение эффективности инвестиционной и инновационной деятельности в Дальневосточном регионе и странах АТР. В 4 ч. Ч.1: Материалы международной научно-практической конференции. – Комсомольск-на-Амуре: ГОУ ВПО «КиАГТУ». – 2006. – С. 101.

3. Влияние обработки меди и бронзы в жидком состоянии наносекундными электромагнитными импульсами (НЭМИ) на кристаллизацию, структурообразование и физико-механические свойства / Э.Х. Ри, Хосен Ри, С.В. Дорофеев и др. // Повышение эффективности инвестиционной и инновационной деятельности в Дальневосточном регионе и странах АТР. В 4 ч. Ч.1: Материалы международной научно-практической конференции. – Комсомольск-на-Амуре: ГОУ ВПО «КиАГТУ». – 2006. – С. 97.

4. Фридляндер И.Н. Закономерности старения алюминиевых сплав // Металловедение и термическая обработка металлов. – 1980. – № 8. – С. 22–28.

5. Знаменский Л.Г., Крымский В.В., Кулаков Б.А. Электроимпульсные нанотехнологии в литейных процессах. – Челябинск: Изд-во ЦНТИ, 2003. – 125 с.

6. Наносекундные электромагнитные импульсы и их применение / Б.С. Белкин, В.А. Бухарин, В.К. Дубровин и др. – Челябинск: Изд-во Татьяны Лурье. – 2001. – 117 с.

Поступила в редакцию 23 сентября 2006 г.

УДК 519+531

КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ ПРОЦЕДУРА СЛУЧАЙНОЙ ВЫБОРКИ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МЕХАНИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

Н.А. Скоркин, В.Ф. Степанов, М.А. Шистирикова

Предлагается метод TWS численного решения задач механики сплошной среды, основанный на использовании эйлеровских конечно-разностных сеток. Слежение за движением контактных разрывов по эйлеровской сетке осуществляется с помощью процедуры случайной выборки. Счёт шага по времени разбивается на два этапа. На первом этапе по схеме Неймана определяются величины в центрах ячеек. На втором этапе расчёт переноса этих величин через границу ячеек осуществляется по схеме случайной выборки [1–3]. Приводятся результаты тестирования метода.

На примере линейного уравнения переноса продемонстрируем идею случайной выборки при дискретном представлении дифференциального уравнения переноса. Линейное уравнение переноса для функции $u(x, t)$ имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0,\ a = \text{const}, a > 0. \tag{1}$$

Простая явная схема для этого уравнения записывается следующим образом

$$u_i^{n+1} = \chi\, u_{i-1}^n + (1-\chi)\, u_i^n, \qquad \chi = \frac{a\Delta t}{\Delta x}. \tag{2}$$

Здесь i – номер узла на эйлеровской сетке, n – номер временного слоя, $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, Δt – шаг счёта по времени t. Если посмотреть на уравнение (2), то можно увидеть, что значение функции $u(x,t)$ на $(n+1)$ временном слое u_i^{n+1} есть средневзвешенное значение известных величин u_i^n и u_{i-1}^n. Это приводит к мысли: для вычисления u_i^{n+1} использовать методы теории вероятностей. Из теории вероятностей известно, что для случайной дискретной величины ξ, принимающей с вероятностью p_j при проведении N испытаний значения ξ_j в j-м испытании, математическое ожидание $\overline{\xi}$ равно $\overline{\xi} = \sum_{j=1}^{N} P_j \xi_j$. Если с функцией $u = u(x_i, t_{n+1})$ связать случайную величину u_i^{n+1}, которая может принимать только два значения: u_i^n с вероятностью $1-\chi$ и u_{i-1}^n с вероятностью χ, то математическое ожидание случайной величины u_i^{n+1} будет полностью совпадать с выражением (2). Отсюда для линейного одномерного уравнения переноса (1) получается следующий вероятностный алгоритм:

$$u_i^{n+1} = \begin{cases} u_{i-1}^n & \text{с вероятностью } \ p = \chi, \\ u_i^n & \text{с вероятностью } \ p = 1-\chi, \end{cases} \tag{3}$$

где p – вероятность реализации события. Алгоритм будет полностью определён, если указать способ моделирования случайной величины. Пусть ξ – случайное действительное число, равномерно распределённое в интервале (0, 1). Тогда вычислительный алгоритм определим так:

$$u_i^{n+1} = \begin{cases} u_{i-1}^n, & \text{если } \ \xi < \chi, \\ u_i^n, & \text{если } \ \xi \ge \chi. \end{cases} \tag{4}$$

Применение вероятностной схемы типа (4) к системе нелинейных уравнений механики сплошной среды, её развитие и доработка осуществлены авторами работ [2, 3]. Перейдём к изложению сказанного. Расчёт временного шага Δt разбивается на два этапа: на лагранжевом этапе

численно по схеме с искусственной вязкостью (схема Неймана) решаются уравнения механики сплошной среды без конвективных слагаемых. На втором этапе решаются уравнения переноса по схеме (4). Иначе говоря, осуществляется расщепление уравнений по физическим процессам. Итак, на первом этапе, например, по разностной схеме Неймана пусть определены величины: $\hat{u}_i$, $\hat{\rho}_{i+1/2}$, $\hat{\varepsilon}_{i+1/2}$, $\hat{p}_{i+1/2}$ и др. Здесь u – скорость, ρ – плотность, p – давление, ε – удельная внутренняя энергия. Индексом i обозначены величины в узлах эйлеровской сетки, а индексом $i+1/2$ – в середине эйлеровых ячеек. После определения величин первого этапа счёта шага (величины с крышечкой $\wedge$) разыгрывается случайное число ξ^n, равномерно распределенное на промежутке (0, 1). Вероятностный алгоритм для второго этапа (численное решение уравнений переноса) для величин, определяемых в центре ячейки, имеет вид:

а) для $\hat{u}_{i+1/2} > 0$ б) для $\hat{u}_{i+1/2} < 0$

$$\rho_{i+1/2}^{n+1} = \begin{cases} \hat{\rho}_{i-1/2}, & \text{если } \xi^n < \Delta t \dfrac{\hat{u}_i}{\Delta x}, \\ \hat{\rho}_{i+1/2}, & \text{если } \xi^n > \Delta t \dfrac{\hat{u}_i}{\Delta x}, \end{cases} \qquad \rho_{i+1/2}^{n+1} = \begin{cases} \hat{\rho}_{i+3/2}, & \text{если } (1-\xi^n) > (1+\Delta t \dfrac{\hat{u}_i}{\Delta x}), \\ \hat{\rho}_{i+1/2}, & \text{если } (1-\xi^n) > (1+\Delta t \dfrac{\hat{u}_i}{\Delta x}). \end{cases} \tag{5}$$

Для расчёта переноса скоростей – величин, определяемых в узлах разностной сетки, апробированным [2] является следующий алгоритм:

а) для $\hat{u}_i > 0$ б) для $\hat{u}_i < 0$

$$u_i^{n+1} = \begin{cases} \hat{u}_{i-1}, & \text{если } \max(\hat{u}_{i-1}, \hat{u}_i)\dfrac{\Delta t}{\Delta x} > \xi^n, \\ \hat{u}_i, & \text{если } \max(\hat{u}_{i-1}, \hat{u}_i)\dfrac{\Delta t}{\Delta x} < \xi^n, \end{cases} \qquad u_i^{n+1} = \begin{cases} \hat{u}_{i+1}, & \text{если } (1+\min(\hat{u}_i, \hat{u}_{i+1}))\dfrac{\Delta t}{\Delta x} < (1-\xi^n), \\ \hat{u}_i, & \text{если } (1+\min(\hat{u}_i, \hat{u}_{i+1}))\dfrac{\Delta t}{\Delta x} > (1-\xi^n). \end{cases} \tag{6}$$

Некоторые примеры решения одномерных задач газовой динамики с помощью выше изложенной вероятностно конечно-разностной процедуры представлены на рис. 1–2. На этих рисунках все параметры в безразмерном виде.

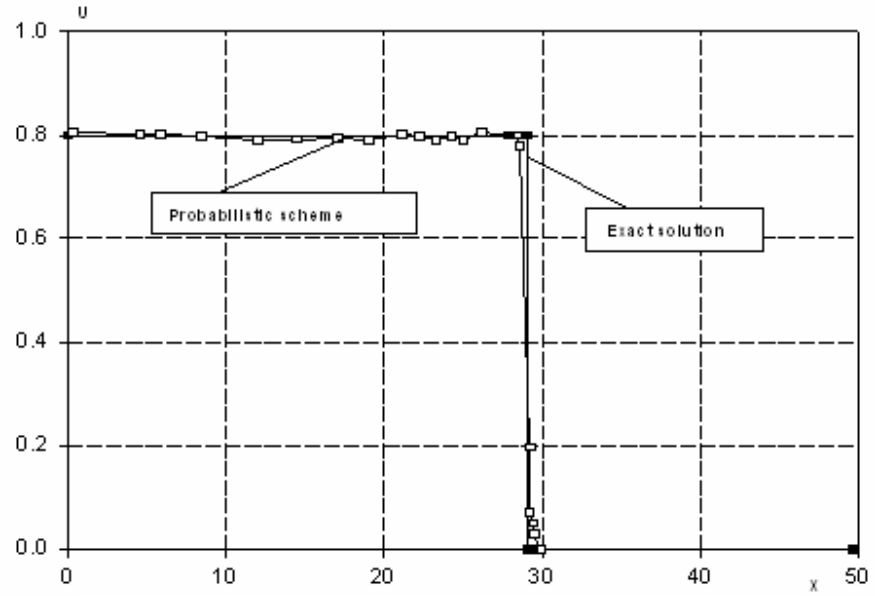


Рис. 1. Профиль скорости частиц среды ударной волной

На рис. 1 представлено решение задачи о движении сильной ударной волны по идеальному газу, имеющему уравнение состояния

$$p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon.$$

Начальная плотность среды (плотность перед фронтом сильного разрыва) $\rho_0 = 2{,}67$, скорость движения ударной волны $D = 1$. На рисунке представлен профиль скорости частиц U среды за сильным разрывом. Решение, приведённое на рис. 1 в виде графика-ступеньки, есть точное решение (Exact solution), а решение, полученное по вероятностной схеме (Probabilistic scheme), представлено на рисунке кривой, помеченной маркерами-квадратиками. Усматривается вполне удовлетворительное согласование решений.

На рис. 2 на некоторый момент времени приведены результаты расчёта задачи о распаде произвольного разрыва по апробированной схеме Неймана (Newman's scheme) и по вероятностной (Probabilistic scheme). В процессе распада произвольного разрыва в идеальном газе появляются ударная волна, волна разрежения и контактный разрыв, что отражено на рисунке.

В начальный момент времени состояние газа определяется следующими параметрами:

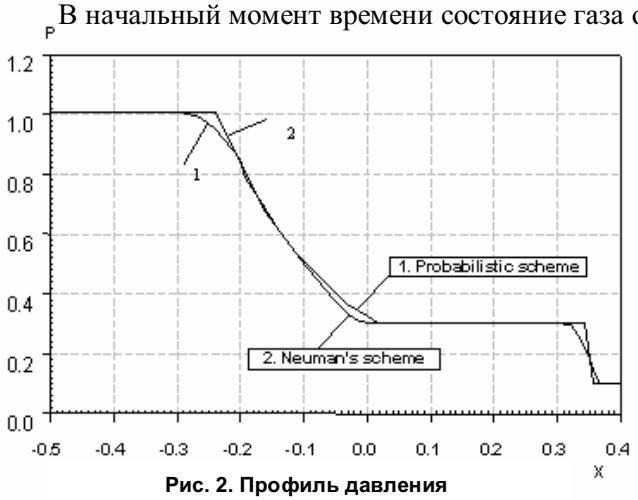


Рис. 2. Профиль давления

при $x < 0$ $\rho = 1$; $p = 1; U = 0$; $\gamma = 1{,}4$;

при $x > 0$ $\rho = 0{,}125; p = 0{,}1$; $U = 0$, $\gamma = 1{,}4$.

Здесь x – координата, ρ – плотность, p – давление, U – скорость, γ – показатель изоэнтропы. Задача решалась при следующих параметрах разностной сетки: коэффициент линейной искусственной вязкости $Q_1 = 1$; коэффициент квадратичной вязкости $Q_2 = 0{,}5$; число Куранта $\nu = 0{,}8$. Из рисунка 2 следует, что вероятностная схема даёт решение, согласующееся с решением, полученным по апробированной схеме Неймана.

Другое приложение предлагаемой здесь вычислительной схемы связано с решением стационарных задачи упругопластичности.

На рис. 3 в графическом виде приведены результаты решения задачи о стационарном распределении напряжений в толстом сферическом сосуде. Толстая сферическая оболочка нагружена внутренним давлением [4]. Внутренний радиус оболочки $R_1 = 10$ м, внешний $R_2 = 20$ м.

Давление внутри полости $P_1 = 0{,}1$ ГПа, на внешней поверхности $P_2 = 0$. При пределе текучести $Y_0 = 0{,}0865$ ГПа материал переходит в пластическое состояние в области между внутренней поверхностью и сферой радиуса $R_0 = 14{,}49$ м. Вне этой области остается упругим. Согласно [4] распределение напряжений в пластической области $R_1 \le R \le R_0$ задается уравнениями

$$p^{rr} = 2Y_0 \ln(R/R_1) - P_1,$$

$$p^{\theta\theta} = p^{rr} + Y_0,$$

$$P = -p^{rr} - 2Y_0/3.$$

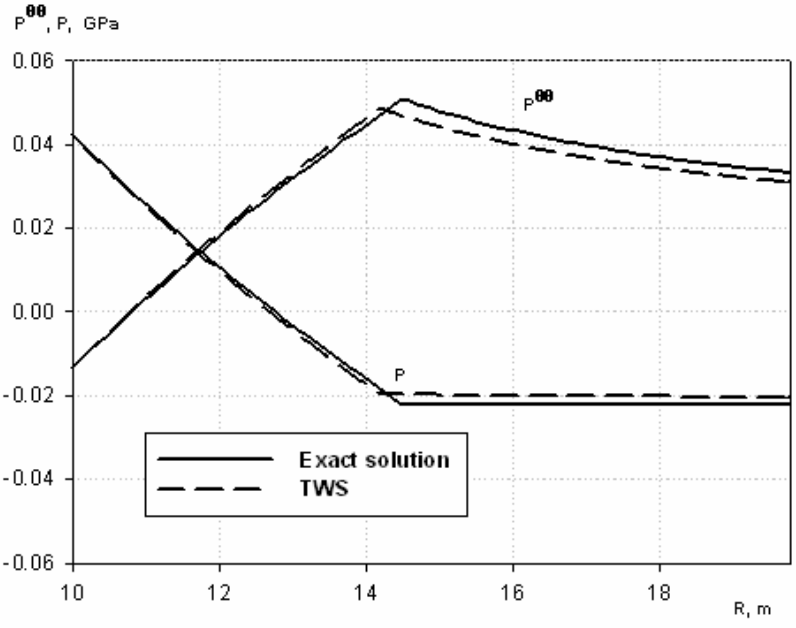


Рис. 3. Распределение напряжений по радиусу сферического сосуда

В упругой области $R_0 \le R \le R_2$

$$p^{rr} = \tilde{P}\left(1 - \left(R_2/R\right)^3\right),$$

$$p^{\theta\theta} = \tilde{P}\left(1 + 0.5\left(R_2/R\right)^3\right),$$

$$\tilde{P} = -q\,R_0^3/(R_2^3 - R_0^3),$$

$$q = 2Y_0 \ln(R_0/R_1) - P_1,$$

$$P = -\tilde{P}.$$

Уравнение состояния бралось в виде $P = K\left(\rho/\rho_0 - 1\right)$. Начальная плотность $\rho_0 = 2$ г/см^3, модуль Юнга $K = 33{,}333$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 1/3$.

Сферически симметричная (одномерная) задача о распределении напряжений в толстой оболочке решалась численно в цилиндрических координатах, т.е. в двухмерной постановке. Для подавления инерционных эффектов через промежутки времени 1 мс скорости полагались равными нулю. Распределения давления p и азимутального напряжения $p^{\theta\theta}$ в оболочке, полученные в расчете по вероятностной схеме (прерывистая кривая TWS) на момент 60 мс (момент установления напряжений), сравниваются с точным (сплошная кривая Exact solution) решением, см. рис. 3. Из рисунка следует, что имеет место быть вполне удовлетворительное согласование сравниваемых параметров. Надо отметить, что результат удивителен. Дело в том, что искалось стационарное решение по вероятностному, существенно нестационарному по определению, алгоритму TWS.

Однако описанный выше численный метод TWS не является достаточно надежным при расчете положения границ различных веществ. Дело в том, что для расчета перемещения термодинамических параметров задачи, проводимого по схеме случайной выборки (5), и для расчета перемещения кинематических параметров задачи по схеме (6), используются разные скорости. Это обусловлено тем, что разностной ячейке приписана одна плотность $\rho_{i+1/2}$, одно давление $p_{i+1/2}$, одна энергия $\varepsilon_{i+1/2}$, в то время как ячейка (одномерная) имеет две скорости u_i и u_{i+1}. И это иногда в силу накопления вычислительных ошибок (например, в результате округления чисел в компьютерном коде) приводит к рассогласованию движения поля скоростей и поля термодинамических параметров по сетке.

Устранить рассогласованность можно, если определять скорости в центре ячеек, как термодинамические параметры. К сожалению, в результате получаются разностные схемы, обладающие сильными дисперсными свойствами, что крайне нежелательно при расчете задач упругопластичности. Выход был найден при использовании SPH-идеологии на первом лагранжевом этапе расчета. SPH-метод предполагает вычисление всех параметров в центре частицы, а это обеспечивает отсутствие рассогласования (при расчете на втором эйлеровском этапе вычислений шага по времени) перемещения скоростей и термодинамических параметров.

Приступим к изложению полученного в результате метода SPH&MK, на примере одномерной газовой динамики. Будем предполагать, что в центре разностной сетки определяются все параметры задачи. Расчёт временного шага Δt разбивается на два этапа: на лагранжевом этапе численно по *SPH*-методу решаются уравнения газовой динамики без конвективных слагаемых. На втором этапе решаются уравнения переноса по схеме (5).

Мы не будем подробно излагать SPH-метод, лишь укажем, как он встраивается в конечно-разностную схему со случайной выборкой. В начальный момент времени строится разностная сетка. Для каждой ячейки (лишь однажды!) определяется список соседних ячеек, попавших в конечную область – носитель сглаживающей функции SPH-метода. Обычно в качестве сглаживающей функции берется B-сплайн в форме Монагана и Латтанцио [5]

$$W(r,h) = \frac{1}{\pi h^3}\begin{cases} 1 - \dfrac{3}{2}\upsilon^2 + \dfrac{3}{4}\upsilon^3, & 0 \le \upsilon \le 1; \\ \dfrac{1}{4}(2-\upsilon)^3, & 1 < \upsilon < 2; \\ 0, & 2 \le \upsilon. \end{cases}$$

Здесь где $r = \left|x_i - x_j\right|$ – расстояние от центра текущей i-й ячейки (частицы) до соседней j-й ячейки, $\upsilon = r/h$, h – область определения сглаживающей функции W. Разностные уравнения, например, для уравнения импульсов на первом этапе счета шага Δt в форме SPH-аппроксимации для задач гидродинамики в одномерном случае имеют вид [1–4]

$$\frac{d\hat{u}_i}{dt} = -\sum_{j=1}^{N} m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2}\right) \frac{\partial W\left(\left|x_i - x_j\right|, h\right)}{\partial x}, \qquad (7)$$

В этих уравнениях m_j есть масса j-й ячейки. После определения по схеме (7) параметров первого этапа счёта шага разыгрывается случайное число $\xi^n \in (0,1)$. И алгоритм случайной выборки для второго этапа счета шага по времени для всех величин теперь имеет единый вид (5). Для иллюстрации возможностей предлагаемого метода рассмотрим задачу о распадении произвольного разрыва в идеальном газе. Начальные значения параметров газа слева и справа от поверхности контактного разрыва взяты из работы [6], там же приведены формулы для расчета точного решения на моменты времени $t>0$. Расчетная область и число ячеек в ней в полном соответствии с цитированной работой [6]. Результаты расчетов для удельной внутренней энергии на момент времени $t=4$ мс представлены на рисунке 4. При расчете распределения удельной внутренней энергии и давления по стандартному варианту SPH-метода на поверхности контактного разрыва возникает скачок энергии и давления, см. рис.4. При расчете по вероятностной схеме SPH&MK скачок отсутствует.

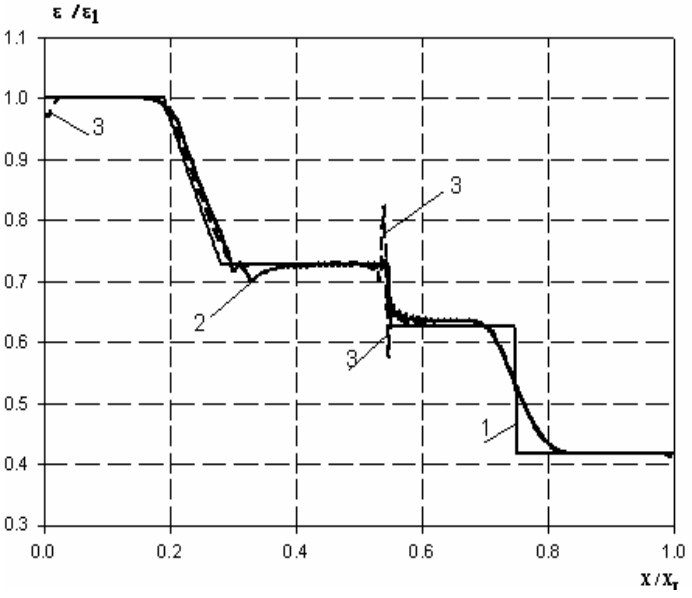


Рис. 4. Распределение внутренней энергии на конечный момент времени: 1 – точное решение; 2 – решение по методу SPH&MK; 3 – SPH, стандартный вариант

В расчетах по вероятностной схеме SPH&MK по причине наличия разностной сетки поиск соседей осуществляется один раз в начальный момент времени. Перемещение частиц по сетке осуществляется по схеме со случайной выборкой (5). Вследствие этого расчет задачи по вероятностной схеме приблизительно в 10 раз быстрее по времени, чем расчет по SPH-методу. В расчетах использовалась только квадратичная вязкость, предложенная в работе [6],

$$q = -80\rho_i (D_i \operatorname{div} u_i)^2 .$$

Численные методы, использующие SPH-идеологию, особенно эффективны в таких задачах, как расчет проникания тел в преграды, задачи о заглубленных взрывах, задачи астрофизики и т.п.

При разработке осушителей природного газа, работающих на принципе дросселирования давления и представляющих собой трубу переменного сечения, интерес представляет распределение параметров течения газа по длине трубы. Первоначально покоящийся газ в трубе переменного сечения, каковой является, например, сопло Лаваля, разгоняется до скорости звука в горловом сечении, потом расширяется в сверхзвуковой части сопла при заданном давлении на срезе сопла. Из всех уравнений газовой динамики только в уравнение неразрывности входит зависимость $S(x)$, описывающая площадь сечения трубы как функцию координаты x точки, расположенной на оси симметрии трубы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \rho u \frac{S'(x)}{S(x)} = 0 .$$

Остальные уравнения имеют стандартный вид. Для расчетов были опробованы 4 схемы: выше изложенная TWS, Моретти, МакКормака и Лакса-Вендроффа [7]. Схемы МакКормака и Лакса-Вендроффа дали схожие результаты, поэтому на рис. 5. они идентифицированы одним маркером «McCormack». Длина трубы бралась равной 3 м. Образующая сопла описывалась кривой $y = x/2 + 1/2$, $0 < x \le 3$ м. В качестве газа рассматривался идеальный газ с уравнением состояния $p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon$, $\gamma = 1{,}4$.

В начальный момент времени газ в трубе покоится, давление $p = 20$ атм. На правом конце трубы поддерживалось давление $p = 0{,}75p^*$. Граничные условия (на входе сопла и на срезе со-

пла) для скорости $U(x)$ задавались в виде $\frac{\partial U(x)}{\partial x} = 0$. На рис. 5 приведены результаты расчетов распределения скорости U по длине трубы x. Результаты расчетов показали, что схемы Мак-Кормака и Лакса-Вендроффа обладают сильным сглаживающим эффектом и при расчете задач на установление они непригодны.

Численный метод Моретти, использующий информацию о характеристических направлениях кой системы уравнений газовой динамики, наиболее точен. Схема TWS дала результаты расчетов, близкие к тем, что получены по схеме Моретти. Таким образом, при проведении расчетов движения идеального газа в квазиодномерной постановке предпочтение следует отдать схеме Моретти.

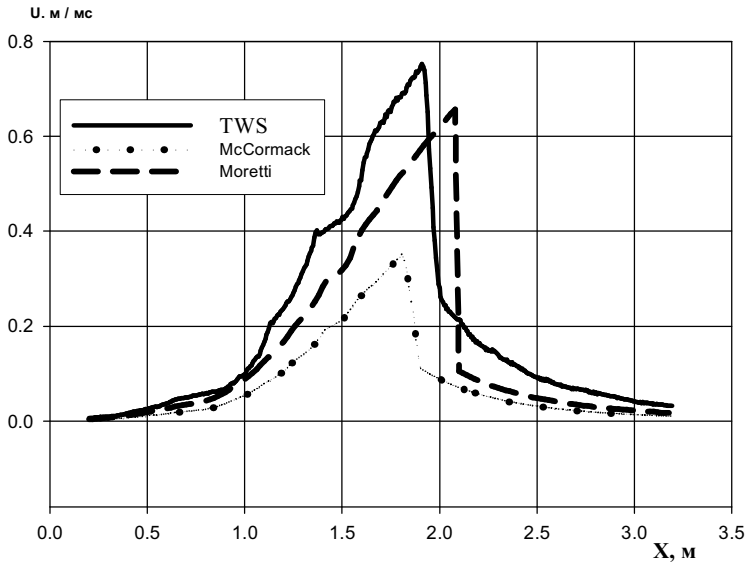


Рис. 5. Распределение скорости по длине сопла

Однако применение этой схемы в многомерном случае или, при использовании сложного по конструкции уравнения состояния, применение схемы TWS проще. Связано это с тем, что схема Моретти использует информацию о характеристических направлениях. А для этого необходимо уравнения движения записывать в специальном виде, т.е. уравнение состояния в вычислительном коде затруднительно представить в виде отдельного программного модуля.

Далее на рис. 6 приводится сравнение результатов расчетов, полученных по двухмерной программе TWS и по квазиодномерной схеме Моретти. Рассматривалось движение в трубе диаметром 57 мм, длиной 320 мм, на оси которой на расстоянии 100 мм от левого конца располагался дроссель.

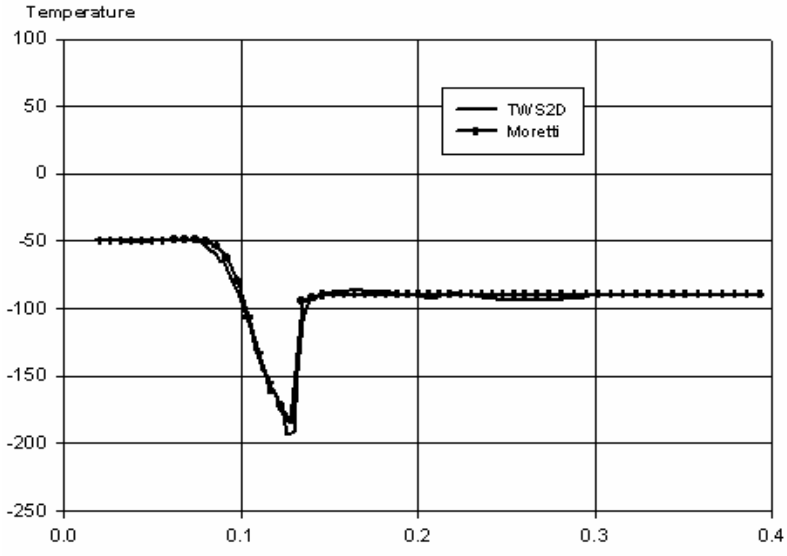


Рис. 6. Распределение температуры по длине трубы

Дроссель – представлял тело, полученное вращением сегмента окружности радиуса 50 мм.

Высота сегмента 25 мм. Минимальный зазор между дросселем и поверхностью трубы получился равным 3 мм.

На рис. 6 представлены распределения температуры (шкала Цельсия). На этом рисунке маркер «TWS2D» соответствует двухмерным расчетам по разностной схеме TWS. Маркеру «Moretti» соответствует расчетная кривая, полученная по квази одномерной программе, в которой реализована конечно-разностная схема Моретти. Граничное условие на левом конце трубы такое же, как в выше приведенном случае сопла Лаваля. На правом конце трубы поддерживалось давление $p = 0{,}5\,p^*$. Видно вполне удовлетворительное согласование сравниваемых параметров. Из этого следует, что двухмерная вычислительная программа TWS пригодна для решения рассмотренных задач.

Расчеты по вычислительной методике SPH&MK не проводились в силу неспецифичности задачи для данной численной процедуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере, проект № 4436р/6842 от 29.06.2006 г.

Литература

1. Сод Г. Обзор некоторых разностных методов для консервативных нелинейных гиперболических систем// J. of Comp. Phys. – 1978. – V.27. – № 1. – P.1–14.

2. Модификация метода Глимма к задачам проникания / С.Г. Андреев, В.В. Башуров, В.А. Свидинский, Н.А. Скоркин // ВАНТ, серия «Методики и программы численного решения задач математической физики». – 1985. – Вып. 3. – С. 80–88.

3. Скоркин Н.А. Об одной конечно-разностной схеме для задач механики сплошной среды// Доклады международной конференции «IV Забабахинские научные чтения». – Снежинск: РФЯЦ – ВНИИТФ, 1995. – С. 277–279.

4. Качанов Л.М. Основы теории пластичности. – М.: Наука, 1969. – С.103–105.

5. Libersky L. D., Petschek A.G. etc. High Strain Lagrangian Hydrodynamics (3D SPH code for Dynamic Material response) // J. of Comp. Phys. – 1993. – № 109. – P. 67–75.

6. Паршиков А.Н. Применение решения задачи Римана в методе частиц// Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1999. – Т. 396. – № 7. – С. 1216–1225.

7. Флетчер К.А. Вычислительные методы в динамике жидкостей. – М.: Мир, 1991, Т. 2. – С. 172–175, С. 186–190.

Поступила в редакцию 9 октября 2006 г.

УДК 51-72:531+517.938

НЕКОТОРЫЕ АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МЕТОДА СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА В ОБЩЕЙ ТЕОРИИ СЛОЖНЫХ МЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Е.Н. Шеповалов

Излагается методика обоснования метода системного анализа. Метод является достаточно общим, описывающим динамические свойства сложных механических систем различной природы, не требующим составления дифференциальных или интегральных уравнений. Он всегда раскрыт для расширения путем введения рекуррентных соотношений или каких-либо динамических характеристик, найденных из натурного эксперимента.

Пусть малые колебания сложной механической системы (СМС) вблизи устойчивого положения равновесия представляются обыкновенной дифференциальной системой вида:

$$A_2\ddot{q} + A_1\dot{q} + A_0 q = F(t), \tag{1}$$

где q – вектор-столбец лагранжевых либо динамических [1, 2] обобщенных координат $(q_1, q_2, ..., q_S)$, характеризующий обобщенное перемещение; F – вектор – столбец возмущающих функций, характеризующий действие внешних сил, который также рассматривается как обобщённый, в общем случае зависящий от обобщенных координат, обобщённых скоростей, обобщенных ускорений и времени; $A_2 = [a_{kj}]$, $A_0 = [c_{kj}]\,(k, j = \overline{1,s})$ – матрицы инерционных и квазиупругих коэффициентов; $A_1 = [b_{kj}](k, j = \overline{1,s})$ – матрица диссипативных коэффициентов, удовлетворяющая определенным частным условиям [3–6].

Анализ и синтез процессов, описываемых системой дифференциальных уравнений (1), особенно если дифференциальная система имеет высокий порядок, связаны с преодолением немалых трудностей. Эти затруднения в значительной мере могут быть сняты, если предварительно соответствующей заменой переменных привести исходную систему к виду, матрицы коэффициентов которой имеют диагональную или квазидиагональную форму. Обычно такие преобразования проводят на простейшей системе вида

$$A_2\ddot{q} + A_0 q = F(t), \tag{2}$$

которую проще привести к независимым уравнениям, чем исходную (1). Кроме того, система (1), путем исключения из нее слагаемого, содержащего $\dot{q}$, с помощью замены переменных

$$q = \varphi y, \tag{3}$$

где

$$\varphi = \exp\left(-1/2\, A_2^{-1} A_1 t\right) \tag{4}$$

– квадратная матрица, всегда может быть приведена к виду, аналогичному (2), за исключением того, что коэффициенты преобразованной системы будут уже функциями времени:

$$\ddot{y} + \beta(t)\, y = \tilde{\Im}(t), \tag{5}$$

где $\beta(t) = \varphi^{-1}\left[A_2^{-1} A_0 - 1/4 \cdot \left(A_2^{-1} A_1 \right)^2 \right]\varphi$, $\quad \tilde{\Im}(t) = \varphi^{-1} A_2^{-1} F(t)$.

Рассмотрим один из алгоритмов таких преобразований (7) на примере системы, дифференциальные уравнения движения которой имеют вид

$$A_2\ddot{q} + (\gamma + æ) A_0 q = F(t), \tag{6}$$

где $\gamma = 1,\ æ = \sigma\dfrac{d}{dt}$ в случае вязкого трения и $\gamma = \xi, æ = i\zeta$ в случае частотно-независимого трения, а σ – коэффициент пропорциональности (коэффициент внутреннего трения) [3–4, 6, 8].

Положив в (6) $F(t) = 0$, получим однородную систему

$$A_2\ddot{q} + (\gamma + æ)A_0 q = 0, \tag{7}$$

решение которой представим в виде

$$q_j = \psi^{(j)} \exp\left(i\omega_j^* t\right), \tag{8}$$

где $\psi^{(j)}$ – вектор амплитуд обобщённых координат q_j при колебаниях системы с собственной частотой ω_j^*, совпадающий с точностью до постоянного множителя с вектором коэффициентов распределения амплитуд соответствующей консервативной системы. В силу того, что матрица $A_2^{-1}A_0$ имеет простую структуру, подстановка (8) в (7) преобразует последнее в систему вида:

$$-A_2\Psi W^* + A_0\Psi\Lambda = 0, \tag{9}$$

где $W^* = diag\left\{\left(\omega_1^*\right)^2, \left(\omega_2^*\right)^2, ..., \left(\omega_S^*\right)^2\right\};\ \Lambda = diag\left\{\left(\gamma + i æ_1^*\right), \left(\gamma + i æ_2^*\right), ..., \left(\gamma + i æ_S^*\right)\right\};$

$æ_j^* = \sigma\omega_j^*$ для вязкого трения и $æ_j^* = \vartheta$ для частотно-независимого трения, $j = \overline{1,S}$.

Используя преобразование $q = \Psi \cdot \tilde{q}$ приводим неоднородную систему (6) к форме

$$A_2\Psi\ddot{\tilde{q}} + (\gamma + æ)A_0\Psi\tilde{q} = F(t).$$

Умножая слева обе части этого уравнения на транспонированную матрицу Ψ^{T} и используя соотношение (9), придаем уравнению вид

$$\Psi^{\mathrm{T}}A_2\Psi\ddot{\tilde{q}} + (\gamma + æ)\Psi^{\mathrm{T}}A_0\Psi W^*\Lambda^{-1}\tilde{q} = \Psi^{\mathrm{T}}F(t), \tag{10}$$

в котором матрица $\Psi^{\mathrm{T}}A_2\Psi = \tilde{A}_2$ является диагональной с элементами, определяемыми формулой

$$\tilde{A}_{2j} = \sum_{\nu=1}^{S} a_\nu \left[\psi_\nu^{(j)}\right]^2.$$

Сопоставляя характеристические уравнения диссипативной $\left|A_0 - A_2\left(\omega_j^*\right)^2 \Big/ \left(\gamma + i æ^*\right)\right| = 0$ и консервативной $\left|A_0 - A_2\omega_j^2\right| = 0$ систем замечаем, что $\left(\omega_j^*\right)^2 \Big/ \left(\gamma + i æ^*\right) = \omega_j^2$, откуда вытекает следующее тождество: $W^*\Lambda^{-1} = diag\left\{\omega_1^2, \omega_2^2, ..., \omega_S^2\right\} \equiv W$, а уравнение (10) принимает вид

$$\ddot{\tilde{q}} + (\gamma + æ)W\tilde{q} = \tilde{A}_2^{-1}\Psi^{\mathrm{T}}F(t). \tag{11}$$

Следовательно, неоднородная система (21), также как и (2), преобразуется к системе S – несвязанных между собой уравнений

$$\ddot{\tilde{q}}_j + (\gamma + æ)\omega_j^2\tilde{q}_j = d_{jr}, \tag{12}$$

где $d_{jr} = \dfrac{\Im_j(t)}{M_j}$; $\Im_j(t) = \sum_{r=1}^{S}\psi_r^{(j)}F_r(t)$ – j-я обобщенная сила j-й формы колебаний системы.

В случае учета демпфированная по гипотезе вязкого трения, когда линейный диссипативный оператор A_1 такой, что $æ\omega_j^2\tilde{q}_j = \sigma\omega_j^2\dot{\tilde{q}}_j = 2\varepsilon_j\dot{\tilde{q}}_j$, где ε – коэффициент демпфирования [3, 5], уравнение для j-й обобщённой координаты $\tilde{q}_j$ системы (12), принимает вид

$$\ddot{\tilde{q}}_j + 2\varepsilon_j\dot{\tilde{q}}_j + \omega_j^2\tilde{q}_j = d_{jr}, \tag{13}$$

Использование преобразования (3) с учетом (4) приводит (13) к виду

$$\ddot{y}_j + \omega_{j\varepsilon}^2 y_j = e^{\varepsilon_j t}d_{jr}, \tag{14}$$

где $\omega_{j\varepsilon} = \left(\omega_j^2 - \varepsilon_j^2\right)^{1/2}$ – собственная частота колебаний диссипативной системы.

Обозначив правую часть (14) $e^{\varepsilon_j t} d_{jr}$ через $\tilde{\Im}_j(t)$ и опустив индекс *j*, получаем одно уравнение второго порядка вида

$$\ddot{y} + \omega_\varepsilon^2 \, y = \tilde{\Im}(t). \tag{15}$$

В том случае, когда $\omega^2 - \varepsilon^2 > 0$, общий интеграл однородного уравнения

$$\ddot{y} + \omega_\varepsilon^2 \, y = 0, \tag{16}$$

может быть представлен в виде

$$y = c_1 \cos\omega_\varepsilon t + c_2 \sin\omega_\varepsilon t = c_1 y_1(t) + c_2 y_2(t), \tag{17}$$

где c_1 и c_2 – произвольные постоянные, а фундаментальная система решений однородного уравнения $y_1(t)$ и $y_2(t)$ – гармонические функции.

Решение неоднородной системы (15) будем искать методом Лагранжа. Для этого положим

$$y = Ay_1 + By_2, \qquad \dot{y} = A\dot{y}_1 + B\dot{y}_2, \tag{18}$$

где *A* и *B* – некоторые неопределённые функции времени, подлежащие определению.

Поскольку само дифференциальное уравнение (15) эквивалентно единственному соотношению между функциями $y \, u \, \tilde{\Im}$, то ясно, что соотношения (18) будут справедливы только при условии их взаимной совместимости. Для установления этого факта дифференцируем первое из условий (18) и, приравнивая ко второму, получаем условие совместности системы (18)

$$\dot{A}y_1 + \dot{B}y_2 = 0. \tag{19}$$

Далее, подставляя второе из условий (18) в уравнение (15) и учитывая (16), получаем

$$\dot{A}\dot{y}_1 + \dot{B}\dot{y}_2 = \tilde{\Im}(t). \tag{20}$$

Поскольку решения $y_1(t)$, $y_2(t)$ образуют фундаментальную последовательность, то двух уравнений (18) и (20) достаточно для определения $\dot{A}, \dot{B}$ через $y_1(t)$, $y_2(t)$ и $\tilde{\Im}(t)$. Поэтому решив систему уравнений (19) и (20)

$$\dot{A}y_1 + \dot{B}y_2 = 0, \quad \dot{A}\dot{y}_1 + \dot{B}\dot{y}_2 = \tilde{\Im}(t)$$

относительно неизвестных произвольных функций $\dot{A}(t)$ и $\dot{B}(t)$, находим:

$$\dot{A} = -\frac{1}{\Delta}\tilde{\Im}(t)\, y_2; \qquad \dot{B} = -\frac{1}{\Delta}\tilde{\Im}(t)\, y_1, \tag{21}$$

где определитель

$$\Delta = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ \dot{y}_1 & \dot{y}_2 \end{vmatrix}, \tag{22}$$

на основании второго следствия теоремы Лиувилля [9] и того факта, что уравнение (15) не содержит первой производной – величина постоянная. Действительно, в рассматриваемом случае

$$\Delta = \begin{vmatrix} \cos\omega_\varepsilon t & \sin\omega_\varepsilon t \\ -\omega_\varepsilon \sin\omega_\varepsilon t & \omega_\varepsilon \cos\omega_\varepsilon t \end{vmatrix} = \omega_\varepsilon = \text{const}.$$

Имея это в виду, интегрируя систему уравнений (21), находим:

$$A = -\frac{1}{\omega_\varepsilon}\int_\alpha^t \tilde{\Im}(t)\sin\omega_\varepsilon t dt; \; B = \frac{1}{\omega_\varepsilon}\int_\alpha^t \tilde{\Im}(t)\cos\omega_\varepsilon t dt. \tag{23}$$

Подставляя значения *A* и *B* в первое из условий (18), находим

$$y = \frac{1}{\omega_\varepsilon}\left\{-\cos\omega_\varepsilon t \int_\alpha^t \tilde{\Im}(t)\sin\omega_\varepsilon t dt + \sin\omega_\varepsilon t \int_\alpha^t \tilde{\Im}(t)\cos\omega_\varepsilon t dt\right\} \tag{24}$$

и, соответственно, для *j*-й главной координаты при подачи воздействия на *r*-й вход

$$\tilde{q}_j = \frac{1}{\omega_{j\varepsilon}}\left\{\sin\omega_{j\varepsilon}t\int_\alpha^t e^{\varepsilon_j t}\tilde{d}_{jr}\left[\sum_{r=1}^{S}F_r(t)\right]\cos\omega_{j\varepsilon}tdt - \cos\omega_{j\varepsilon}\,t\int_\alpha^t e^{\varepsilon_j t}\tilde{d}_{jr}\left[\sum_{r=1}^{S}F_r(t)\right]\sin\omega_{j\varepsilon}tdt\right\}. \qquad (25)$$

Заменяя под знаком интеграла букву *t* буквой τ, считая начальные условия нулевыми и полагая $\alpha = 0$, после внесения под знак интеграла множителей, не зависящих от переменной интегрирования, получаем частное решение каждого из уравнений в виде:

$$\tilde{q}_j = \frac{\tilde{d}_{jr}}{\omega_{j\varepsilon}}\int_0^t e^{-\varepsilon_j(t-\tau)}\sin\omega_{j\varepsilon}(t-\tau)\left[\sum_{r=1}^{S}F_r(\tau)\right]d\tau, \qquad (26)$$

где $\tilde{d}_{jr} = \sum_{r=1}^{S}\psi_r^{(j)} \Big/ \sum_{\nu=1}^{S}a_\nu\left[\psi_\nu^{(j)}\right]^2$, а τ – вспомогательное время интегрирования, изменяющееся в пределах от нуля до рассматриваемого текущего момента времени *t*.

Зная $\tilde{q}_j$, находим решение исходного уравнения (13)

$$q_j = \sum_{i=1}^{S}\psi_i^{(j)}\tilde{q}_j = \sum_{r=1}^{S}\int_0^t\left[\sum_{j=1}^{S}e^{-\varepsilon_j(t-\tau)}\sin\omega_{j\varepsilon}(t-\tau)\psi_i^{(j)}d_{jr}\right]F_r(\tau)d\tau. \qquad (27)$$

Полагая $F_r(t) = F_{or}\cos\omega t$ и интегрируя (27), получаем

$$q_i = \sum_{i=1}^{S}\psi_i^{(j)}\tilde{q}_j = \sum_{j=1}^{S}\sum_{r=1}^{S}\frac{\psi_r^{(j)}\psi_i^{(j)}F_{or}}{M_j\omega_j^2}\cdot\frac{\cos\left[\omega t - \operatorname{arctg}\left(\dfrac{2\varepsilon_j\omega/\omega_j^2}{1-\omega^2/\omega_j^2}\right)\right]}{\sqrt{\left(1-\dfrac{\omega^2}{\omega_j^2}\right)^2+\left(\dfrac{2\varepsilon_j}{\omega_j}\cdot\dfrac{\omega}{\omega_j}\right)^2}}. \qquad (28)$$

Рассмотренный выше метод решения дифференциальных уравнений имеет достаточно большую давность. Однако, несмотря на это непосредственное практическое его применение к решению технических задач, связанных с расчетом СМС наталкивается на ряд затруднений, в том числе связанных с самим преобразованием к главным нормальным координатам. Кроме того, используемое преобразование (10) не всегда приводит к желаемому результату. Так, например, в случае консервативных систем, данное преобразование работает отлично, а для диссипативных систем нормальные координаты существуют только при некоторых ограничениях, накладываемых на матрицы A_2, A_1 и A_0 [3, 5].Определенные затруднения в реализации метода возникают и в тех случаях, когда силы, передаваемые силовым полем, линейно зависят от смещений точек (частиц) СМС и любых производных этих смещений по времени. К числу таких полей можно отнести, в частности, поле давления сжимаемой или идеальной жидкости в гидродинамически линейных задачах гидроупругости, которые возникают при исследовании динамики СМС с полостями, частично заполненными жидкостью. В этих случаях метод главных координат, вообще говоря, не применим, поскольку формы колебаний оказываются связанными [2, 4, 9, 11, 12]. Предпочтительными оказываются интегральные методы. Приведение дифференциальной системы к интегральному уравнению является лишь изменением формы постановки задачи, хотя и обладает определенной спецификой. Пусть имеется линейное дифференциальное уравнение *S*-го порядка

$$y^{(S)}(x) + a_1(x)y^{(S-1)}(x) + \ldots + a_S(x)y^{(0)}(x) = F(x), \qquad (29)$$

где $a_1(x),\ldots,+a_S(x)\,u\,F(x)$ – заданные непрерывные функции от *x* на рассматриваемом интервале изменения переменной.

Допустим, что начальные условия задачи, описываемой дифференциальным уравнением (29), определены для какого-либо значения аргумента $x = a$ в виде следующих равенств:

$$y(a) = C_0, \quad y'(a) = C_1,\ldots, \quad y^{(S-1)}(a) = C_{S-1}. \qquad (30)$$

Решение уравнения (29) с начальными условиями (30) может быть сведено к решению интегрального уравнения Вольтерра второго рода

$$\varphi(x)+\int_a^x \mathrm{K}(x,\xi)\,\varphi(\xi)\,d\xi = f(x). \tag{31}$$

Это делается следующим образом. Положим, что

$$y^{(S)} = \varphi(x). \tag{32}$$

Интегрируя обе части равенства (32), находим

$$y^{(S-1)} = C_{S-1} + \int_a^x \varphi(\xi)\,d\xi, \tag{33}$$

где C_{S-1} – постоянная интегрирования, равная начальному значению (S–1)-й производной в точке a, принятой за начало отсчета. Интегрируя таким же образом равенство (33), получаем $y^{(S-1)} = C_{S-1}\dfrac{x-a}{1} + C_{S-2}$ и т.д., в результате находим

$$y = C_{S-1}\frac{(x-a)^{(S-1)}}{(S-1)!} + C_{S-2}\frac{(x-a)^{(S-2)}}{(S-2)!} + \ldots + C_1 x + C_0 + \underbrace{\int_a^x \ldots \int_a^x}_{S\ раз} \varphi(\xi)\,d\xi^S. \tag{34}$$

Используя тождество Дирихле

$$\underbrace{\int_a^x \ldots \int_a^x}_{m\ раз} \varphi(\xi)\,d\xi^m = \int_a^x \frac{(x-\xi)^{(m-1)}}{(m-1)!}\varphi(\xi)\,d\xi$$

и возвращаясь к дифференциальному уравнению (29), видим, что его можно записать в виде (31), если положить:

$$\mathrm{K}(x,\xi) = \sum_{m=1}^{S} a_m(x)\frac{(x-\xi)^{m-1}}{(m-1)!}, \tag{35}$$

$$f(x) = F(x) - C_{S-1}a_1(x) - (C_{S-1}x + C_{S-2})a_2(x) - \ldots - \left[C_{S-1}\frac{(x-a)^{(S-1)}}{(S-1)!} + \ldots + C_1 x + C_0\right]a_S(x). \tag{36}$$

Обратно, решение уравнения (31) с K и f, определенными по формулам (35) и (36), будет эквивалентно решению задачи Коши для линейного дифференциального уравнения (29).

Аналогично тому, как линейное дифференциальное уравнение (29) с классическими начальными условиями (30) приводит к интегральному уравнению Вольтерра, это же дифференциальное уравнение при добавочных условиях на обоих концах $x = 0$ и $x = L$ основного интервала $(0, L)$, приводит к интегральному уравнению Фредгольма [12–14]. Общий класс таких добавочных условий можно получить, потребовав, например, чтобы S линейных комбинаций $2S$ величин

$$y(0), y'(0), \ldots, y^{S-1}(0), y(L), y'(L), \ldots, y^{S-1}(L) \tag{37}$$

принимали заданные значения, то есть, чтобы

$$\sum_{m=0}^{S-1}\alpha_{\kappa m}y^{(m)}(0) - \sum_{m=0}^{S-1}\beta_{\kappa m}y^{(m)}(L) = C_\kappa \quad (\kappa = 0,1,\ldots,S-1), \tag{38}$$

где $\alpha_{\kappa m}$, $\beta_{\kappa m}$ и C_κ – заданные постоянные.

Если $C_0 = C_1 = \ldots = C_{S-1} = 0$, то можно рассматривать однородные краевые условия

$$\sum_{m=0}^{S-1}\alpha_{\kappa m}y^{(m)}(0) = \sum_{m=0}^{S-1}\beta_{\kappa m}y^{(m)}(L) \quad (\kappa = 0,1,\ldots,S-1). \tag{39}$$

Согласно общей теории интегральных уравнений [12–14] уравнение (29) вместе с краевыми условиями (39) называют системой Штурма–Лиувилля, которая эквивалентна интегральному уравнению Фредгольма второго рода с параметром λ:

$$\varphi(x)=\lambda\int_0^L G(x,\xi)\,m(\xi)\varphi(\xi)d\xi+\gamma(x), \tag{40}$$

где $\gamma(x)=\int_0^L G(x,\xi)\,F(\xi)d\xi$ – заданная функция x; $\varphi(\xi)$ – неизвестная функция; $G(x,\xi)$ – функция Грина.

Существуют три различных метода решения этого уравнения. Один из таких – это метод развитый Гильбертом и Шмидтом, который выражает $\varphi(x)$ через так называемые собственные функции, которые обыкновенно представляют собой решения соответствующего однородного уравнения получаемого из (40), полагая в последнем $\gamma(x)=0$:

$$\varphi(x)-\lambda\int_0^L G(x,\xi)\,m(\xi)\varphi(\xi)d\xi=0. \tag{41}$$

Однако, несмотря на то, что в (41) функция Грина $G(x,\xi)$ симметрична, ядро $G(x,\xi)m(\xi)$ этого уравнения, из-за множителя $m(\xi)$, несимметрично, но его можно симметризировать, если обе части уравнения (41) умножить на $\sqrt{m(x)}$, что всегда допустимо, так как $m(\xi)$ положительно. Полагая

$$\psi(x)=\sqrt{m(x)}\cdot\varphi(x), \qquad \tilde{G}(x,\xi)=G(x,\xi)\sqrt{m(x)m(\xi)}=\tilde{G}(\xi,x), \tag{42}$$

получаем для новой неизвестной функции ψ однородное интегральное уравнение Фредгольма второго рода с симметричным самосопряженным $\left(\tilde{G}(x,\xi)=\overline{\tilde{G}}(\xi,x)\right)$ ядром:

$$\psi(x)=\lambda\int_0^L \tilde{G}(x,\xi)\psi(\xi)d\xi, \tag{43}$$

в котором нас будет интересовать спектр собственных значений и собственные функции. Но это уравнение, вообще говоря, не имеет никакого решения, кроме тривиального: $\psi(x)\equiv 0$. Однако существует ряд чисел $\lambda_1,\lambda_1,\ldots,\lambda_n,\ldots$, называемых собственными значениями; для каждого из которых, однородное уравнение имеет ненулевое решение, все они действительны и представляют собой квадраты частот свободных колебаний системы ($\lambda=\omega^2$). Система, следовательно, может совершать периодические колебания не с любой частотой, а только с частотами, равными корням квадратным из характеристических чисел. При этом соответствующие фундаментальные функции $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$,…симметризированного уравнения и функции $\varphi_n(x)=\psi_n(x)\big/\sqrt{m(x)}$, дающие амплитуды колебаний точек системы образуют нормированную ортогональную систему в основном интервале $(0, L)$ с характеристической функцией $m(x)$, то есть удовлетворяют соотношениям

$$\int_0^L \psi_n(x)\psi_\nu(\xi)dx=\int_0^L m(x)\varphi_n(x)\varphi_\nu(x)dx=\begin{cases}0, n\neq\nu,\\ 1, n=\nu.\end{cases} \tag{44}$$

Считая, что задача о собственных колебаниях решена, функции $\psi_\nu(x)$ найдены – воспользуемся общей теорией метода факторизованных возмущений [17]. В частности, можно показать, что *для непустого ω – множества, такого, что для любого принадлежащего ему фиксированного значения ω, найдется единственная функция $\Re(x,\xi;\omega^2)$ двух координатных переменных x и ξ и одного комплексного переменного ω, такая, которая определена на квадрате $(0\le x,\xi\le L)$; непрерывна во всех точках $x\in[0,L];\xi\in[0,L]$; симметрична; удовлетворяет уравнению:*

$$\left[A_0-\omega^2A_2\right]\Re(x,\xi;\omega^2)=\delta(x-\xi) \tag{45}$$

и представима соотношением вида

$$\Re\left(x,\xi;\omega^2\right)=\tilde{G}\left(x,\xi\right)+\Gamma\left(x,\xi;\lambda\right), \tag{46}$$

где $\Re\left(x,\xi;\omega^2\right)$ – частотная гриновская функция (ЧГФ); $\tilde{G}\left(x,\xi\right)$ – обычная или обобщенная функция Грина статической задачи, она единственна, симметрична $\tilde{G}\left(x,\xi\right)=\tilde{G}\left(\xi,x\right)$ в вещественном случае ($\tilde{G}\left(x,\xi\right)=\left|\tilde{G}\left(\xi,x\right)\right|^*$ в комплексном случае) и на квадрате $\left(0\le x,\,\xi\le L\right)$ вместе со своей производной $\dfrac{\partial}{\partial x}\tilde{G}\left(x,\xi\right)$ непрерывна как функция двух переменных; $\Gamma\left(x,\xi;\lambda\right)$ – резольвента уравнения Фредгольма второго рода со статической функцией Грина $G\left(x,\xi\right)$ системы в качестве нагруженного ядра

$$\Gamma\left(x,\xi;\lambda\right)-\lambda\int_0^L G\left(x,z\right)\Gamma\left(z,\xi;\lambda\right)m\left(z\right)dz=G\left(x,\xi\right). \tag{47}$$

Функция $\Re\left(x,\xi;\omega^2\right)$, при любом фиксированном и допускающем ее существование ω, является гриновской функцией решаемой задачи, и, как все простые гриновские функции, совпадает с ядром интегрального представления обратного оператора задачи

$$\left[\mathcal{D}\left(\omega\right)\right]^{-1}=\left[A_0-\omega^2A_2\right]^{-1}, \tag{48}$$

и, в соответствии с теоремой Гильберта–Шмидта [13, 14], представляется абсолютно и равномерно сходящимся рядом

$$\Re\left(x,\xi;\lambda\right)=\tilde{G}\left(x,\xi\right)+\lambda\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\Psi_\nu\left(x\right)\Psi_\nu^T\left(\xi\right)}{\lambda_\nu\left(\lambda_\nu-\lambda\right)}. \tag{49}$$

Принимая во внимание очевидное равенство $\lim\limits_{\lambda\to0}\Re\left(x,\xi;\lambda\right)=\tilde{G}\left(x,\xi\right)$, и известное соотношение

$$\tilde{G}\left(x,\xi\right)=\left(\sum_{\nu=1}^{\infty}\Psi_\nu\left(x\right)\Psi_\nu^T\left(\xi\right)\right)\Big/\nu_\nu\,, \tag{50}$$

которое, в силу симметрии и положительности ядра $\tilde{G}\left(x,\xi\right)$, сходится по теореме Мерсера [13, 14] абсолютно и равномерно при независимом изменении переменных в области $\left(0\le x,\,\xi\le L\right)$, для всех $\lambda\ne\lambda_\nu\left(\nu=1,2,\ldots\right)$ и $x,\xi\in\left[0,L\right]$, будем иметь матрицу

$$\Re\left(x,\xi;\lambda\right)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\Psi_\nu\left(x\right)\Psi_\nu^T\left(\xi\right)}{\lambda_\nu-\lambda}. \tag{51}$$

Полагая, что на вход системы подается внешнее воздействие $f\left(x,t\right)=e^{-i\omega t}F\left(x\right)$, где i – произвольное комплексное число $\left(i=\sqrt{-1},\quad t\in\left(-\infty,+\infty\right)\right)$, а $F\left(x\right)$ – регулярная функция аргумента x и считая, что существует представление $y\left(x,t\right)=e^{-i\omega t}Y\left(x\right)$ и возможен переход к частотной ω – параметризованной (не содержащей времени t) задаче, решение задачи по определению комплекснозначных функций амплитуд вещественного переменного $Y(x)$, определенных на $[0, L]$ для каждого $\lambda\ne\lambda_\nu$, можно сформулировать в следующем виде [15]: *Для любого правильного λ и F найдется решение, причем единственное и представимое в виде:*

$$Y\left(x\right)=\int_0^L\Re\left(x,\xi;\lambda\right)F\left(\xi\right)d\xi\,, \tag{52}$$

при этом оператор $\left[\mathcal{D}\left(\omega\right)\right]^{-1}$ *обратим и справедливо тождество*

$$\left[\mathcal{D}(\omega)\right]^{-1}\delta(x-\xi)\equiv\Re(x,\xi;\lambda)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\Psi_\nu(x)\Psi_\nu^T(\xi)}{\lambda_\nu-\lambda}. \tag{53}$$

Доказательство тривиальное и получается подстановкой формулы гриновской функции в предполагаемое решение (52), то есть доказательство напоминает типичный прием решения дифференциальных уравнений: когда мы полагаем решение в определенном виде, а затем подставляем его в дифференциальное уравнение и убеждаемся, что последнее выполняется.

Если в формулах (53) и (52) заменить оператор вида $\left[\mathcal{D}(\omega)\right]^{-1}=\left[A_0-\omega^2A_2\right]^{-1}$ на оператор $\left[\mathcal{D}^*(i\omega)\right]^{-1}=\left[A_0-\omega^2A_2+i\omega A_1\right]^{-1}$, а λ_ν *на* $\lambda_\nu^*=\overline{Z}^*\lambda_\nu$ и, соответственно, $\tilde{G}(x,\xi)$ на $\tilde{G}(x,\xi)=\overline{Z}^*\tilde{G}(x,\xi)$, где $Z^*=\gamma+i\text{æ}$ – комплексное число, а $\overline{Z}^*$ – комплексно сопряжённое число, то для диссипативной системы получим:

$$Y^*(x)=\int_0^L\Re^*(x,\xi;\lambda)F^*(\xi)d\xi, \tag{54}$$

$$\Re^*(x,\xi;\lambda)=\tilde{G}^*(x,\xi)+\lambda\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\Psi_\nu(x)\Psi_\nu^T(\xi)}{\lambda_\nu^*\left(\lambda_\nu^*-\lambda\right)}. \tag{55}$$

На основании (50) и выражения $\tilde{G}(x,\xi)=\overline{Z}^*\tilde{G}(x,\xi)$, решение (54) может быть приведено к виду:

$$Y^*(x;\lambda)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\Psi_\nu(x)}{\lambda_\nu^*-\lambda}\int_0^L\Psi_\nu^T(\xi)F^*(\xi)d\xi=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\Psi_\nu(x)\overline{y}_\nu^*}{\lambda_\nu^*-\lambda}=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\Psi_\nu(x)}{\lambda_\nu^*-\lambda}\overline{y}_\nu^*e^{i\overline{\beta}\nu}, \tag{56}$$

а *j*-я координата вектора Y^* представлена выражением:

$$y_j^*(x;\lambda)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\left|y_{\nu j}^*\right|e^{-i\alpha_j}; \tag{57}$$

где

$$\left|y_{\nu j}^*\right|=\left|y_{\nu j}^*(x;\lambda)\right|=\frac{\left|\psi_{\nu j}(x)\overline{y}_\nu^*\right|}{\sqrt{\left(\gamma\lambda_\nu-\lambda\right)^2+\text{æ}^2\lambda_\nu^2}};\ \alpha_{\nu j}=\beta_\nu-\overline{\beta}_\nu;\beta_\nu=arctg\left(\frac{\text{æ}\lambda_\nu}{\gamma\lambda_\nu-\lambda}\right). \tag{58}$$

Тогда обобщенный отклик $\mathrm{Y}^*(x,t)$ системы с демпфированием на гармоническое воздействие с амплитудой $F^*(\xi)$ и частотой $\sqrt{\lambda}$ будет иметь вид:

$$\mathrm{Y}^*(x,t)=\int_0^L\Re^*(x,\xi;\lambda)F^*(\xi)d\xi\cdot e^{i\sqrt{\lambda}\cdot t}=Y^*(x)e^{i\sqrt{\lambda}\cdot t}, \tag{59}$$

а выражение для *j*-й координаты вектора $\mathrm{Y}^*(x,t)$, соответственно, вид:

$$y_j^*(x,t)=y_j^*(x)e^{i\sqrt{\lambda}\cdot t}=\left|y_j^*(x)\right|e^{i\left[\sqrt{\lambda}\cdot t-\alpha_j(x)\right]}. \tag{60}$$

Следовательно, стационарный режим вынужденных колебаний СМС находится из уравнений (52) и (59), в которых матрица $\Re(x,\xi;\lambda)$ играет роль матрицы преобразования *S* мерного пространства алгебраических (вещественных или комплексных) амплитуд обобщённых сил при одночастотном гармоническом воздействии на механическую систему с *S* степенями свободы в соответствующее пространство алгебраических амплитуд обобщенных координат системы. Зная свойства и характеристики элементов этой матрицы, можно сделать заключение о поведении и динамических свойствах системы в целом. Для определения основных динамических свойств, например, консервативной системы воспользуемся элементами $\wp_{\kappa j}(x,\xi;\lambda)$ матрицы $\Re(x,\xi;\lambda)$, которые в соответствии с уравнениями (49), (50) и (51) имеют вид:

$$\wp_{\kappa j}(x,\xi;\lambda)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\Psi_{\nu\kappa}(x)\Psi_{\nu j}(\xi)}{\lambda_\nu-\lambda}=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\lambda_\nu}{\lambda_\nu-\lambda}\delta_{\nu\kappa j}(x,\xi), \tag{61}$$

где $\delta_{\nu\kappa j}(x,\xi)$ – собственные податливости, которые определяются соотношением

$$\delta_{\nu\kappa j}(x,\xi)=\left(\Psi_{\nu\kappa}(x)\Psi_{\nu j}(\xi)\right)\Big/\lambda_\nu\ . \tag{62}$$

В соответствии с тем, что $\delta_{\kappa j}(x,\xi)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\delta_{\nu\kappa j}(x,\xi)$, будем иметь

$$\delta_{\kappa j}(x,\xi)=\wp_{\kappa j}(x,\xi,0), \tag{63}$$

то есть, при нулевой возмущающей частоте ($\lambda = 0$) функция $\wp_{\kappa j}=\delta_{\kappa j}$ есть элемент матрицы Грина $\tilde{G}(x,\xi)$. Фиксируя x и ξ в каждом члене $\wp_{\nu\kappa j}$ суммы (61) получаем выражение частотной гриновской функции одномассовой системы, имеющей собственное число λ_ν и собственную статическую податливость $\delta_{\nu\kappa j}$. Отсюда следует, что динамическая система с S степенями свободы, характеризуемая матрицей ЧГФ (см. формулы 49–51), может рассматриваться как СМС, образованная из S самостоятельных подсистем, имеющих одну степень свободы и соединенных последовательно. Каждая из этих подсистем имеет собственное число λ_ν и матрицу собственной податливости $\tilde{G}_\nu(x,\xi)=\left[\delta_{\nu\kappa j}(x,\xi)\right]$, такие, что

$$\Re(x,\xi;\lambda)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\lambda_\nu}{\lambda_\nu-\lambda}\tilde{G}_\nu(x,\xi). \tag{64}$$

Следовательно, *методом системного анализа (МСА) можно назвать математический метод, базирующийся на свойствах и понятиях матрицы ЧГФ, а основным его уравнением считать уравнение, выражающее обобщенный комплексный закон Гука*:

$${}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}=\sum_{N=1}^{\ell_м}\sum_{J=1}^{S_N}\sum_{\eta=1}^{n_J}{}^{N}_{м}\Re^{\xi\eta}_{\kappa J}(\lambda)F^{\eta}_{j},\ \mathrm{K}\in\mathrm{M};\ j\in\mathrm{N}, \tag{65}$$

где ${}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}$ – алгебраическая (комплексная или действительная) амплитуда стационарных вынужденных колебаний (СВК) *к*-й точки *м*-го структурного элемента СМС по обобщенному направлению ξ, возбуждаемых *j*-ми обобщёнными силовыми функциями F^{η}_{j}, имеющими различные фазы, различные обобщенные направления η, но общую круговую частоту ω; ${}^{N}_{м}\Re^{x\eta}_{\kappa J}(\lambda)$ – частотная гриновская функция какой-либо *M*-й подсистемы, или *M*-го структурного элемента (абсолютно твердого, упругого или упруго–жидкого) СМС. При этом нижний индекс *M* указывает номер тела, или подсистемы (структурного элемента) СМС, которому принадлежит точка К, а верхний индекс *N* – номер тела (подсистемы), структурного элемента СМС, которому принадлежит *J*-я точка. Таким образом, основное уравнение МСА позволяет определить амплитуду стационарных вынужденных колебаний в произвольной точке любой СМС через известные ЧГФ, амплитуды и фазы силовых факторов, имеющих общую круговую частоту ω.

Применив к ${}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}$ Эрмитово разложение и выражая модуль ${}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}=\sqrt{\left(\mathrm{Re}\,{}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}\right)^2+\left(Jm\,{}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}\right)^2}$ и аргумент ${}_{м}\alpha^{\xi}_{\kappa}=arctg\left(Jm\,{}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}\Big/\mathrm{Re}\,{}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}\right)$ через действительную и мнимую части числа ${}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}$, находим закон СВК *к*-й точки системы по ξ обобщенному направлению

$$q^{\xi}_{\kappa}={}_{м}\tilde{A}^{\xi}_{\kappa}(\omega)\cos\left(\omega t+{}_{м}\alpha^{\xi}_{\kappa}\right).$$

Так, например, для системы (6), на *r*-й вход который подается воздействие вида $F_r(t)=F_{0r}\cos\omega t$, а демпфирование учитывается по гипотезе вязкого трения, закон СВК будет иметь вид, полностью совпадающий с результатом (28), полученным методом главных координат.

Таким образом, задача отыскания динамического отклика системы на внешнее воздействие свелась к нахождению ЧГФ, что представляет собой, в большинстве практических случаев, сложную вычислительную проблему. Однако, анализируя изложенный выше материал приходим к выводу, что элементы $\wp_{kj}(x,\xi;\lambda)$ матрицы ЧГФ $\Re_{\kappa J}^{\xi\eta}(\lambda)$ есть динамические податливости (ДП) структурных элементов системы, то есть $\Re_{\kappa J}^{\xi\eta}(\lambda) \equiv \mathcal{P}_{\kappa J}^{\xi\eta}(\lambda)$. Следовательно, *МСА – математический метод, базирующийся на свойствах и понятиях матрицы ЧГФ (ДП), а основным его уравнением является уравнение*:

$$ {}_{м}\tilde{A}_{\kappa}^{\xi} = \sum_{N=1}^{\ell_м}\sum_{J=1}^{S_N}\sum_{\eta=1}^{n_j} {}_{м}^{N}\Re_{\kappa J}^{\xi\eta}(\lambda) F_j^{\eta} \equiv \sum_{N=1}^{\ell_м}\sum_{J=1}^{S_N}\sum_{\eta=1}^{n_j} {}_{м}^{N}\mathcal{P}_{\kappa J}^{\xi\eta}(\lambda) F_j^{\eta},\ \mathrm{K}\in\mathrm{M};\ j\in\mathrm{N}. \tag{66}$$

Но введение основного уравнения МСА еще не упрощает решение задачи о колебаниях СМС, особенно при большом числе *S*, а в ряде случаев, например, синтезе и т.п. оказывается практически бесполезным. Более эффективным средством исследования СМС является выражение ЧГФ (ДКП) через ЧГФ (ДКП) изолированных подсистем, что позволяет сократить число необходимых операций в вычислениях [18]. Рассмотрим одно из таких средств. Операторная матрица $\mathcal{D}(\omega)$ СМС представляется как крупноблочная матрица $\mathcal{D}$, каждый диагональный блок которой $\mathcal{D}_D$, называемый ниже в тексте свободной диагональю, содержит в себе информацию о поведении изолированных подсистем, а информация о взаимодействии (связях) между подсистемами, образующими в целом СМС, содержится в ее недиагональных блоках. При установлении связей между отдельными подсистемами элементы матрицы $\mathcal{D}$ изменяются. Измененная матрица $\tilde{\mathcal{D}}$ представляется выражением

$$\tilde{\mathcal{D}} = \mathcal{D} - R, \tag{67}$$

в котором элементы матрицы $\mathcal{D}$ являются собственными операторами СМС, а элементы матрицы R – операторами взаимодействия. Если известна обратная матрица $\mathcal{P}$ для функции $\mathcal{D}$, то обратная функция для $\tilde{\mathcal{D}}(\tilde{\mathcal{D}}^{-1} = \tilde{\mathcal{P}})$ может быть получена по формуле

$$\tilde{\mathcal{P}} = \mathcal{P}(E - R\mathcal{P})^{-1}. \tag{68}$$

Таким образом, для определения выражения ЧГФ (ДКФ) исходной СМС через ЧГФ (ДКФ) изолированных подсистем все связи устраняются. Сложная механическая система приводится к совокупности изолированных подсистем. Восстановив часть связей и применив формулы (66) и (68), выражаются ЧГФ (ДКФ) промежуточной системы через ЧГФ (ДКП) изолированных подсистем. Восстановив все связи, получаем искомое выражение для ЧГФ (ДКП) всей СМС.

Рассмотрим для примера якобиевую (цепную) СМС $\mathcal{A}_Я$ с описывающим оператором $\hat{A}_Я$ вида:

$$\hat{A}_Я = \hat{A}_D + \hat{\Delta}_Я = \hat{A}_D + \begin{Vmatrix} \hat{O} & \hat{\kappa}_1 & \hat{O} & \cdots & \hat{O} & \hat{O} & \hat{O} \\ \hat{\chi}_1 & \hat{O} & \hat{\kappa}_2 & \cdots & \hat{O} & \hat{O} & \hat{O} \\ \hat{O} & \hat{\chi}_2 & \hat{O} & \cdots & \hat{O} & \hat{O} & \hat{O} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \hat{O} & \hat{O} & \hat{O} & \cdots & \hat{O} & \hat{\kappa}_{s-2} & \hat{O} \\ \hat{O} & \hat{O} & \hat{O} & \cdots & \hat{\chi}_{s-2} & \hat{O} & \hat{\kappa}_{s-1} \\ \hat{O} & \hat{O} & \hat{O} & \cdots & \hat{O} & \hat{\chi}_{s-1} & \hat{O} \end{Vmatrix}, \tag{69}$$

где $\hat{\Delta}_Я$ – оператор канала самодействия диагональной $\mathcal{A}_D$ системы; $\hat{O}$ – S×S матрица нулевых операторов; $\hat{A}_D$ – описывающий оператор свободной диагональной системы ($\hat{A}_D^{-1} = \hat{G}_D$ – гриновский оператор); $(\hat{\kappa}_j, \hat{\chi}_j)$ – операторные образующие каналов взаимодействия; $\hat{O}$ – нулевые операторы.

Анализ матричной структуры описывающего оператора $\hat{A}_Я$ (69) показывает, что якобиевая система $\mathcal{A}_Я$ представляет собой совокупность S взаимодействующих подсистем, в которой любая

из подсистем $\mathcal{A}_j (1 < j < S)$ взаимодействует с подсистемами $\mathcal{A}_{j-1}, \mathcal{A}_{j-1}$ соответственно, в то время как каждая из оконечных подсистем $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_S$ взаимодействует только с одной подсистемой: партнером $\mathcal{A}_1$ по $(\hat{\kappa}_1, \hat{\chi}_1)$ – взаимодействию является подсистема $\mathcal{A}_2$; соответственно партнером $\mathcal{A}_S$ по $(\hat{\kappa}_{S-1}, \hat{\chi}_{S-1})$ – взаимодействию оказывается подсистема $\mathcal{A}_{S-1}$.

Один из алгоритмов построения S – представления гриновского оператора $\hat{G}_\Im$ якобиевой системы (69) может быть представлен в виде:

$$\hat{G}_\Im = \left\{ \hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft^{-1} \hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft^{-1} + \hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft^{-1} \hat{K}_\blacktriangleleft \hat{\hat{K}} \left[\hat{\Im} - \hat{\hat{X}} \hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft^{-1} \hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft^{-1} \hat{\hat{K}} \right]^{-1} \hat{\hat{X}} \hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft^{-1} \hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft^{-1} \right\} \hat{G}_\mathcal{D}, d$$

$$\hat{G}_\Im = \hat{G}_\mathcal{D} \left\{ (\hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft^0)^{-1} (\hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft^0)^{-1} + (\hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft^0)^{-1} (\hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft^0)^{-1} \hat{\hat{K}}^0 \left[\hat{\Im} - \hat{\hat{X}}^0 (\hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft^0)^{-1} \times (\hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft^0)^{-1} \hat{\hat{K}}^0 \right]^{-1} \hat{\hat{X}}^0 (\hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft^0)^{-1} (\hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft^0)^{-1} \right\},$$

где $(\hat{\hat{X}}, \hat{\hat{K}}), (\hat{\hat{X}}^0, \hat{\hat{K}}^0)$ – операторные S×S матрицы образующих каналов самодействия возмущенной диагональной $\mathcal{A}_\mathcal{D}$ системы; первые из них определены на линейном пространстве $E = \hat{G}_\mathcal{D} \mathcal{F}$, вторые – на линейном пространстве $\mathcal{F}$ допустимых входов; $\hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft, \hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft (\hat{\hat{X}}_\blacktriangleleft \hat{\hat{K}}_\blacktriangleleft)$ – операторные S×S нижние (верхние) треугольные матрицы; $\hat{\Im}$ – операторная S×S единичная матрица; $\hat{G}_\mathcal{D}$ – гриновский оператор диагональной системы $\mathcal{A}_\mathcal{D}$.

Анализ вышеизложенного показывает, что в своей математической основе МСА базируется на изучении динамики свободных и некоторых фиктивных систем. Является достаточно общим, описывающим динамические свойства СМС различной природы, не требующим составление дифференциальных уравнений. Его эффективность особенно ярко проявляется при исследовании СМС содержащих в своем составе хотя бы одну континуальную подсистему, а также в задачах, в которых исследуют изменение свойств и структуры системы или изменении только некоторых ее параметров, поскольку метод позволяет при каждом изменении структуры системы или каких-либо ее параметров повторять сравнительно небольшую часть полного расчёта, который требуется при использовании традиционных методов [16]. В ряде случаев этот метод оказывается изоморфным таким известным методам, как методу факторизованных возмущений; исследования сложных систем по частям; сечений; парциальных откликов; динамических жесткостей (податливостей); части некоторых матричных методов: начальных параметров, методу прогонки; МКЭ, а также методу (с аналогичным названием), который получил применение в США при динамическом анализе и испытаниях космических комплексов, представляемых в виде СМС, состоящих из подсистем: космического аппарата; носителя; пусковой установки [17].

Литература

1. Суслов Г.К. Теоретическая механика. – М.: Гостехиздат, 1946. – 655 с.
2. Чувиковский В.С. Численные методы расчетов в строительной механике корабля. – Л.: Судостроение, 1976. – 374 с.
3. Вибрации в технике: Справочник в 6 томах / Под ред. чл.-корр. АН СССР. В.В. Болотина. – М.: Машиностроение, 1978. – Т. 1. – 352 с.
4. Николаенко Н.А., Ульянов С.В. Статическая динамика машиностроительных конструкций. – М.: Машиностроение, 1977. – 368 с.
5. Светлицкий В.А. Механика стержней. В 2-х частях. Часть II: Динамика. – М.: Высшая школа, 1987. – 304 с.
6. Шеповалов Е.Н. Математическое моделирование движения железнодорожных транспортных средств // Руководящие технические материалы, выпуск IX. – Челябинск: ЮУрГУ, 1999. – С. 59–107.
7. Абгарян К.А. Матричные и асимптотические методы в теории линейных систем. – М.: Наука, 1973. – 431 с.
8. Колесников К.С. Жидкостная ракета как объект регулирования. – М.: Машиностроение, 1969. – 298 с.

9. Соболев С.Л. Уравнения математической физики. – М. – Л., 1950. – 424 с.

10. Шеповалов Е.Н. Математическое моделирование движения механических систем с упруго-жидкими звеньями // Неоднородные конструкции: Труды Уральского семинара. – Екатеринбург: УрО РАН, 1999. – С. 33–70.

11. Шеповалов Е.Н. Исследование динамической нагруженности систем с упруго-жидкими звеньями // Неоднородные конструкции: Труды Уральского семинара. – Екатеринбург: УрО РАН, 1999. – С. 71–81.

12. Привалов И.И. Интегральные уравнения. – М. – Л.: ОНТИ, 1937.

13. Смирнов В.И. Курс высшей математики в 4 томах. – М.: Наука, 1974. – Том 4. – 336 с.

14. Трикоми Ф. Интегральные уравнения. – М.: Иностранная литература, 1960.

15. Азаров В.Л., Лупичёв Л.Н., Тавризов Г.А. Математические методы исследования сложных физических систем. – М.: Наука, 1975. – 342 с.

16. Шеповалов Е.Н. Эффективные математические методы исследования колебаний сложных механических систем, содержащих упругие и жидкие среды // Наука и технология. Серия «Итоги диссертационных исследований» – М.: РАН, 2003. – С. 119–152.

17. Yi-Yuan Yu. Dynamic Analysis of Flexible Space Vehicle Systems Subjected to Arbitrary Force and Motion Inputs // I. of the Astronavtical Sciences. – 1968. – Vol. XV. – № 4. – P. 183–193.

Поступила в редакцию 1 марта 2006 г.

УДК 51-72:531 + 517.938

ПОСТРОЕНИЕ ЧАСТОТНОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА ДЛЯ СВОБОДНОГО УПРУГОГО ОБЪЕКТА, ПОЛОСТИ КОТОРОГО ЧАСТИЧНО ЗАПОЛНЕНЫ ЖИДКОСТЬЮ

Е.Н. Шеповалов

Разработаны: методика построения обобщенной функции Грина; частотная гриновская функция для свободного упругого стержня (с произвольным распределением масс и изгибных жесткостей), содержащего полости, частично заполненные жидкостью.

Известно [1, 2], что нахождение динамического отклика сложной механической системы на внешнее воздействие сводится к построению частотной гриновской функции, что представляет собой, в большинстве практических случаев, сложную вычислительную проблему.

Цель работы – построение частотной функции Грина.

Для решения этой задачи тонкостенную конструкцию с полостями, частично заполненными жидкостью будем отождествлять со свободным бездиссипативным упругим стержнем, имеющим достаточное удлинение в направлении оси, лежащей на пересечении плоскостей симметрии ($L \gg R_0$, где L – длина, R_0 – характерный размер поперечного сечения). С переменным по длине распределением моментов инерции и модулей упругости, а также масс. Допускаем существование сосредоточенных масс, локализованных в интервале $(0, L)$.

Исследуя движение упругого стержня, будем рассматривать две системы координат: прямоугольную – $\overline{0}\xi\eta\zeta$, которую условно будем считать неподвижной (инерциальной), и прямоугольную координатную систему $OXYZ$, связанную с упругим стержнем, находящимся в недеформированном состоянии. Система $OXYZ$ такова, что рассматриваемый упругий континуум в неподвижном состоянии покоится на отрезке $[0, L]$ оси OX, а оси OY и OZ параллельны главным осям инерции сечения недеформированного стержня. Начало координат поместим в плоскости левого среза стержня.

Обозначим количественные характеристики: t – время, отсчитанное от нужного момента, $y(x,t)$ – поперечная временная эволюция точки $x \in [0, L]$ колеблющегося континуума, $m_0(x)$ – массовое распределение конструкции; E_0 – модуль упругости материала конструкции; $I_0(x)$ – момент инерции поперечного сечения конструкции в точке x относительно нейтральной оси изгиба, $E_0 I_0(x) > 0$ и непрерывна на $[0, L]$, кроме конечного числа точек, в которых может претерпевать скачки на конечные величины; $q(x,t)$ – погонные внешние силы.

Используя известное соотношение теории изгиба [3–5], являющееся следствием закона Гука, гипотезы плоских сечений, устанавливающие связь между кривизной упругой линии и изгибающим моментом, пренебрегая продольными силами и инерцией поворота поперечных сечений, рассматривая только изгибные деформации, получим уравнение поперечных колебаний стержня

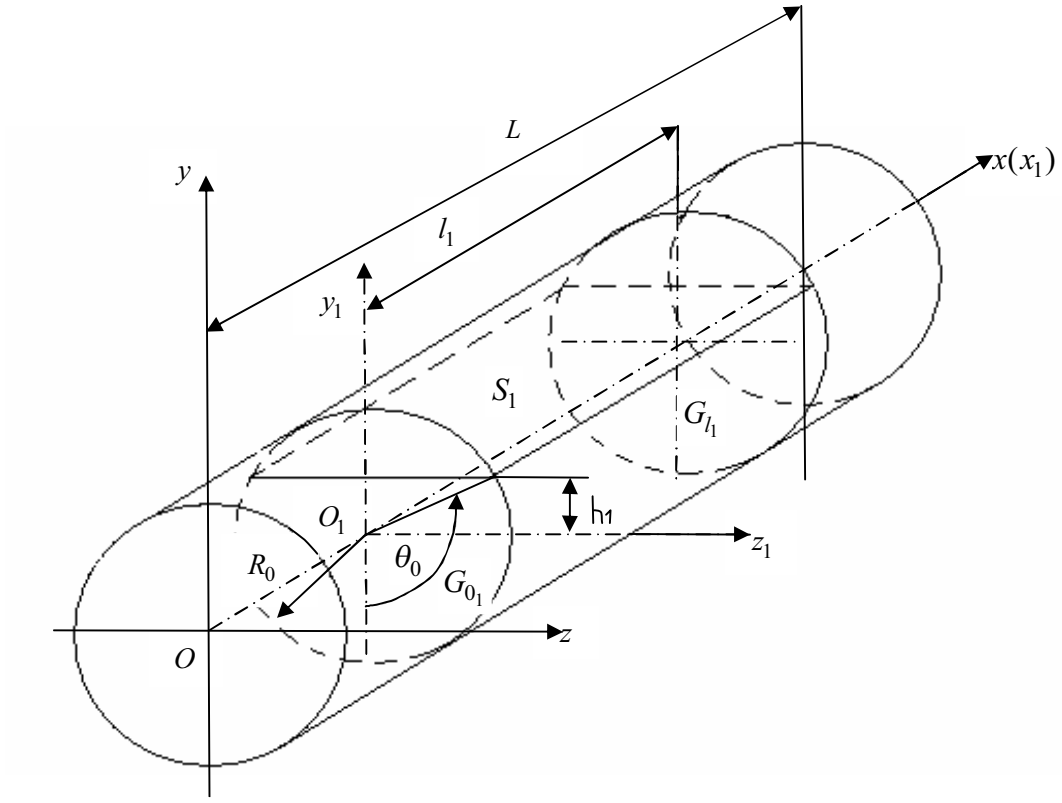
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[E_0 I_0(x)\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\right] + m_0(x)\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = q(x,t)\ , \tag{1}$$

удовлетворяющее граничным условиям:

$$\left.\begin{aligned}\left[E_0 I_0(x)\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\,y(x,t)\right]_{x=0,\,L} &= 0;\\ \left[\frac{\partial}{\partial x}E_0 I_0(x)\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\,y(x,t)\right]_{x=0,\,L} &= 0.\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

Для определения сил, действующих со стороны жидкости на стенки отсека при его колебаниях, ограничимся рассмотрением случая только одной полости. Располагаем подвижную систе-

му координат $0_1 x_1 y_1 z_1$, имеющую начало в плоскости левого днища недеформированной полости, таким образом, чтобы в невозмущенном положении механической системы «стержень-жидкость» ось $0_1 y_1$ была перпендикулярна свободной поверхности жидкости, а ось $0_1 x_1$ совпадала с продольной осью стержня (см. рисунок).



Рисунок

Решая гидродинамическую задачу [6], находим:

– выражение для потенциала скоростей

$$\Phi = \dot{\eta}_c(t)(y - y_c) + \dot{\varphi}\ (\mathrm{t})\Phi_3^* + \dot{\beta}_{11}(t)\psi_{11}; \tag{3}$$

– составляющую давления P_d, обусловленную ускорением емкости $\ddot{\eta}_c(t)$, $\ddot{\varphi}\ (\mathrm{t})$, в инерциальном пространстве $\overline{0}\xi\eta\zeta$, а также волновым движением жидкости $\ddot{\beta}_{11}(t)$

$$P_d = -\rho\left[\ddot{\eta}_c(y - h_1) + \ddot{\varphi}\ \Phi_3^* + \ddot{\beta}_{11}(t)\psi_{11} + g\frac{\partial\psi_{11}}{\partial y}\beta_{11}\right]; \tag{4}$$

– интенсивность поперечной поверхностной нагрузки q_d и соответствующего момента q_d^0 (приложенного к j-му днищу), обусловленных действием на стенки отсека со стороны жидкости, а также реакциями связей между колебаниями стержня и волновых движений жидкости:

$$\left.\begin{aligned} q_d(x_1,t) &= \rho\left\{\ddot{h}_c\int_\Gamma (y_1 - h_1)n_{y_1}ds + \ddot{\varphi}\left[(x_1 - x_c)\int_\Gamma (y_1 - h_1)n_{y_1}ds + \int_\Gamma (\Phi_3^*)' n_{y_1}ds\right] + \right. \\ &+ \ddot{S}\left[\left(\vartheta(x_1) + (x_1 - x_c)\vartheta'(x_1)\right)\int_\Gamma (y_1 - h_1)n_{y_1}ds + \vartheta'(x_1)\int_\Gamma (\Phi_3^*)' n_{y_1}ds\right] + \ddot{\beta}_{11}\int_\Gamma \psi_{11}n_{y_1}ds + \beta_{11}g\int\frac{\partial\psi_{11}}{\partial y_1}ds\Bigg\}; \\ q_d^0(x_1,t) &= \rho\int_{G_j}(\vec{R}\times\vec{n}_1)\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}ds, \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

где $\Phi_3^* = y_c x_1 - x_c y_1 + \tilde{\Phi}_3$; $(\Phi_3^*)' = \Phi_3^* - (x_1 - x_c)(y_1 - y_c)$; $\psi_{11} = \frac{l_1}{\pi}\cos\left(\frac{\pi}{l_1}x_1\right)\frac{\mathrm{ch}\left[\frac{\pi}{l_1}(y_1 + R_0)\right]}{\mathrm{sh}(\pi b_1 / l_1)}$; ρ – плотность жидкости; l_1 – длина полости; n_{y_1} – проекция на ось $0_1 y_1$ орта внешней нормали $\vec{n}$ к смоченной боковой поверхности полости; Γ – смоченный контур поперечного сечения полости; G_j – смоченная поверхность j-го днища; $\vec{R}$ – радиус-вектор произвольной точки днища.

Применив δ – дельта-функции Дирака, формально объединяем сосредоточенные нагрузки с распределенными, записав погонную нагрузку $q(x_1,t)$ в виде обобщенной функции:

$$Q(x_1,t) = m(x) + q(x_1,t) + q^0(x_1,t),$$

где $m(x) = m_0(x) + \sum_{K=1}^{N}\delta_1(x - x_\kappa)m_\kappa$; $q(x_1,t) = \left[\delta_2(x - x_1^{(0)}) - \delta_2(x - x_1^{(0)} - l_1)\right]q_d(x_1,t)$;

$$q^{(0)}(x_1,t) = -\frac{\partial}{\partial x_1}\sum_j \delta_3(x - x_j)q_{jd}^{(0)}(x_1,t);\ m_0(x) > 0 \text{ и кусочно непрерывна на } [0,L]; \qquad (6)$$

$m_0(x) > 0$ и кусочно непрерывна на $[0,L]$; $m_\kappa > 0$ $x_\kappa \in (0,L)$, $K = 1,2,\ldots,N$ и $0 \le N \le \infty$;

$q_d > 0$ и непрерывна на $[0,l_1]$.

Рассматривая инерциальную нагрузку $q(x_1,t)$ как внешнюю, приложенную к балке статическую нагрузку, используя зависимости (5) и (6) получаем из (1) следующее интегро-дифференциальное уравнение, описывающее упругие поперечные колебания стержня с отсеком, частично заполненным жидкостью:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[E_0 I_0(x)\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\right] + m(x)\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} + q(x_1,t) = q^{(0)}(x_1,t), \qquad (7)$$

удовлетворяющее граничным условиям

$$\left[E_0 I_0(x)\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2}\right]_{x=0,L} = \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(E_0 I_0(x)\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2}\right)\right]_{x=0,L} = 0. \qquad (8)$$

Для установления эквивалентности задачи (7)–(8) с интегральным уравнением Фредгольма 2-го рода необходимо построить функцию Грина. Однако нетрудно заметить, что статический аналог задачи (7)–(8) обычной гриновской функции не имеет. Свободная система при $\lambda = 0$ имеет нетривиальное решение, превращая однородное уравнение в уравнение с непрерывным решением. Возникает необходимость построения обобщенной функции Грина.

Докажем, что $\forall \xi \in [0,L]$ *можно построить однозначную функцию двух переменных* $G(x,\xi)$, *непрерывную во всех точках вида* $x \in [0,L]$, $\xi \in (0,L)$ *и имеющую следующие свойства:*

1. Функция $E_0 I_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,\xi)$ *непрерывна по переменной* x на *замкнутом квадрате* $\mathcal{D} = \left\{(x,\xi) \mid 0 \le x,\xi \le L\right\}$ *и принадлежит классу* L_2 *на замкнутых треугольниках:* $0 \le x \le \xi \le L$, $0 \le \xi \le x \le L$.

2. Функция Грина симметрична

$$G(x,\xi) = G(\xi,t),\ (x,\xi) \in \mathcal{D}.$$

3. Функция $\frac{\partial}{\partial x}E_0 I_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,\xi)$ $\forall \xi \in [0,L]$ *непрерывна по переменной* x *в каждом из интервалов* $[0,\xi)$ и $(\xi,L]$, *за исключением точек* $x = \xi, x_1, \ldots x_N$, *где она имеет скачки на конечные величины* (см.(6)).

4. В каждом из интервалов $[0,\xi)$ и $(\xi,L]$ *функция Грина* $G(x,\xi)$ *удовлетворяет неоднородному уравнению и краевым условиям:*

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}E_0I_0(x)G(x,\xi)=\delta(x-\xi)+C_1(\xi)\tilde{q}(x)+C_2(\xi)x\tilde{q}(x) \tag{9}$$

$$1)\left[\frac{\partial}{\partial x}E_0I_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,\xi)\right]_{x=0}=0, \qquad 2)\left[\frac{\partial}{\partial x}E_0I_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,\xi)\right]_{x=L}=0; \tag{10}$$

$$1)\left[E_0I_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,\xi)\right]_{x=0}=0, \qquad 2)\left[E_0I_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,\xi)\right]_{x=L}=0; \tag{11}$$

$$\int_{x=0}^{L}G(x,\xi)m_0(x)dx=0\,; \tag{12}$$

$$\int_{x=0}^{L}G(x,\xi)xm_0(x)dx=0\,, \tag{13}$$

где $\tilde{q}(x)=m(x)+q(x_1,t)$,а $C_1(\xi)$и $C_2(\xi)$ – непрерывные функции, обеспечивающие совместность совокупности соотношений (9)–(13).

Интегрируя (9) в пределах от 0 до x и учитывая граничные условия $(10_{1)})$, находим

$$\frac{\partial}{\partial x}E_0I_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,\xi)=H_1(x-\xi)+C_1(\xi)\int_{z=0}^{x}\tilde{q}(z)dz+C_2(\xi)\int_{z=0}^{x}\tilde{q}(z)zdz\,, \tag{14}$$

где $H_1(x-\xi)$ – функция Хевисайда, обладающая следующими свойствами:

$$H_1(x-\xi)=\begin{cases}0 \text{ при } x<\xi;\\ 1 \text{ при } x\geq\xi.\end{cases} \tag{15}$$

Так как условие $(10_{1)})$выполнено, то сформулируем требования, предъявляемые к функциям $C_1(\xi)$ и $C_2(\xi)$, накладываемые условием $(10_{2)})$:

$$0=H_1(L-\xi)+C_1(\xi)\int_{z=0}^{L}\tilde{q}(z)dz+C_2(\xi)\int_{z=0}^{L}z\tilde{q}(z)dz\,, \tag{16}$$

то есть,

$$\left(\int_{z=0}^{L}\tilde{q}(z)dz\right)C_1(\xi)+\left(\int_{z=0}^{L}z\tilde{q}(z)dz\right)C_2(\xi)=-1\,. \tag{17}$$

Интегрируя (14) в пределах от 0 до x и учитывая соотношения (6) и $(11_{1)})$, получаем:

$$E_0I_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,\xi)=(x-\xi)H_1(x-\xi)+C_1(\xi)\int_{z_1=0}^{x}(x-z_1)\tilde{q}(z_1)dz_1+C_2(\xi)\int_{z_1=0}^{x}(x-z_1)z_1\tilde{q}(z_1)dz_1\,. \tag{18}$$

Следовательно, граничное условие $(11_{1)})$ этим выражением удовлетворено. Поступая аналогично предыдущему, используя условие $(11_{2)})$, сформулируем требование, предъявляемое к функциям $C_1(\xi)$ и $C_2(\xi)$:

$$0=(L-\xi)H_1(L-\xi)+C_1(\xi)\int_{z=0}^{L}(L-z)\tilde{q}(z)dz+C_2(\xi)\int_{z=0}^{L}(L-z)z\tilde{q}(z)dz\,. \tag{19}$$

Уравнение (19) совместно с (17) образуют систему двух линейных уравнений относительно неизвестных функций $C_1(\xi)$ и $C_2(\xi)$:

$$\left.\begin{aligned}\left(\int_{z=0}^{L}\tilde{q}(z)dz\right)C_1(\xi)+\left(\int_{z=0}^{L}z\tilde{q}(z)dz\right)C_2(\xi)=-1,\\ \left(\int_{z=0}^{L}(L-z)\tilde{q}(z)dz\right)C_1(\xi)+\left(\int_{z=0}^{L}(L-z)z\tilde{q}(z)dz\right)C_2(\xi)=-(L-\xi),\end{aligned}\right\} \quad (20)$$

определитель которой никогда в нуль не обращается. Действительно, нетрудно показать, что

$$\Delta\equiv\begin{vmatrix}\int_{z=0}^{L}\tilde{q}(z)dz; & \int_{z=0}^{L}z\tilde{q}(z)dz\\ \int_{z=0}^{L}(L-z)\tilde{q}(z)dz; & \int_{z=0}^{L}(L-z)z\tilde{q}(z)dz\end{vmatrix}=\left(\int_{z=0}^{L}z\tilde{q}(z)dz\right)^2-\left(\int_{z=0}^{L}\tilde{q}(z)dz\right)\left(\int_{z=0}^{L}z^2\tilde{q}(z)dz\right)\neq 0\,. \quad (21)$$

Имея в виду, что функция $\tilde{q}(z)$ подчиняется условиям (6), воспользуемся интегралом Стилтьеса [7]. Обозначим меру Стилтьеса интервала $[0,x]$ через $\sigma(x)\equiv\int_{z=0}^{x}\tilde{q}(z)dz$. Тогда, произведя фильтрацию входящих в $\tilde{q}(z)$ δ - функции в соответствии с известным соотношением

$$\int_{z=0}^{x}\delta(z-\xi)dz=\mathrm{H}(x-\xi)\equiv\begin{cases}0 \text{ if } x<\xi\\ 1 \text{ if } x\geq\xi,\end{cases}$$

и, учитывая одностороннюю непрерывность функции *Х*евисайда H(x-ξ) и свойства интеграла Стилтьеса, представим (21) в виде:

$$\Delta=\left(\int_{z=0}^{L}zd\sigma(z)\right)^2-\left(\int_{z=0}^{L}d\sigma(z)\right)\left(\int_{z=0}^{L}z^2d\sigma(z)\right). \quad (22)$$

Применяем к первому члену правой части (22) неравенство Буняковского–Стилтьеса

$$\left|\int_{z=0}^{L}\overline{f}_1(z)f_2(z)d\sigma(z)\right|^2\leq\left\|\int_{z=0}^{L}|f_1(z)|^2\,d\sigma(z)\right\|\left\|\int_{z=0}^{L}|f_2(z)|^2\,d\sigma(z)\right\|,$$

здесь $f_1(z), f_2(z)\in L_2[0,L]$, знак равенства достигается только в том случае, когда всюду на $[0,l]$ $f_1(z)=Cf_2(z)$, где C – константа. Полагая $f_1(z)=1$, $f_2(z)=z$, получаем

$$\left(\int_{z=0}^{L}zd\sigma(z)\right)^2<\left(\int_{z=0}^{L}d\sigma(z)\right)\left(\int_{z=0}^{L}z^2d\sigma(z)\right).$$

Таким образом, для любого распределения $\tilde{q}(z)$, удовлетворяющего условиям (6), будет иметь место

$$\Delta=\left[\left(\int_{z=0}^{L}z\tilde{q}(z)dz\right)^2-\left(\int_{z=0}^{L}\tilde{q}(z)dz\right)\left(\int_{z=0}^{L}z^2\tilde{q}(z)dz\right)\right]<0\,.$$

Следовательно, система (20) однозначно разрешима, а функции $C_1(\xi)$ и $C_2(\xi)$, делающие совместными уравнения (9) и граничные условия (10), (11), существуют и единственны. При их вычислении воспользуемся результатами работы [6]. Тогда определитель

$$\Delta=\left(\int_{z=0}^{L}z\tilde{q}(z)dz\right)^2-\left(\int_{z=0}^{L}\tilde{q}(z)dz\right)\left(\int_{z=0}^{L}z^2\tilde{q}(z)dz\right)\equiv\left[L_0^2-MI_0\right]$$

и решение системы (20) имеет вид:

$$\left.\begin{aligned} C_1(\xi) &= \frac{I_0 - \xi L_0}{L_0^2 - MI_0}; \\ C_2(\xi) &= \frac{\xi M - L_0}{L_0^2 - MJ_0}, \end{aligned}\right\} \tag{23}$$

где $M = \int\limits_{z=0}^{L} m_0(z)dz + \int \rho dt$ – полная масса «балка–жидкость»;

$L_0 = L_0^{(o)} + L_0^{(ж)} = \int\limits_{z=0}^{L} m_0(z)dz - \frac{4}{\pi^2}\rho l_1^2 \sqrt{R_0^2 - h_1^2}\,(2y_c - R_0)$ – статический момент системы «балка–жидкость» относительно центра $x = 0$;

$I_0 = I_0^{(o)} + I_0^{(ж)} = \int\limits_{z=0}^{L} z^2 \tilde{q}(z)dz + \frac{1}{24}\rho R_0^2 l_1^2 (4l_1 - h_1 - R_0)(2\theta_0 - \sin 2\theta_0) + m_{ж}(x_{c_1}^2 + y_{c_1}^2 - 2x_{c_1}x_1^0 - y_{c_1}y_1^0)$ – момент инерции системы «балка–жидкость» относительно центра $x = 0$ (рис. 1).

Подставляя значения функций $C_1(\xi)$ и $C_2(\xi)$ в уравнение (9) и дважды интегрируя по x, получаем:

$$G(x,\xi) = G_1(x,\xi) + C_3(\xi) + C_4(\xi), \tag{24}$$

где

$$G_1(x,\xi) = \mathrm{H}_1(x-\xi)\int\limits_{z=0}^{x}\frac{(x-z)(z-\xi)}{E_0 I_0(z)} + \int\limits_{z_2=0}^{x}\frac{x-z_2}{E_0 I_0(z_2)}\left[(z_2 - z_1)\int\limits_{z_1=0}^{z_2}\frac{I_0 - (z_1+\xi)L_0 + z_1\xi M}{L_0^2 - M_0 I_0}\tilde{q}(z_1)d(z_1)\right]dz_2, \tag{25}$$

$C_3(\xi)$ и $C_4(\xi)$ – неизвестные функции, которые должны быть выбраны так, чтобы удовлетворялись граничные условия (12) и (13).

Подставляя (24) в (12) и (13), получаем следующую систему уравнений относительно $C_3(\xi)$ и $C_4(\xi)$:

$$\left.\begin{aligned} L_0^{(0)}C_3(\xi) + M^{(0)}C_4(\xi) &= -\int\limits_{x=0}^{L} G_1(x,\xi)m_0(x)dx, \\ I_0^{(0)}C_3(\xi) + L_0^{(0)}C_4(\xi) &= -\int\limits_{x=0}^{L} G_1(x,\xi)xm_0(x)dx. \end{aligned}\right\} \tag{26}$$

Определитель этой системы совпадает с определителем системы (20), то есть ни при каком распределении $\tilde{q}(x)$ в нуль не обращается, следовательно, система (26) однозначно определяет значения величин $C_3(\xi)$, $C_4(\xi)$, обеспечивающих выполнение условий (12) и (13)

$$\left.\begin{aligned} C_3(\xi) &= \int\limits_{0}^{L} G_1(x,\xi)\frac{M^{(0)}x - L_0^{(0)}}{(L_0^{(0)})^2 - M^{(0)}I_0^{(0)}}m_0(x)dx, \\ C_4(\xi) &= \int\limits_{x=0}^{L} G_1(x,\xi)\frac{I_0^{(0)} - L_0^{(0)}x}{(L_0^{(0)})^2 - M^{(0)}I_0^{(0)}}m_0(x)dx. \end{aligned}\right\} \tag{27}$$

Таким образом, сформулированная выше теорема доказана. Обобщенная гриновская функция рассматриваемой задачи существует, единственна, вещественна, симметрична, то есть $G(x,\xi) = G(\xi,x)$. На квадрате $(0 \le x,\ \xi \le L)$ вместе со своей производной $\frac{\partial}{\partial x}G(x,\xi)$ она непрерывна как функция двух переменных, и задается соотношением:

$$G(x,\xi) = \mathrm{H}_1(x-\xi)\int\limits_{z=\xi}^{x}\frac{(x-z)(z-\xi)}{E^{(0)}I^{(0)}(z)}dz +$$

$$+\int_{z_2=0}^{x}\frac{x-z_2}{E^{(0)}I^{(0)}(z)}\left[(z_2-z_1)\int_{z_1=0}^{z_2}\frac{I_0-(\xi+z_1)L_0+\xi z_1 M}{L_0^2-MI_0}\tilde{q}(z_1)dz_1\right]dz_2+$$

$$+\int_{z_1=\xi}^{L}\left[\int_{z_2=\xi}^{z_1}\frac{(z_1-z_2)(z_2-\xi)}{E^0I^0(z_2)}\right]\frac{I_0^{(0)}-(x+z_1)L_0^{(0)}+xz_1M^{(0)}}{(L_0^{(0)})^2-M^{(0)}I_0^{(0)}}m_0(z_1)dz_1+$$

$$+\int_{z_3=\xi}^{L}\left\{\int_{z_2=0}^{z_3}\frac{z_3-z_2}{E^{(0)}I^{(0)}(z_2)}\left[\int_{z_1=0}^{z_2}(z_2-z_1)\frac{I_0-(\xi+z_1)+\xi z_1M}{L_0^2-MI_0}\tilde{q}(z_1)dz_1\right]dz_2\right\}\times$$

$$\times\frac{I_0^{(0)}-(x+z_3)L_0^{(0)}+xz_3M^{(0)}}{(L_0^{(0)})^2-M^0I_0^{(0)}}m_0(z_3)dz_3. \qquad (28)$$

Зная обобщенную функцию Грина $G(x,\xi)$ можно показать [2], что *частотная гриновская функция существует, единственна и представима соотношением:*

$$\Re(x,\xi;\lambda)=\frac{I_0-(x+\xi)L_0+x\xi M}{MI_0-L_0^2}\left(\frac{1}{-\lambda}\right)+\Gamma(x,\xi;\lambda), \qquad (29)$$

где $\Gamma(x,\xi;\lambda)$ – резольвента уравнения Фредгольма 2-го рода со статической функцией Грина $G(x,\xi)$ системы в качестве нагруженного ядра

$$\Gamma(x,\xi;\lambda)=G(x,\xi)+\lambda\int_{z=0}^{L}G(x,z)\Gamma(z,\xi;\lambda)m_0(z)dz. \qquad (30)$$

Вводя итерированные ядра, соответствующие целым положительным степеням оператора G, обозначив основное ядро $G(x,\xi)$ через $G_1(x,\xi)$:

$$G_1(x,\xi)\equiv G(x,\xi);$$

$$G_2(x,\xi)\equiv\int_{z=0}^{L}G(x,z)G_1(z,\xi)m_0(z)dz;$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$G_j(x,\xi)\equiv\int_{z=0}^{L}G_{j-1}(x,z)G_1(z,\xi)m_0(z)dz\quad(j=2,3,...),$$

и используя теорему о разложении [8]

$$G^{(P)}(x,\xi)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\psi_\nu(x)\psi_\nu(z)}{\lambda_\nu^P}\qquad(P=2,3,...), \qquad (31)$$

получаем ряд Неймана:

$$\Re(x,\xi;\lambda)=\frac{I_0-(x+\xi)L_0+x\xi M}{MI_0-L_0^2}\left(\frac{1}{-\lambda}\right)+G(x,\xi)+\lambda G_2(x,\xi)+\lambda^2\sum_{\nu=1}^{2}\frac{\psi_\nu(x)\psi_\nu(\xi)}{\lambda_\nu^2(\lambda_\nu-\lambda)}. \qquad (32)$$

Принимая во внимания соотношения (28-30) и разложение (31); суммируя появляющиеся при этом в (32) геометрические ряды, получаем аналитические зависимости частотной функции Грина от λ, в форме разложения функции $\Re$ па простые дроби:

$$\left.\begin{aligned}\Re(x)&=\frac{I_0-(x+\xi)L_0+x\xi M}{MI_0-L_0^2}\left(\frac{1}{-\lambda}\right)+\lambda^p\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\psi_\nu(x)\psi_\nu(\xi)}{\lambda_\nu^p(\lambda_\nu-\lambda)};\\ \Re(x)&=\frac{I_0-(x+\xi)L_0+x\xi M}{MI_0-L_0^2}\left(\frac{1}{-\lambda}\right)+\sum_{j}^{p}\lambda^{j-1}G_j(x,\xi)+\lambda^p\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\psi_\nu(x)\psi_\nu(\xi)}{\lambda_\nu^p(\lambda_\nu-\lambda)},\end{aligned}\right\} \qquad (33)$$

чем и заканчивается решение поставленной задачи.

Литература

1. Шеповалов Е.Н. Эффективные математические методы исследования колебаний сложных механических систем, содержащих упругие и жидкие среды // Наука и технология: Серия «Итоги диссертационных исследований». – М.: РАН, 2003. – С. 119–152.

2. Шеповалов Е.Н. Некоторые алгебраические аспекты метода системного анализа в общей теории сложных механических систем // Вестник ЮУрГУ. Серия « Математика, физика, химия». – 2006. – Вып. 7. – № 7 (62). – С. 157–168.

3. Светлицкий В.А. Механика стержней. В 2-х частях. Часть I: Статика. – М.: Высшая школа, 1987. – 320 с.

4. Светлицкий В.А. Механика стержней. В 2-х частях. Часть II: Динамика. – М.: Высшая школа, 1987. – 304 с.

5. Вибрации в технике. Справочник в 6 томах / Под ред. чл.-корр. АН СССР В.В. Болотина. – М.: Машиностроение, 1978. – Т. 1. – 352 с.

6. Шеповалов Е.Н. Исследование динамической нагруженности систем с упруго-жидкими звеньями // Неоднородные конструкции: Труды Уральского семинара. – Екатеринбург: УрО РАН, – 1999. – С. 71–81.

7. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, 1968. – 720 с.

8. Смирнов В.И. Курс высшей математики. В четырех частях. – М.: Наука, 1974. – Т. IV. – Ч. I. – 336 с.

Поступила в редакцию 29 марта 2006 г.

УДК 537.311.31

ПЕРИОДИЧНОСТЬ ИНФРАНИЗКОЧАСТОТНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНОК

А.А. Шульгинов

Проведены измерения инфранизкочастотных флуктуаций проводимости металлических плёнок Ag, Cu, Co, Bi, Al, Cr, Fe, Ni и $SmCo_6$. Предложен метод выделения и анализа скачков и всплесков проводимости. Анализ показал, что в них проявляется достоверная периодичность с периодами 6–7, 10–13 и 20–24 ч.

Введение

Наши исследования направлены на выявление нестационарных шумов в металлических плёнках и изучение их периодичности. Цель работы состояла в том, чтобы исследовать закономерности флуктуаций проводимости металлических плёнок в инфранизкочастотной области (ниже 0,001 Гц). Возможно, что именно эти флуктуации приводят к разрушению тонкоплёночных резисторов в микросхемах, поскольку, чем реже явление происходит, тем оно мощнее. Причинами нестационарного шума электропроводности могут быть как внутренние явления (старение плёнок, рост дефектов), так и внешние воздействия, например, электромагнитные поля, радиация и, возможно, скрытая материя, поиски которой ведут учёные разных областей. Нами была сделана попытка обнаружить цикличность флуктуаций проводимости тонких металлических плёнок разного состава.

Эксперимент

Для исследования флуктуаций проводимости была собрана установка, включающая в себя компьютер, оснащённый платой сбора данных, контейнер с исследуемыми плёнками, помещённый на дно шахты глубиной 2 м, и контейнер с аккумулятором. Глубина шахты достаточная, чтобы суточные температурные волны не достигали дна. Температура в течение суток изменялась не более чем на 0,02 °С. Для защиты от электромагнитных помех стенки шахты и контейнер были сделаны из металлов (алюминий, медь). Флуктуации проводимости плёнки определялись по флуктуациям потенциалов двух платиновых электродов, поставленных на плёнку.

Исследовано 14 металлических плёнок из 8 металлов: Ag, Al, Co, Ni, Cu по 1 образцу и Cr, Fe по 2 образца, Bi 3 образца, а также 1 образец сплава $SmCo_6$. Перед началом экспериментов были измерены собственные шумы моста и усилительного тракта, который также находился в контейнере с плёнкой. Для определения собственных шумов усилительного тракта вместо металлических плёнок использовались прецизионные непроволочные сопротивления С2-29 номиналом 100 Ом («модельные плёнки» – 3 штуки). Таким образом, установка регистрировала флуктуации проводимости металлических плёнок и контактов. Отделить одни флуктуации от других не представляется возможным в условиях данного эксперимента. Металлические плёнки были нанесены на подложку из поликора или ситалла термовакуумным и ионно-плазменным методом. Толщина плёнок δ находилась в диапазоне от 27 до 500 нм. Начало экспериментов 27.11.2004 г., а окончание 29.08.2006 г. Общая длительность записей 303 дня (7271 ч). Средняя частота измерений 1,5 Гц. Измерения проводились в многоканальном режиме. Флуктуации одновременно регистрировались с трёх плёнок по два канала с каждой. Установка позволяла регистрировать минимальные относительной флуктуации проводимости плёнки $\sim 10^{-7}$.

Основные результаты

Поскольку в инфранизкочастотных шумах отражаются явления разной природы вначале необходимо разделить эти флуктуации по качествам: медленные изменения, связанные, возможно, с дрейфом температуры в шахте, скачки, вызванные, например, эффектом Баркгаузена в ферромагнетиках, всплески, мелкомасштабные флуктуации [1]. Для дальнейшего анализа выберем только скачки проводимости и кратковременные всплески длительностью не более 1 с, так как именно эти явления носят наиболее разрушительный характер. Анализ результатов проводился в 3 этапа. **Первый этап**: выделение скачков и всплесков с помощью вейвлет-анализа. Для выделе-

ния скачков использовались HAAR-вейвлеты , а для выделения всплесков – FHAT-вейвлеты [2]. **Второй этап**: определение периодичности флуктуаций. Для этой цели был применён метод наложения эпох. Сначала необходимо выдвинуть гипотезу о существовании периодичности флуктуаций с периодом T. Вся запись длительностью τ разбивается на циклы. Каждый цикл разбивается на интервалы. После этого весь массив скачков или всплесков разделяется по циклам и интервалам. Определяется среднее число попаданий в каждый интервал по всем циклам и его среднеквадратичное отклонение. Для анализа выбирались периоды циклов от 6,0 до 56,0 часов с шагом 0,1 ч. Количество интервалов в каждом цикле было принято равным 8. **Третий этап**: статистический анализ достоверности различий максимума и минимума средней величины попаданий в интервал. Для этого использовался t-критерий. Доверительная вероятность различий p была принята не менее 0,99. Если такое различие между максимумом и минимумов оказывалось достоверным, то гипотеза о существовании периодичности с периодом T принималась.

Основные статистические характеристики отражены в таблице для скачков (С) и всплесков (В). Для каждого массива данных были вычислен уровень мелкомасштабных флуктуаций относительного сопротивления плёнок $D = <\Delta\sigma/\sigma>$ за вычетом всплесков и скачков. Как следует из таблицы, уровень мелкомасштабных флуктуаций с любой металлической плёнкой был как минимум на порядок выше, чем с «модельной плёнкой», составленной из непроволочных прецизионных сопротивлений, т.е. шумы усилительного тракта существенно не влияли на исследуемые флуктуации. Для анализа выбирались не все флуктуации, а только те, которые превышали порог L, который задавался по отношению к уровню мелкомасштабных флуктуаций D. $L = <\Delta\sigma_{fluct}/\sigma>/D$. В таблице N – это число флуктуаций, превысивших заданный порог. В расчётах порог флуктуаций задавался более $10D$.

Параметры скачков и всплесков проводимости плёнок

Состав плёнки	Нач. и кон. записи	τ, ч	$D\times\times10^{-6}$	Тип флук.	L	N	T, ч	Данные о плёнке
«Мод. плёнки»	29-06-2005 24-07-2005	607,3	1,6	С	15,0	1	—	С2-29, 2×100 Ом
				В	15,0	1		
Al	26-03-2005 12-04-2005	404,2	16,0	С	10,0	3	—	Поликор, ионно-плаз., δ = 260 нм
				В	10,0	111	6,1; 10,4; 12,0	
	31-07-2006 29-08-2006	693,4	29,6	С	10,0	1	—	
				В	10,0	90	17,7	
Ag	16-12-2004 28-12-2004	284,5	76,9	С	10,0	77	6,6	Поликор, ионно-плаз., δ = 190 нм
				В	10,0	75	6,1	
	31-07-2006 29-08-2006	693,4	74,6	С	10,0	286	6,1; 10,7	
				В	10,0	758	6,0; 10,7	
Cu	31-07-2006 29-08-2006	693,4	160,0	С	15,0	61	7,0	Поликор, ионно-плаз., δ = 27 нм
				В	15,0	374	6,7	
Bi(1)	25-07-2005 29-08-2005	837,1	10,4	С	50,0	74	6,4; 10,5; 12,4	Поликор, термовак.
				В	50,0	79	6,2; 11,0; 14,3; 20,4	
Bi(2)	02-09-2005 13-10-2005	979,3	17,1	С	30,0	38	7,0; 22,5	Поликор, термовак.
				В	30,0	95	9,7; 11,3	
Bi(3)	31-03-2006 29-04-2006	692,6	16,5	С	10,0	410	6,6	Поликор, термовак.
				В	10,0	732	6,2	
	29-04-2006 30-06-2006	1484	14,0	С	10,0	68	—	
				В	10,0	122	—	
Cr(1)	25-07-2005 29-08-2005	837,1	44,1	С	20,0	260	6,7; 10,0; 13,4	Поликор, термовак.
				В	20,0	403	6,8; 10,1	
	31-03-2006 25-04-2006	597,8	24,2	С	20,0	39	6,5	
				В	20,0	95	—	
	29-04-2006 30-06-2006	1484	25,2	С	20,0	137	6,5;9,6;13,0;22,9	
				В	20,0	365	6,3;9,4;13,1;20,5	

Окончание таблицы

Состав плёнки	Нач. и кон. записи	τ, ч	$D\times$ $\times10^{-6}$	Тип флук.	L	N	T, ч	Данные о плёнке
Cr(2)	02-09-2005 13-10-2005	979,3	17,7	C	10,0	4	—	Поликор, термовак.
				B	10,0	7	—	
Fe(1)	02-09-2005 13-10-2005	979,3	143,9	C	10,0	0	—	Ситалл, ионно-плаз., δ = 220 нм
				B	10,0	10	—	
	31-03-2006 29-04-2006	692,6	113,4	C	10,0	3	—	
				B	10,0	31	6,6; 8,5; 24,0	
	29-04-2006 30-06-2006	1484	138,4	C	10,0	1	—	
				B	10,0	72	6,4; 9,9; 13,3; 24,0	
Fe(2)	25-07-2005 29-08-2005	837,1	117,8	C	20,0	51	6,1; 11,0	Поликор, термовак.
				B	30,0	49	7,3; 22,6	
Co	27-11-2004 14-12-2004	403,9	132,5	C	10,0	8	—	Ситалл, ионно-плаз., δ = 220 нм
				B	10,0	33	—	
	18-10-2005 18-11-2005	744,9	69,2	C	10,0	3	—	
				B	10,0	12	—	
Ni	18-10-2005 24-11-2005	884,8	39,8	C	10,0	0	—	Ситалл, ионно-плаз., δ = 140 нм
				B	10,0	20	—	
$SmCo_6$	18-10-2005 24-11-2005	884,8	63,6	C	10,0	0	—	Ситалл, ионно-плаз., δ = 500 нм
				B	10,0	2	—	

Таким образом, используя метод наложения эпох и статистический анализ, удалось выявить достоверную цикличность флуктуаций для некоторых образцов: Al, Ag, Cu, Bi, Cr и Fe. Характерные периоды: 6–7 ч, 10–13 ч, 20–24 ч, т.е. периоды кратные 1/4, 1/2 суток и околосуточные циклы. Возможно, что это связано с внешними воздействиями проникающей природы. Для Co, Ni и $SmCo_6$ достоверная цикличность не выявлена в исследуемом диапазоне периодов. Отклик каждого образца на внешнее воздействие носит индивидуальный характер, но заметны общие особенности флуктуаций электропроводности у плёнок одинакового состава. Особенно это заметно у плёнок из Ag, Bi, Fe.

Автор выражает глубокую благодарность Петрову Ю.В., Забейворота Н.С. и Прокопьеву К.В. за помощь в подготовке эксперимента.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Администрации Челябинской области (проект р2004урал_а № 04-02-96045).

Литература

1. Шульгинов А.А., Забейворота Н.С. Инфранизкочастотные флуктуации проводимости металлических плёнок Co и Ag // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 5. – № 2(42). – С. 133–136.

2. Дрёмин И.М., Иванов О.В., Нечитайло В.А. Вейвлеты и их использование // УФН. – 2001. – Т. 171. – № 5. – С. 465–501.

Поступила в редакцию 6 октября 2006 г.

УДК 532.73

МГД-ЭФФЕКТЫ, ВОЗНИКАЮЩИЕ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ С ВРАЩАЮЩИМСЯ ДИСКОМ В ПРИСУТСТВИИ ОСЕВОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

В.П. Бескачко, Н.А. Болотникова, П.О. Цацин

В связи с экспериментальными данными о влиянии магнитного поля на интенсивность процессов массопереноса в системе проводящий расплав – твердое тело рассматривается МГД-аналог задачи Кармана о течении, возбуждаемом в жидкости вращающимся диском, когда вдоль его оси приложено однородное статическое магнитное поле. Решение уравнений конвективной диффузии совместно с найденным полем скорости жидкости показывает, что МГД-эффекты способны затормозить скорость массообмена до значений, наблюдаемых в экспериментах.

Введение

Метод вращающегося диска является одним из основных инструментов исследования взаимодействий твердое тело – жидкость в физической химии расплавов и растворов, электрохимии, экспериментальной металлургии и пр. Широкое распространение он получил благодаря уникальному свойству потока жидкости, вовлекаемой диском в движение: толщина гидродинамического и диффузионного пограничных слоев одинакова вдоль поверхности диска. Равнодоступность поверхности диска в диффузионном отношении делает этот метод пригодным для количественной оценки параметров гетерогенных химических реакций, как это было показано в [1]. Книга [2] содержит многочисленные примеры использования метода в физической химии высокотемпературных расплавов – для изучения взаимодействия углерода с жидким железом.

Известны эксперименты по исследованию влияния внешнего магнитного поля на параметры взаимодействия твердое тело – жидкость, например, [3–5]. В [3] было обнаружено, что скорость растворения никеля в эвтектическом расплаве висмут–свинец изменяется в несколько раз в присутствии магнитного поля. В [4] показано, что скорость коррозии аустенитной стали в расплаве Pb–Li существенно уменьшается при появлении магнитного поля с индукцией примерно 0.4 Т, направленного перпендикулярно корродирующей поверхности. В [5] такое же заключение сделано в отношении коррозии упомянутой стали в растворе Fe–Cl_3. В [3] считается, что магнитное поле непосредственно влияет на константу скорости растворения. Подобную точку зрения, однако, вряд ли можно обосновать с помощью фундаментальных принципов, учитывая гигантскую (для магнитного поля!) величину эффекта. Авторы [4] результаты своих опытов объясняют магнитогидродинамическими эффектами, приводящими к зависимости от магнитного поля толщины пограничных слоев на поверхности диска и, как следствие, к зависимости от этой причины интенсивности конвективного массопереноса. Эта, правильная на наш взгляд точка зрения, в [4], однако, количественно не обосновывается. В [5] тормозящее коррозию действие магнитного поля объясняется ссылкой на «микромагнитогидродинамические эффекты», физическая природа которых, однако, не разъясняется. Совершенно не ясно, например, в чем могли бы состоять подобные эффекты, если учесть, что жидкость в [5] (водный раствор Fe–Cl_3) имеет электропроводность на многие порядки меньшую, чем жидкости, изучаемые в [3] и [4] (металлические расплавы).

Задача о течении, возбуждаемом в вязкой несжимаемой жидкости вращающимся диском (бесконечного радиуса), уникальна в том отношении, что допускает точное решение в полной нелинейной постановке. Это означает, что существуют такие преобразования зависимых и независимых переменных, которые приводят исходную краевую задачу для уравнений Навье–Стокса в частных производных к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Впервые эти преобразования и решение задачи были указаны фон Карманом в 1921 г [6]. С тех пор задача Кармана интенсивно изучается, обобщается и используется при построении точно решаемых моделей реальных процессов во многих отраслях науки и техники, начиная с астрофизики и кончая теорией центробежных насосов. В работе [7] было показано, что преобразования Кармана возможны и в магнитогидродинамическом (МГД) случае, когда вдоль оси дис-

ка, погруженного в проводящую жидкость, действует однородное и статическое магнитное поле. Эта возможность вскоре была использована в связи с задачами геофизики в [8], где было показано, как магнитное поле влияет на создаваемое диском гидродинамическое поле. В [9] было замечено, что ввиду высокой электропроводности металлических расплавов МГД-эффекты становятся существенными уже в сравнительно небольших полях и при объемах образцов порядка тех, что используются в физико-химических экспериментах над жидкими металлами. В настоящей работе мы оценим, возможно ли с помощью МГД-эффектов объяснить результаты, полученные в [3] и [4] (но не в [5]).

Математическая формулировка задачи

Уравнения движения вязкой несжимаемой проводящей жидкости в присутствии магнитного поля имеют вид

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V}\nabla)\mathbf{V} = -\frac{1}{\rho}\nabla P - \frac{1}{2\mu_o \rho}\nabla(\mathbf{B})^2 + \frac{1}{\mu_o \rho}(\mathbf{B}\nabla)\mathbf{B} + \nu\Delta\mathbf{V}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + (\mathbf{V}\nabla)\mathbf{B} = (\mathbf{B}\nabla)\mathbf{V} + \frac{1}{\mu_o \sigma}\Delta\mathbf{B}. \tag{2}$$

где $\mathbf{V}$, P – поля скорости и давления в жидкости, $\mathbf{B}$ – индукция магнитного поля, ρ, σ, ν – плотность, электропроводность и вязкость жидкости соответственно, μ_0 – магнитная постоянная. Используем цилиндрическую систему координат с началом на поверхности диска и представим компоненты полей в (1) и (2) в виде

$$\begin{aligned} &V_r = r\Omega F(z_1); \quad V_\varphi = r\Omega G(z_1); \quad V_z = \sqrt{\nu\Omega}H(z_1); \\ &\mathrm{B}_r = rCK(z_1); \quad \mathrm{B}_\varphi = rCL(z_1); \quad \mathrm{B}_r = \mathrm{B}_0 M(z_1); \\ &P = \rho\Omega^2 r^2 p(z_1) + \rho\nu\Omega q(z_1), \end{aligned} \tag{3}$$

где Ω – угловая скорость вращения диска, B_0 – осевая компонента индукции внешнего магнитного поля вдали от диска,

$$C = B_0\mu_0\sigma(\nu\Omega)^{1/2}, \qquad z_1 = z\left(\frac{\Omega}{\nu}\right)^{1/2} = \frac{z}{z_E}.$$

Тогда уравнения движения можно записать в виде (для стационарного движения):

$$F''' - HF'' + 2GG' = -2\alpha^2 MK'' + 4\alpha^2\delta\ LL'' \ , \tag{4}$$

$$2FG + HG' - G'' = 4\alpha^2\delta\ KL + 2\alpha^2 ML' \ , \tag{5}$$

$$2F + H' = 0 \ , \tag{6}$$

$$MF' + K'' = \delta HK' \ , \tag{7}$$

$$MG' + L'' = \delta HL', \tag{8}$$

$$M'' = \delta\left(HM' - MH'\right) \ , \tag{9}$$

$$M' + 2\delta K = 0 \ , \tag{10}$$

где

$$\alpha^2 = \frac{\sigma B_0^2}{2\rho\Omega} \ , \qquad \delta = \sigma\mu_0\nu \ .$$

Если вдали от диска жидкость вращается с угловой скоростью Ω_1, сам (непроводящий) диск – с угловой скоростью Ω_0, а Ω – наибольшая из этих скоростей, то граничными условиями для уравнений (4)–(10) являются:

$$F(0) = 0 \ , \quad G(0) = \Omega_0/\Omega \ , \quad H(0) = 0 \ ; \tag{11}$$

$$F(\infty) = 0, \quad G(\infty) = \Omega_1/\Omega \ , \quad H(\infty) = H_\infty = \mathrm{const}; \tag{12}$$

$$K'(0) = 0, \quad L(0) = 0, \tag{13}$$

$$K(\infty) = 0, \quad L'(\infty) = 0, \quad M(\infty) = 1 \tag{14}$$

Они означают отсутствие проскальзывания жидкости на границе с твердой поверхностью и непротекание электрического тока через эту границу, если твердое тело – диэлектрик. Отношение $\varepsilon = (\Omega_0 - \Omega_1)/\Omega$, характеризующее относительную скорость вращения жидкости и диска, называется числом Россби.

Оценка параметров в уравнениях (4)–(10) показывает, что для жидких металлов $\delta \sim 10^{-7} \div 10^{-5}$, $\alpha^2 \sim (1 \div 100) \times 10^2 B_0^2 / \Omega$ и поэтому можно считать $\delta = 0$, $M(z) = 1$. Используя это и некоторые соображения, высказанные в [9], окончательно краевую задачу можно сформулировать как:

$$F^2 - G^2 + HF' - F'' = -2\alpha^2 F - \left(\frac{\Omega_1}{\Omega}\right)^2, \tag{15}$$

$$2FG + HG' - G'' = 2\alpha^2 \left(\frac{\Omega_1}{\Omega}\right)^2, \tag{16}$$

$$2F + H' = 0, \tag{17}$$

$$L' + G = \Omega_1 / \Omega \tag{18}$$

$$K' + F = 0 \tag{19}$$

Очевидным преимуществом этой системы по сравнению с исходной является то, что гидродинамические переменные F, G, H отделились от электромагнитных L, K в первых трех уравнениях. В них магнитное поле фигурирует только в виде параметра магнитного взаимодействия α.

Расчет поля скорости жидкости

Задача (11)–(19) представляет собой двухточечную краевую задачу для системы нелинейных дифференциальных уравнений в обыкновенных производных. Для решения подобных задач отсутствует теория, столь же развитая, как и для линейного случая (ввиду неприменимости принципа суперпозиции). Чаще всего в этой ситуации используют различные варианты метода стрельб (одно- или многократных)[1] и релаксационные конечно-разностные методы.

Применительно к решению системы (11)–(19) метод одиночных стрельб подробно обсуждался в [9]. Хотя он сравнительно прост в реализации, однако не всегда эффективен в вычислительном отношении, особенно при больших значениях параметра магнитного взаимодействия. В настоящее время более широко применяются методы многократных стрельб и конечно-разностные. Задачи рассматриваемого типа нередко возникают в вычислительной практике, и алгоритмы их решения реализованы и содержатся в известной библиотеке IMSL fortran library: «метод многократных стрельб» реализован в подпрограмме BVPMS/DBVPMS, а конечно-разностный – в подпрограмме BVPFD/DBVPFD.

Подпрограмма BVPMS/DBVPMS уже была использована в [10] для расчета течений, возбуждаемых диском в бингамовской жидкости и в жидкости со степенным законом вязкости. Андерссон [11, 12] использовал подпрограмму из библиотеки NAG, основанную на том же алгоритме, предложенным Перейрой [13], что и подпрограмма BVPFD/DBVPFD, при решении задачи о жидкости со степенным законом вязкости (проводящей или нет). Для анализа эффективности используемого математического обеспечения и сравнения с ранее полученными результатами мы провели предварительные расчеты поля скоростей неньютоновской жидкости со степенным законом вязкости [11–12, 14] с помощь подпрограммы DBVPFD. В этом случае уравнения движения имеют вид [11–12]:

$$\begin{aligned} F^2 - G^2 + \left(H + \frac{1-n}{n+1} F\eta\right) F' &= \left[\left(F'^2 + G'^2\right)^{(n-1)/2} F'\right]', \\ 2FG + \left(H + \frac{1-n}{n+1} F\eta\right) G' &= \left[\left(F'^2 + G'^2\right)^{(n-1)/2} G'\right]', \\ H' &= -2F - \frac{1-n}{n+1}\eta F', \end{aligned} \tag{20}$$

[1] В англоязычной литературе эти методы называются single shooting method и multi-shooting method.

где $\eta = z\left(\frac{\Omega^{2-n}}{K/\rho}\right)^{1/(n+1)} r^{(1-n)/(1+n)}$ – безразмерная координата, а граничные условия записываются как:

$$F(0) = 0,\ G(0) = 1,\ H(0) = 0,$$
$$F(\infty) = 0,\ G(\infty) = 0. \qquad (21)$$

В таблице можно сравнить полученные результаты с таковыми, найденными ранее Андерсоном [11] и Мичкой и Ульбрехтом [14]. Здесь приведены граничные при $\eta = 0$ значения функций F', G' и H, отсутствующие в условиях (21) и относящиеся к жидкостям с различным показателем n в степенном законе для вязкости. Заметим, что если бы они были известны заранее, то вместо краевой задачи мы имели бы задачу Коши, методы решения которой хорошо разработаны. Из таблицы видно, что результаты, полученные нами с помощью подпрограммы DBVPFD, с высокой точностью совпадают с полученными ранее.

Сравнение граничных значений F', G' и H, полученных в настоящей работе, с результатами [11] и [13]

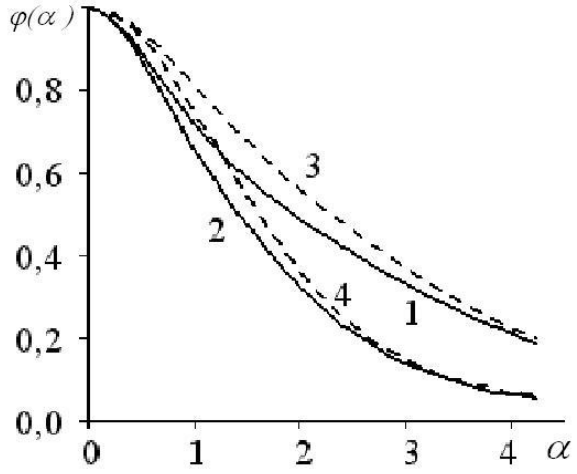
n	$F'(0)$			$-G'(0)$			$-H(\infty)$		
		[11]	[14]		[11]	[14]		[11]	[14]
1,5	0,5292	0,529	0,529	0,6010	0,601	0,601	0,6783	0,676	0,678
1,3	0,5215	0,522	0,521	0,6035	0,603	0,603	0,7359	0,735	0,735
1,1	0,5139	0,514	0,514	0,6101	0,610	0,610	0,8221	0,822	0,819
1,0	0,5102	0,510	0,510	0,6159	0,616	0,616	0,8823	0,883	–
0,9	0,5069	0,507	0,507	0,6243	0,624	0,624	0,9688	0,969	0,958
0,8	0,5039	0,504	0,504	0,6362	0,636	0,636	1,0926	1,089	1,052
0,6	0,5004	0,501	0,500	0,6776	0,676	0,677	1,4602	1,364	1,351
0,5	0,5008	0,501	0,501	0,7136	0,712	0,713	1,6515	1,539	1,513
0,4	0,5038	–	0,504	0,7691	–	0,769	–	–	–

Для сравнения метода многократных стрельб с конечноразностным были проведены расчеты для системы (11)–(19) с использованием подпрограмм BVPMS/DBVPMS и BVPFD/DBVPFD соответственно. Результаты расчетов показали, что подпрограмма BVPMS/DBVPMS позволяет получить решения в плоть до $\alpha = 1,0$ при вычислениях с обычной точностью (BVPMS) и до $\alpha = 2,5$ при вычислениях с двойной точностью (DBVPMS). В то же время подпрограмма BVPFD позволяет получить решение для любых α, в настоящей работе мы ограничились значением $\alpha = 5,0$.

Результаты

После определения поля скоростей при данной индукции магнитного поля можно использовать рассуждения [1] для отыскания плотности массового потока к поверхности диска. Результат расчета представлен на рисунке, где показана нормированная плотность потока $\varphi(\alpha) = j(\alpha)/j(0)$ как функция параметра магнитного взаимодействия α при различных значениях чисел Россби и Прандтля ($Pr = Pe/Re = \nu/D$). Для жидких металлов $Pr \sim 10^2 \div 10^3$ и поэтому перенос вещества в них происходит посредством конвективной диффузии уже при малых скоростях течения. Из рисунка видно, что магнитное поле способно полностью подавить массообмен и тем быстрее, чем меньше число Прандтля. Результаты экспериментов [3] были обсуждены в [9]. Обращаясь теперь к опытным данным [4], где условия таковы, что $Re = 21\,000$, $Ha = 130$, получаем, что параметр магнитного взаимодействия $\alpha = Ha/\sqrt{2Re} = 0,63$. Судя по рисунку, уменьшение плотности массового потока в магнитном поле должно составлять 5–10%

для чисел Прандтля в диапазоне 10^3–10^2. Это удовлетворительно согласуется с изменением толщины коррозионного слоя в центре диска ($\sim 20\%$), наблюдаемом в работе [4], особенно если учесть величину погрешности приведенных там данных.



Влияние магнитного поля на плотность массового потока к поверхности диска:
1 – ε= 1,0; Pr = 10^3,2 – ε= 1,0; Pr = 10^2,
3 – ε= 0,1; Pr = 10^3,4 – ε= 0,1; Pr = 10^2

Заключение

Полученные результаты показывают, что МГД-эффекты способны существенно повлиять на кинетику массообмена между твердым телом и проводящим расплавом даже в условиях, реализующихся в обычных физико-химических экспериментах и при умеренных магнитных полях. Это дает возможность управлять с помощью магнитного поля интенсивностью массообменных процессов, совершенствовать технологические процессы с участием жидких металлов, а также создавать новые инструменты для физико-химических исследований, основанные на наблюдении МГД-эффектов.

Литература

1. Левич В.Г. Физико-химическая гидродинамика. – М.: АН СССР, 1952. – 538 с.

2. Лепинских Б.М., Востряков А.А. Растворение твердых фаз в металлургических расплавах. – М.: Наука, 1978. – 148 с.

3. Сойфер Л.М. Влияние магнитного поля на кинетику растворения никеля в эвтектическом расплаве свинец–висмут // Научные сообщения IV Всесоюзной конференции по строению и свойствам металлических и шлаковых расплавов. – Свердловск, 1980. – Ч. II. – С. 286–288.

4. Deloffre Ph., Terlain A., Alemany A., Kharicha A. Corrosion study of an austenitic steel in Pb–17Li under magnetic field and rotating flow // Fusion Engineering and Design 69 (2003) 391–395.

5. Ručinskienė A., Bikulčius G., Gudavičiūtė L., Juzeliūnas E. Magnetic field effect on stainless steel corrosion in $FeCl_3$ solution // Electrochemistry Communications 4 (2002) 86–91.

6. Von Karman T. Über laminare und turbulente Reibung, Zeit Angew. Math. Mech. 1(1921), pp. 233–252.

7. Sychev V.V. Flow of viscous electro-conducting fluid under rotating disc in magnetic field.– Priklad. Mat. i Mekhan.; Vol. 24.

8. Gilman P.A., Benton E.R. Influence of an axial magnetic field on the steady linear Ekman boundary layer // Phys. Fluids, 1968, 11, p. 2397–2401.

9. Бескачко В. П., Болотникова Н.А., Вяткин Г.П. Массоперенос с поверхности вращающегося диска в присутствии осевого магнитного поля. – Челябинск: Изд. ЧГТУ, 1994. – 25 с.

10. Rashaida Ali A. Flow of non-newtonian bingham plastic fluid over rotating disk – PhD Thesis University of Saskatchewan, 2005.

11. .Andersson H.I,.de Korte E.,. Meland R. Flow of a power-law fluid over a rotating disk revisited // Fluid Dynamics Research 28 (2001) 75{88).

12. Andersson H.I., de Korte E. MHD flow of a power-law fluid over a rotating disk // European Journal of Mechanics – B/Fluids, Jan 2002.

13. Pereyra V. PASVA3: an adaptive finite-difference Fortran program for first order nonlinear ordinary boundary problems. In: Childs, B., et al. (Eds.), Codes for Boundary Value Problems in Ordinary Differential Equations, Lecture Notes in Computer Science, 1979, Vol. 76. Springer, Berlin, pp. 67–88.

14. Mitschka P., Ulbrecht J. Nicht-Newtonsche Flüssigkeiten IV. Strömung Nicht-Newtonscher Flüssigkeiten Ostwald-de Waeleschen Typs in der Umgebung Rotierender Drehkegel und Schieben. // Coll. Czech. Chem. Comm. 1965, 30, 2511–2526.

УДК 541.16

ОЦЕНКА МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОТРУБОК ПО ДАННЫМ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

В.П. Бескачко, Т.С. Сапожникова, Г.П. Вяткин

Механические свойства углеродных нанотрубок оценены с помощью квантовохимических расчетов из первых принципов и полуэмпирических. Рассмотрено влияние дефектов типа 5-7-7-5 на структуру и свойства нанотрубок. Дана сравнительная оценка вычислительной эффективности первопринципных и полуэмпирических методов для расчета углеродных наноструктур с числом частиц ~10^2.

Введение. Наноматериалы являются в настоящее время объектом интенсивных исследований как в связи с ожиданиями промышленного использования их уникальных свойств, так и в связи с фундаментальными проблемами интерпретации свойств низкоразмерных систем и их ансамблей. Малый размер частиц требует, с одной стороны, создания новых инструментальных средств для выполнения экспериментов, а с другой – применения методов расчета, способных оперировать с системами, содержащими число атомов N в интервале от $10^1 \div 10^3$ (фуллерены) до $10^5 \div 10^6$ (нанотрубки). Если в случае совершенных (бездефектных) структур объем вычислений может быть сокращен по соображениям симметрии, то в случае частиц, содержащих дефекты разного рода, приходится учитывать координаты всех частиц. Увеличение N в указанном интервале приводит к такому росту необходимых для решения задачи вычислительных ресурсов, что вычисления рано или поздно становятся невозможными на любой имеющейся в распоряжении исследователей вычислительной технике. Насколько рано и насколько поздно – зависит (при данной вычислительной мощности) от используемого расчетного метода. Наиболее затратными являются квантовомеханические методы, исходящие из «первых принципов», наименее – методы, описывающие движения частиц классическим образом (молекулярная механика).

Известны теоретические оценки трудоемкости для большинства расчетных методов, применяемых в рассматриваемой области. Эти оценки, как правило, являются асимптотическими, то есть справедливыми при достаточно больших N, в идеале – при $N \to \infty$. Поэтому они мало полезны при тех N, которые нас интересуют в связи с рассматриваемой задачей, особенно для N, лежащих в начале указанного выше интервала. По-видимому, единственный способ их получить состоит в выполнении прямых численных экспериментов. Такая информация нам представляется чрезвычайно полезной при планировании исследований, особенно в ситуации, когда исследователь не может рассчитывать на использование выдающихся вычислительных ресурсов. Ее получение является одной из целей настоящей работы. Другая цель заключается в исследовании строения и свойств углеродных нанотрубок, содержащих дефекты переключения связей, неэмпирическими и полуэмпирическими методами квантово-химического моделирования.

Эмпирические оценки трудоемкости расчетов. Оценка эффективности неэмпирических расчетов проводилась с использованием пакета GAMESS [1]. Здесь выбор метода означает выбор базиса. Нами для сравнения были выбраны 4 простейших базиса: STO-3G, MINI, 3-21G и 6-21G, различающиеся числом и видом базисных функций. В качестве тестовой рассматривалась задача оптимизации геометрии молекулы фуллерена C_{60}, для которой известны опытные значения длин связей. Стартовая конфигурация была создана с помощью молекулярно-динамических расчетов с использованием потенциала Терзоффа и заметно отличалась от наблюдаемой на опыте. Оказалось, что все используемые базисы дают примерно одинаковую погрешность в расчете длин связей (1–2%) и уверенно определяют число неэквивалентных связей (две). Использование более сложных базисов (DZP и 6-31G*) ненамного улучшает точность результатов. В табл. 1 приведены сведения о ресурсах, потраченных на решение задачи. В колонке 3 за единицу принято время, затраченное на расчеты в базисе STO-3G и составляющее 54 часа для процессора с частотой 700 МГц. Видно, что наиболее эффективными для рассматриваемой задачи являются базисы STO-3G и 3-21G. Такие же результаты в отношении времени расчетов были получены и при оптимизации фуллерена C_{30} с той разницей, что в базисе STO-3G предсказывается более широкий спектр длин

связей по сравнению с другими базисами, который, однако, приводит к тому же количеству неэквивалентных связей, если пренебречь различиями в длинах порядка 0,001 Å (0,1%). Кроме того, оптимизация геометрии нанотрубки типа (5.0) из 100 атомов в базисе STO-3G привела к структуре, не обладающей должной симметрией. Этого не происходило в расчетах с базисом 3-21G. Поэтому последний базис был выбран для расчетов из первых принципов.

Таблица 1

Вычислительные ресурсы, затрачиваемые неэмпирическими методами

Базис	Число базисных функций на атом углерода	Относительное время ЦП	Используемая память (words)	Число циклов оптимизации
STO-3G	5	1	855480	33
MINI	5	2,8	855480	48
3-21G	9	1,2	2355661	32
6-21G	9	3,1	2355661	34

Оценка эффективности полуэмпирических расчетов выполнялась с помощью пакета MOPAC, содержащего методы MINDO/3, MNDO, AM1 и PM3. Рассматривалась задача оптимизация геометрии молекул фуллеренов C_{60} и C_{70}. Стартовые конфигурации создавались так же, как и выше. Результаты численных экспериментов для C_{60} представлены в табл. 2.

Таблица 2

Вычислительные ресурсы, затрачиваемые полуэмпирическими методами

	PM3	AM1	MINDO/3	MNDO	Эксперимент
Длины связей	1,457 1,458 1,384	1,464 1,385	1,496 1,497 1,419	1,474 1,4	1,44 ± 0,01 1,39 ± 0,01
Относительное время счета	1,05	1,0	12,9	1,1	

Принятое за единицу время счета в методе AM1 составляет 18 мин 41 с. Видно, что наиболее точные предсказания длин связей фуллеренов дают методы PM3 и AM1, они же требуют минимального времени для решения задачи, которое минимум на два порядка меньше такового при неэмпирических расчетах с любым базисом. Поскольку наиболее точным оказался метод PM3, то он и был выбран для проведения дальнейших расчетов.

Оценка трудоемкости полуэмпирического расчета методом PM3 для нанотрубок (5.0) и (5.5) показала, что время, затрачиваемое на оптимизацию их геометрии, зависит от радиуса трубки. Для нанотрубки меньшего радиуса ((5.0)) зависимость времени расчета от числа атомов N лучше аппроксимируется полиномом четвертой степени (рис. 1а), а для нанотрубки большего радиуса ((5.5)) – полиномом третьей степени (рис. 1б). Это, по всей видимости, объясняется тем, что пара-

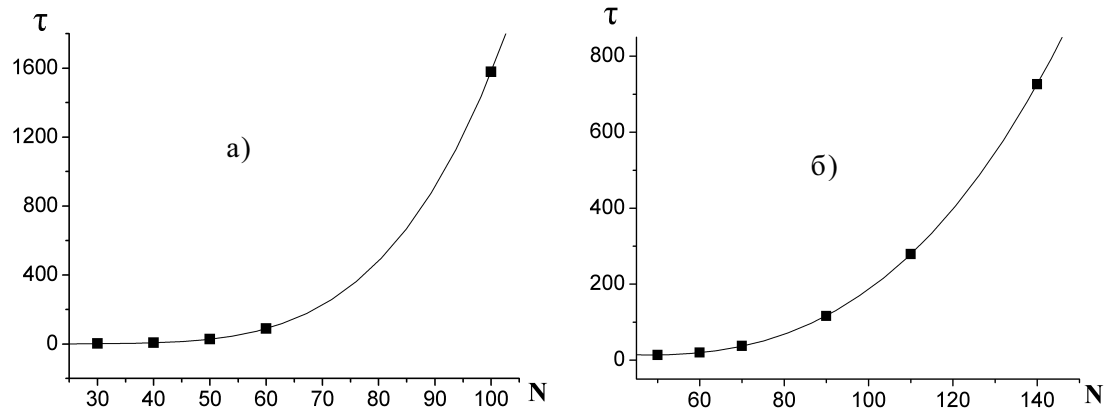


Рис. 1. Зависимость времени оптимизации τ (мин) методом PM3 геометрии нанотрубок от числа N атомов: а) для нанотрубки (5.0), б) для нанотрубки (5.5)

метризация полуэмпирических методов проводилась для графитового листа. Нанотрубки же являются напряженными структурами, причем, чем меньше их радиус, тем более они напряжены (тем сильнее свернут графитовый лист). Поэтому расчеты для нанотрубок меньшего радиуса и занимают значительно больше времени, чем для нанотрубок большего радиуса (5.5).

Зависимость трудоемкости расчетов от числа атомов N для первопринципных методов показана на рис. 2. Здесь приведено время выполнения одной итерации при формировании оператора

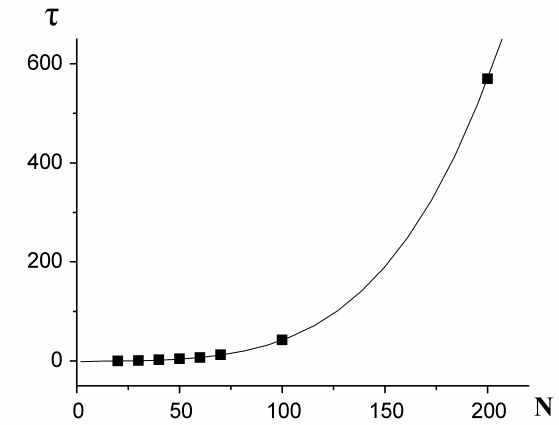


Рис. 2. Зависимость времени τ (мин) одной итерации от числа атомов N в неэмпирических расчетах наноструктур

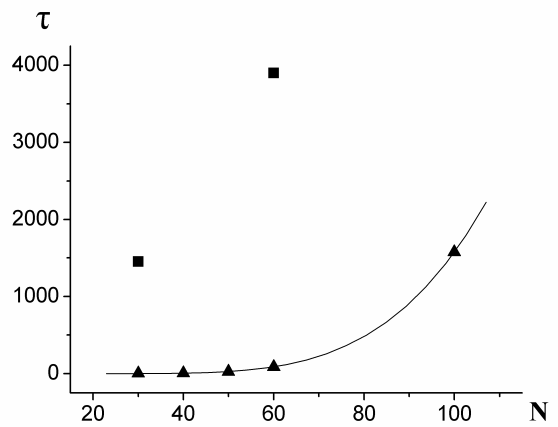


Рис. 3. Время оптимизации τ (мин) геометрии нанотрубки (5.0) полуэмпирическим методом PM3 (▲) и из первых принципов (■) в зависимости от числа атомов

Фока. На рис. 3 сравнивается время оптимизации геометрии молекулы из соответствующего числа атомов при неэмпирических и полуэмпирических расчетах. Все данные относятся к процессору с частотой 700 МГц. Из рисунков видно, что трудоемкость полуэмпирических расчетов резко возрастает при N~100, неэмпирические расчеты становятся необозримыми уже при N~50. Представленные результаты относятся к «последовательным» вычислениям. Их характер, очевидно, сохранится и при использовании параллельных вычислительных систем, изменится лишь масштаб на оси ординат. Так, оптимизация из первых принципов геометрии нанотрубки (5.0) из 50 атомов на 7 узлах (Athlon XP 2,8 МГц, оперативная память 1Гб) вычислительного кластера МВС-100 кафедры ОТФ ЮУрГУ заняла 4,5 часа. По нашим оценкам, оптимизация нанотрубки из 200 атомов на 20 подобных узлах займет около 80 часов.

Учет граничных условий при моделировании свойств нанотрубок. Длина синтезируемых на практике нанотрубок достигает микрометров, но возможности моделирования свойств столь протяженных наноструктур, как показано выше, ограничены мощностью компьютеров. Поэтому по необходимости приходится ограничиваться расчетами систем меньшего размера. Это приводит, однако, к возникновению так называемых граничных (краевых) эффектов. Чтобы этого избежать, используют следующие методы:

1) вводят периодические граничные условия вдоль оси нанотрубки,

2) к открытым концам нанотрубки присоединяют «крышки» – половинки фуллеренов соответствующего диаметра,

3) оборванные связи на открытых концах нанотрубки насыщают водородом. В наших расчетах для учета краевых эффектов использовались два последних метода.

Моделирование дефекта переключения связей. Для моделирования дефекта переключения связей 5-7-7-5 одна из связей поворачивается на угол 90°. При этом в графитовой сетке, состоящей из шестиугольников (рис. 4), образуются 2 пятиугольника и 2 семиугольника, как показано на рис. 5. При этом ни число атомов, ни число связей, образуемых каждым из них, не изменяется.

В зеркальных нанотрубках все связи можно разделить на два типа: связи, расположенные вдоль оси нанотрубки, и связи, расположенные поперек оси. Соответственно возможны два способа расположения дефекта 5-7-7-5 (поворот связи, ориентированной вдоль оси, и поворот связи, ориентированной поперек оси).

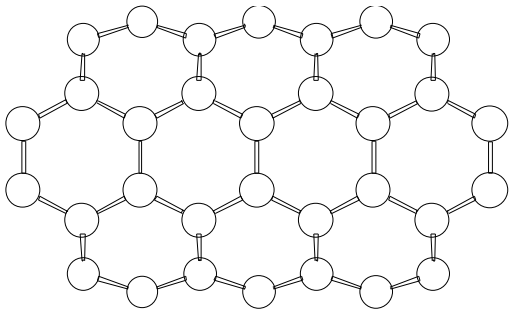


Рис. 4. Фрагмент поверхности идеальной нанотрубки

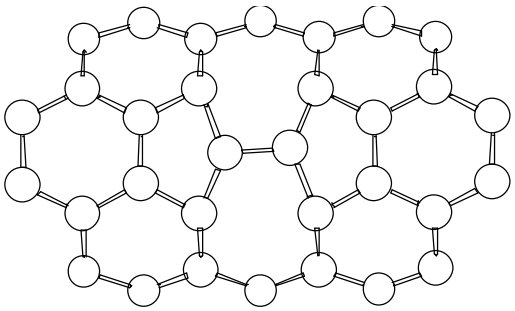


Рис. 5. Фрагмент поверхности нанотрубки, содержащей дефект переключения связей 5-7-7-5

Оценка механических свойств. Из первых принципов были рассчитаны модули упругости идеальных и дефектных нанотрубок. Алгоритм расчета состоял из следующих шагов: 1) оптимизация геометрии ненапряженной стартовой конфигурации идеальной нанотрубки, определение полной энергии и координат атомов, 2) создание напряженной (деформированной) структуры путем однородного сжатия или растяжения трубки вдоль ее оси, 3) оптимизация геометрии напряженной нанотрубки при фиксированных положениях крайних атомов углерода, определение полной энергии и координат атомов. Результатом вычислений являлась зависимость энергии нанотрубки от ее удлинения, по которой затем вычислялись модули растяжения – сжатия. Для идеальной нанотрубки (5.0), состоящей из 30 атомов со свободными краями, зависимость энергии от относительного удлинения показана на рис. 6. С хорошей точностью эта зависимость является квадратичной, что указывает на упругий характер деформации нанотрубки. Соответствующий модуль упругости составил 0,91 ТПа. Для той же нанотрубки, но состоящей из 70 атомов с наводороженными крайними атомами углерода, этот модуль оказался равным 1,434 ТПа. Разница в модулях, вероятно, означает, что для столь коротких трубок краевые эффекты весьма существенны. Тем не менее, эти результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными значениями (0,4–5,4 ТПа) [2–14] и результатами других теоретических расчетов (1–7 ТПа) [15–17].

Для исследования влияния дефектов на механические свойства нанотрубок были рассчитаны модули упругости трубки (5.0) из 70 атомов с дефектом 5-7-7-5, расположенным поперек и вдоль ее оси (рис. 7). Они составили 1,58 и 1,64 ТПа соответственно. Таким образом, внедрение дефекта переключения связей приводит к увеличению модуля упругости нанотрубки, при этом дефект, ориентированный вдоль оси трубки сильнее увеличивает ее упругость.

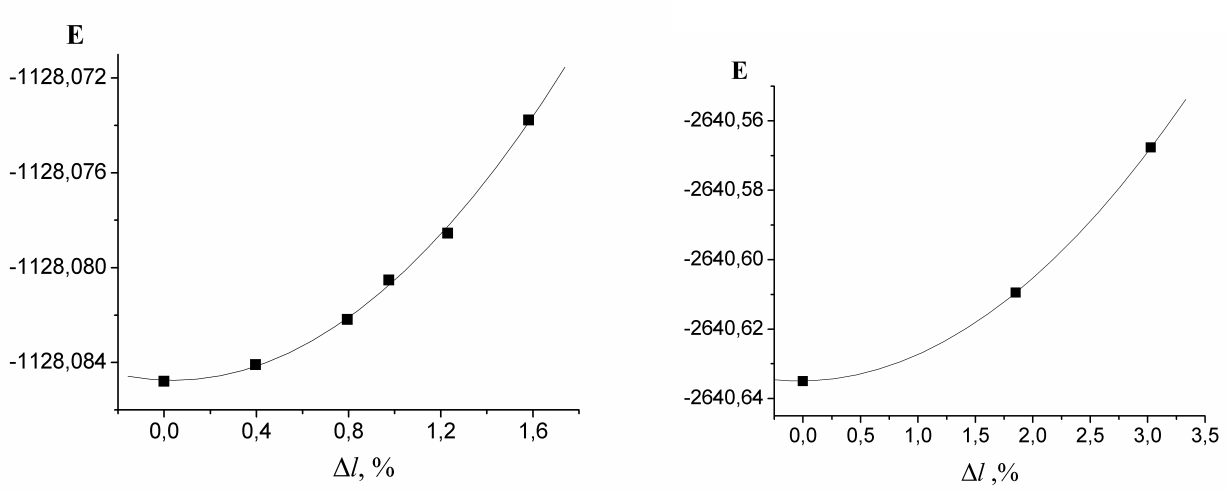


Рис. 6. Зависимость полной энергии от относительного удлинения для идеальных нанотрубок (5.0) из 30 атомов (слева) и 70 атомов (справа)

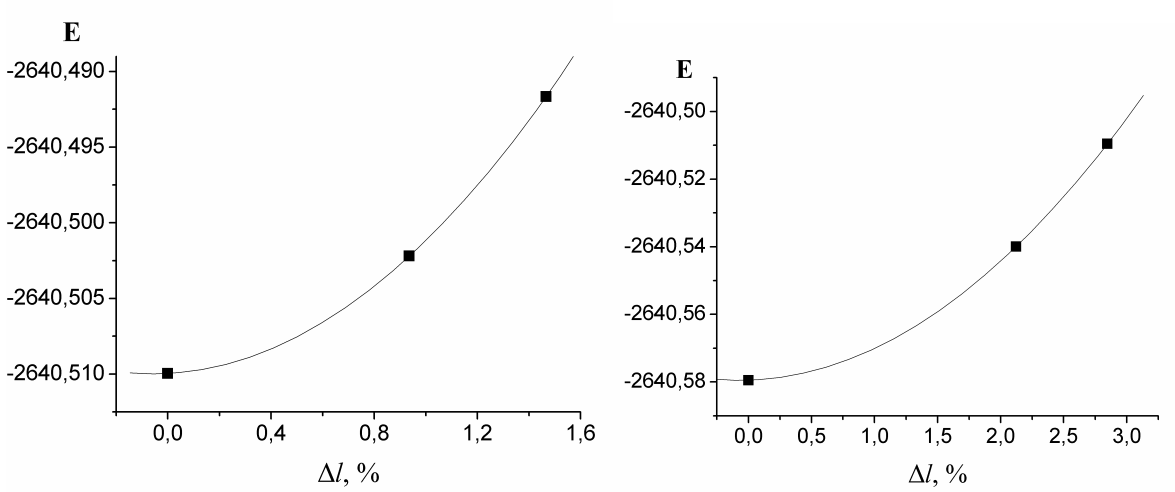


Рис. 7. Зависимость полной энергии от относительного удлинения для нанотрубки (5.0) с расположением дефекта поперек (слева) и вдоль (справа) оси нанотрубки

Были рассчитаны также энергии образования дефектов 5-7-7-5 для нанотрубок типов (5.0) и (5.5) с закрытыми концами, состоящих из 100 атомов (полуэмпирическим методом PM3), а также для нанотрубки (5.0) с наводороженными торцами, состоящей из 70 атомов углерода (методом Хартри–Фока в базисе 3-21G). Расчеты подтвердили, что нанотрубка (5.5) из 100 атомов является более устойчивой конфигурацией, чем нанотрубка (5.0) из 100 атомов. Это объясняется тем, что, имея больший диаметр, нанотрубка (5.5) является менее напряженной структурой.

Расчеты показали, что энергетические и геометрические характеристики зависят от расположения дефекта: во всех трех случаях наименее выгодным оказался дефект, образуемый поворотом поперечных связей нанотрубок. При появлении дефектов изменяется геометрия трубки, она изгибается, скручивается и пр. Для трубки типа (5.0), например, было обнаружено, что она изгибается только при повороте продольной связи, а при повороте поперечной – скручивается.

Заключение. Проведенные расчеты позволили оценить применимость первопринципных и полуэмпирических расчетов для изучения свойств таких систем как нанотрубки и фуллерены. Были определены оптимальные для проведения расчетов базис (неэмпирический расчет) и метод (полуэмпирический расчет). Помимо этого, для полуэмпирических расчетов установлена зависимость времени расчета от конфигурации нанотрубки. Рассчитаны модули упругости идеальных и дефектных нанотрубок. Определено влияние дефекта на конфигурацию нанотрубки и модуль упругости в зависимости от его расположения.

Литература

1. Shmidt M.W., Baldridge K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S.J., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. J. Comp. Chem. 14, 1347–1363 (1993).

2. Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson JM. Exceptionally high young's modulus observed for individual carbon nanotubes // Nature 1996, 381(6584). – P. 678–680.

3. Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., et al. Young's modulus of single-walled nanotubes // Phys Rev B 1998, 58(20). – P. 14013–14019.

4. Wong E.W., Sheehan P.E., Lieber C.M. Nanobeam mechanics: elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes // Science 1997, 277(5334). – P. 1971–1975.

5. Salvetat J.P., Kulik A.J., Bonard J.M., et al. Elastic modulus of ordered and disordered multiwalled carbon nanotubes // Advanced Materials 1999, 11(2). – P. 161–165.

6. Salvetat J.P., Briggs G.A.D., Bonard J.M., et al. Elastic and shear modulus of single-walled carbon nanotube ropes // Phys Rev Lett 1999, 82(5). – P. 944–947.

7. Yu M.F., Files B.S., Arepalli S., Ruoff R.S. Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties // Phys Rev Lett 2000, 84(24). – P. 5552–5555.

8. Yu M.F., Lourie O., Dyer M.J., et al. Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load // Science 2000, 287(5453). – P. 637–640.

9. Yao Z., Zhu C., Cheng M., et al. Research on mechanical properties of carbon nanotube using molecular dynamics // Vac. Electron. 2002, 5. – P. 5–7.

10. Cornwell C.F., Wille L.T. Simulations of the elastic response of singlewalled carbon nanotubes // Comput. Mater. Sci. 1998, (10). – P. 42–45.

11. Sinnott S.B., Shenderova O.A., White C.T., Brenner D.W. Mechanical properties of nanotubule fibers and composites determined from theoretical calculations and simulations // Carbon 1998, 36. – P. 1–9.

12. Shintani K., Narita T. Atomistic study of strain dependence of Poisson's ratio of single-walled carbon nanotubes // Surf. Sci. 2003, 532–535. – P. 862–868.

13. Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A. Elastic properties of C and BXCYNZ composite nanotubes // Phys. Rev. Lett. 1998, 80. – P. 4502–4505.

14. Zhang P.H., Lammert P.E., Crespi V.H. Plastic deformations of carbon nanotubes // Phys. Rev. Lett. 1998, 81(24). – P. 5346–5349.

15. Chang T., Gao H. Size-dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model // J. Mech. Phys. Solids 2003, 51. – P. 1059–1074.

16. Xiao J.R., Gama B.A., Gillespie Jr J.W. An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes // Int. J. Solids Struct. 2005, 42. – P. 3075–3092.

17. Popov V.N., Van Doren V.E., Balkanski M. Elastic properties of singlewalled carbon nanotubes // Phys. Rev. B 2000, 61. – P. 3078–84.

УДК 669.017.3

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ, ОБУСЛОВЛЕННОГО ДИФФУЗИОННЫМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ, В СПЛАВЕ МА21 В ХОДЕ МНОГОЛЕТНЕЙ ВЫДЕРЖКИ

Д.А. Мирзаев, Ю.Д. Корягин, К.Ю. Окишев, В.М. Елгин, А.А. Звонков

Двухфазный сплав на магний-литиевой основе МА21 широко используется в изделиях авиакосмической техники, но за время эксплуатации происходит изменение его механических свойств и, в частности, предела текучести, которое было экспериментально исследовано за период 19 лет выдержки. Поскольку сплав не был нагартован, то основными процессами, приводящими к снижению предела текучести, являлась коалесценция частиц $MgLi_2Al$ в β-фазе и прерывистый распад в α-фазе. На основе дислокационной теории упрочнения и кинетической теории фазовых превращений были получены общие формулы для изменения предела текучести. Неизвестные параметры были подобраны на основе принципа наилучшего согласия экспериментальных и теоретических кривых. Было показано, что через 14–16 лет выдержки прочность сплава достигает максимума, после чего начинается её снижение. Интересно, что после 16 лет выдержки изменяется соотношение $\sigma_{0,2}/\sigma_{-0,2}$: предел текучести при растяжении становится бóльшим, чем при сжатии.

В работе [1] развита методика количественного прогнозирования изменения предела текучести нагартованного сплава АМг6 в процессе многолетней выдержки при комнатной температуре. Предполагалось, что существует единственный процесс разупрочнения – возврат, обусловленный переползанием и аннигиляцией дислокаций. Результаты прогнозирования в целом неплохо согласовывались с результатами измерения.

Однако лёгкие сплавы часто упрочняются за счёт дисперсионного твердения или прерывистого распада, причём в зависимости от характера легирования сплав может быть одно-, двух- или многофазным. Настоящая работа представляет первую попытку прогнозирования характера изменения предела текучести в двухфазном магний-литиевом сплаве МА21, содержащем около 8%Li; 4,7%Al; 4,5%Cd; 1,55%Zn; 0,2%Mn и некоторые другие элементы в качестве примесей. После охлаждения до комнатной температуры сплав состоит из двух фаз: α и β. Бета-фаза имеет ОЦК-решётку и представляет собой твёрдый раствор легирующих элементов в литии. Состав β-фазы, по данным работ М.Е. Дрица [2, 3], близок к составу сплава МА18. Альфа-фаза имеет ГПУ-решётку и представляет собой твёрдый раствор на основе магния. Она имеет примерный состав Mg–5%Li–5%Al–4%Cd–1%Zn [3]. Обе фазы являются нестабильными. Изделия из сплава получают штамповой заготовок при 280 °С с последующим охлаждением на воздухе до комнатной температуры. Возможны и последующие технологические нагревы до температур не выше 90 °С. Температура штамповки (280 °С) превышает температуру рекристаллизации и β-, и α-фазы, поэтому эффекты, обусловленные дислокационным возвратом, при комнатной температуре проявляться не должны. Несомненно, что ведущим процессом при длительной выдержке является выделение избыточных фаз. Согласно работам [2, 4], распад β-фазы происходит по схеме

$$\beta \to \beta' + MgLi_2Al \to \beta'' + AlLi,$$

где β' и β'' – твёрдый β-раствор с изменённой концентрацией. Мак Дональд [5, 6] показал, что при низких температурах старения 20…65 °С из β-фазы выделяется только метастабильная фаза $MgLi_2Al$, кристаллы которой находятся в ориентационной связи с решёткой β-фазы, хотя сопряжение решёток сопровождается довольно большим несоответствием (9…11%).

С позиции дислокационной теории упрочнения, выделение дисперсных частиц может оказывать воздействие на двигающиеся дислокации по нескольким механизмам. Наиболее значимыми являются механизмы перерезания и огибания. Пересечение кривых критического напряжения для этих двух процессов в зависимости от времени старения определяет максимум прочности. Наши

оценки показывают, что максимум упрочнения достигается ещё на стадии охлаждения после прессования. Поэтому основным механизмом прохождения дислокаций через частицы является огибание. А поскольку в ходе длительной выдержки развивается коагуляция частиц, приводящая к возрастанию межчастичного расстояния l, то предел текучести β-фазы должен снижаться со временем в соответствии с уравнением [7]

$$\tau_{\text{ог}} \approx \frac{G \cdot b}{l - 2R}, \tag{1}$$

в котором G – модуль сдвига, а b – вектор Бюргерса дислокаций. Если выразить это расстояние через объёмную долю выделений f и их размер (радиус) R, то формулу можно преобразовать к виду

$$\tau_{\text{ог}} \approx \lambda_1 \frac{G \cdot b\sqrt{f}}{R}, \tag{2}$$

где объёмную долю выделений можно считать постоянной величиной. Поскольку для размера частиц в условиях диффузионного роста справедливо выражение

$$R \simeq \sqrt{Dt} \tag{3}$$

то зависимость $\tau_{\text{ог}}$ от времени будет определена формулой

$$\Delta\sigma_{\text{T}} = \lambda_2 \exp\left(\frac{U}{2RT}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{t}}, \tag{4}$$

в которой время t должно отсчитываться от момента зарождения частиц. Но так как началу эксплуатации соответствует большая степень выделения, то заменим t на $t + t_0$, где t_0 есть некоторое эквивалентное время предварительного распада, который происходил до начала эксплуатации. Отсюда для изменения предела текучести β-фазы во времени получаем уравнение

$$\sigma^{\beta}_{0,2} \approx \sigma^{\beta}_{\text{T}} = \sigma^{\beta}_{\text{T}}(0) + \Delta\sigma^{\beta}_{\text{T(max)}} - \frac{\lambda_2}{\sqrt{t + t_0}} \cdot \exp\left(\frac{U}{2RT}\right) = \sigma^{\beta}_{\text{T}}(0) + \Delta\sigma^{\beta}_{\text{T(max)}}\left(1 - \sqrt{\frac{t_0}{t + t_0}}\right). \tag{5}$$

В представленных выше формулах U – энергия активации диффузии, λ_1 и λ_2 – константы, $\sigma^{\beta}_{\text{T}}(0)$ – предел текучести β-фазы в начальный момент эксплуатации ($t = 0$), а $\sigma^{\beta}_{\text{T(max)}}$ – максимальный эффект разупрочнения при $t \to \infty$.

Имеются данные [8] о том, что после охлаждения α-фазы от температур 250…470 °С она представляет пересыщенный твёрдый раствор. При последующем нагреве до относительно невысоких температур менее 250 °С и выдержки в ней происходит процесс выделения фаз по реакции прерывистого распада $\alpha \to \Phi + \alpha'$, для которого характерно формирование перлитоподобной структуры $\Phi + \alpha'$, где Φ – выделяющаяся фаза, а α' – твёрдый раствор, обеднённый компонентами (Al, Li, Zn, Mg), перешедшими в фазу старения Φ. До сих пор достоверно не установлен тип фазы, выделяющейся при прерывистом распаде α-раствора. Предполагают [2, 8], что фазой Φ могут быть $Mg_{17}Al_{12}$, $MgLi_2Al$, AlLi, в которых растворены Zn и Cd, либо сочетание этих фаз. Заметим, что во всех случаях кинетика выделения этих фаз лимитируется диффузией алюминия или магния. По данным [9], энергия активации самодиффузии магния составляет 140 кДж/моль. В работе [10] показано, что энергия активации диффузии алюминия в магний составляет 143 кДж/моль. Фактически энергии активации диффузии и магния, и алюминия равны. Это даёт основание считать, что скорости выделения отмеченных фаз должны быть весьма близкими.

Кинетику распада обычно описывают уравнением Аврами

$$f = 1 - \exp(-pt^n), \tag{6}$$

где f – доля превращения, t – длительность старения. Для определения величин p и n выражение (6) удобно преобразовать к виду $\ln\left(-\ln(1-f)\right) = \ln p + n \ln t$. Математическая обработка экспериментальных данных [11] о прерывистом распаде в магниевом сплаве Mg–9%Al–2%Zn, состав которого близок к составу α-фазы рассматриваемого сплава, дала следующие значения коэффициентов: $n = 2 \pm 0{,}2$; $\ln p = 56{,}32 - 17980/T$. Тогда при 20 °С $p = 0{,}00644$ лет$^{-2}$. В ходе прерывистого распада упрочнение сплава пропорционально объёмной доле превращения, определяемой по

(6). Но поскольку распад мог проходить в период, предшествующий эксплуатации, мы примем аналогично (5), что

$$\sigma_{0,2}^{\alpha}(t) = \sigma_{\mathrm{T}}^{\alpha}(0) + \Delta\sigma_{\mathrm{T(max)}}^{\alpha} \cdot \left[\exp\left(-pt_0^2\right) - \exp\left(-p(t_0+t)^2\right) \right]. \qquad (7)$$

С увеличением длительности выдержки предел текучести возрастает. Для рассматриваемого сплава будем предполагать [7], что предел текучести сплава равен среднему из пределов текучести фаз с весовыми множителями, равными их объёмным долям, то есть

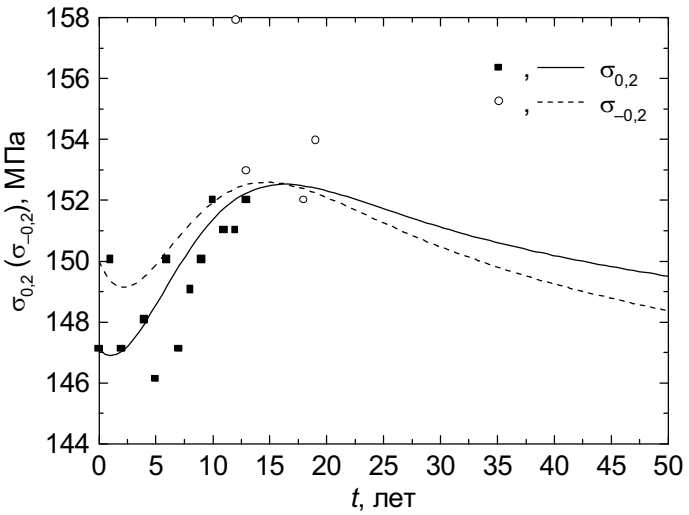
$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{0,2} &= \sigma_{0,2}^{\alpha} f_{\alpha} + \sigma_{0,2}^{\beta} f_{\beta}, \\ \bar{\sigma}_{-0,2} &= \sigma_{0,2}^{\alpha} f_{\alpha} + m\sigma_{0,2}^{\beta} f_{\beta}. \end{aligned} \qquad (8)$$

Коэффициент $m \approx 1{,}3$ учитывает, что для β-фазы, как и для многих других ГПУ-фаз, пределы текучести на сжатие и растяжение не равны, но пропорциональны [12]. С учётом выражений (5) и (7) получаем окончательные формулы для пределов текучести на растяжение и сжатие:

$$\begin{aligned} \sigma_{0,2} &= \sigma_{0,2}(0) + K_{\alpha}\left[\exp\left(-pt_0^2\right) - \exp\left(-p(t_0+t)^2\right) \right] - K_{\beta}\left[1 - \sqrt{\frac{t_0}{t+t_0}} \right]; \\ \sigma_{-0,2} &= \sigma_{-0,2}(0) + K_{\alpha}\left[\exp\left(-pt_0^2\right) - \exp\left(-p(t_0+t)^2\right) \right] - mK_{\beta}\left[1 - \sqrt{\frac{t_0}{t+t_0}} \right], \end{aligned} \qquad (9)$$

где обозначено $K_{\alpha} = f_{\alpha} \cdot \Delta\sigma_{\mathrm{T(max)}}^{\alpha}$ и $K_{\beta} = f_{\beta} \cdot \Delta\sigma_{\mathrm{T(max)}}^{\beta}$. Для исходного состояния $f_{\alpha} = 0{,}333$ и $f_{\beta} = 0{,}667$. Величины t_0, K_{α} и K_{β} неизвестны, однако имеется массив данных об изменении $\sigma_{0,2}$ и $\sigma_{-0,2}$ сплава в течение довольно большого периода наблюдений. Поэтому эти параметры были подобраны на основе принципа наилучшего согласия экспериментальных и теоретических кривых: t_0 = 5 лет; K_{α} = 20 МПа; K_{β} = 20 МПа.

Результаты расчёта в сравнении с экспериментальными данными приведены на рисунке.



Результаты расчёта изменения пределов текучести при растяжении и сжатии в зависимости от времени выдержки при 20 °С. Точки – экспериментальные данные

Пределы текучести при сжатии и растяжении достигают максимума при выдержке 14–16 лет, а затем начинается их снижение. Интересно, что после 16 лет выдержки изменяется соотношение $\sigma_{0,2}/\sigma_{-0,2}$: предел текучести при растяжении становится бóльшим, чем при сжатии.

Работа поддержана РФФИ и Администрацией Челябинской области (грант 04-02-96006-р2004урал_а), а также грантом поддержки ведущих научных школ НШ-5965.2006.3.

Литература

1. Изучение и моделирование возврата в сплаве АМг6 с целью прогнозирования ресурса эксплуатации деталей авиакосмической техники / Д.А. Мирзаев, Ю.Д. Корягин, Я.С. Добрынина, А.А. Звонков // Физика металлов и металловедение. – 2004. – Т. 98. – № 2. – С. 11–18.
2. Магниево-литиевые сплавы / Под ред. М.Е. Дрица. – М.: Металлургия, 1980. – 140 с.
3. Лёгкие сплавы, содержащие литий / М.Е. Дриц, Е.М. Падежнова, Н.Л. Рохлин и др. – М.: Наука, 1982. – 144 с.
4. Дриц М.Е., Свидерская З.А., Трохова В.Ф. О стабильности свойств магниево-литиевых сплавов со структурой $\alpha+\beta$, подвергнутых термической и термомеханической обработке // Физика и химия обработки материалов. – 1974. – № 1. – С. 161–164.
5. McDonald J.C. // Trans. ASM. – 1968. – V. 61. – P. 505.
6. McDonald J.C. // J. Inst. Metals. – 1969. – V. 97. – P. 353.
7. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. 2: Деформация. – М.: МИСиС, 1997. – 527 с.
8. Сверхлёгкие конструкционные сплавы / М.Е. Дриц, З.А. Свидерская, Ф.М. Елкин, В.Ф. Трохова – М.: Наука, 1972. – 144 с.
9. Федоров Г.Б., Смирнов Е.А. Диффузия в металлах и сплавах // Итоги науки и техники. Металловедение и термическая обработка. – М.: ВИНИТИ, 1974. – Т. 8. – С. 5–63.
10. Spigarell S. Creep of the Deformed and Heat Treated AZ91 MgAlZn Alloy // Scripta Materialia. – 2000. – V. 42. – № 4. – P. 397–402.
11. Баск Р.С. Магниевые сплавы // Старение сплавов. – М.: Металлургиздат, 1962. – С. 383–416.
12. Мирзаев Д.А., Окишев К.Ю. Физические основы прочности. – Челябинск: ЮУрГУ, 2004. – Ч. 2. – 132 с.

Поступила в редакцию 27 ноября 2006 г.

УДК 532.137.3

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА КРУТИЛЬНО-КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ВИСКОЗИМЕТРИИ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

И.В. Елюхина

Рассмотрены вопросы восстановления параметров колебаний на основе точных решений для линейных жидкостей на примере реостабильных образцов.

Часто, например, при исследовании идентифицируемости системы и моделировании условий колебаний, приходится решать обратную задачу, т.е. определять период τ и декремент затухания δ при заданных свойствах среды и условиях опыта. Для линейных сред в регулярном режиме колебаний задача при использовании в приложениях сложности не представляет, т.к. известно точное решение (назовем его формулой Ф1), в т.ч. для переходных процессов (Ф2) ([164, 219] в [1])). Для нелинейных сред имеются аналитические зависимости для прямой задачи [1], обладающей предпочтением при оценке параметров, т.к. переходные процессы можно не учитывать, используя Ф1; меньше чувствительность к ошибкам в начальном угловом смещении в i-м полупериоде α_i, т.е. в скорости сдвига $\widetilde{D}_i = \left|\mathrm{Re}(-\sqrt{-1}\xi_{0\text{эф}_i}\theta_i\alpha_i\sqrt{p_i}\,j_{21}(\sqrt{p_i}\xi_{0\text{эф}_i}))\kappa_i\right|$ (Ф3), где j_{21} – отношение функций Бесселя 1-го рода 2-го и 1-го порядков, $p=(\delta/2\pi+\sqrt{-1})\theta$, κ – коэффициент усреднения по i, $\theta_i=\tau_0/\tau$, τ_0 – для пустого тигля, ξ_0 – отношения радиуса тигля к толщине погранслоя, $\xi_{0\text{эф}}$ – эффективное ξ_0 для нелинейной среды; $\alpha_0 \sim 0{,}1$; случай длинного тигля [1].

В обратной задаче для i-ой точки определяется p_i (и $\widetilde{D}_i$ по $\xi_{0\text{эф}_i}$, например, методом последовательных приближений), затем по $\delta_i - \alpha_{i+1}$, проводится расчет для $(i+1)$-ой точки и т.д. Естественным представляется вариант 1, где в Ф3 используется p_i, найденное по Ф2. Но κ_i в Ф3 строится с учетом свойства изосинхронности для линейной среды, что приводит к ошибке, особенно при $i=1$ (рис. 1: $\widetilde{D}_1$ больше, $\xi_{0\text{эф}}$ меньше, δ больше и изменение $\delta(i)$ сильнее; A – отношение моментов инерции среды и пустой системы). Точность не хуже 0,1% при разных i обеспечивает вариант 2, в котором $\widetilde{D}_i$ находится по Ф2 или интегрально в рамках численной модели. Его можно порекомендовать для практических целей. Самым простым является вариант 3, в котором расчет выполняется по Ф1 и Ф3, но тогда ошибка в несколько процентов в 1-й точке отражается на последующих i (рис. 2: «реальное» течение совпадает с кривой 2). В модификации D усредняется по 2-ой четверти периода при $i=1$. Метод дает хорошие результаты при исследовании вторичных течений в нелинейных средах. Заметим, что для сред с упругостью таковые выражены слабее, обычно профиль скорости менее выпуклый, а область развитого течения больше. При оценке в случае нелинейности здесь вводится эффективное время релаксации, зависящее от $\xi_{0\text{эф}}$.



Рис. 1. Зависимость D от времени T



Рис. 2. Зависимость $\delta=\delta(i)$ для вариантов 3 (1) и 2 (2)

Литература

1. Елюхина И.В. Исследование неньютоновских свойств высокотемпературных жидкостей. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2006. – 140 с.

Поступила 1 ноября 2006 г.

УДК 532.137.3

ИДЕНТИФИКАЦИЯ НЕНЬЮТОНОВСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ЖИДКОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

И.В. Елюхина, Г.П. Вяткин

Выделены особенности колебаний, позволяющие идентифицировать реологический тип и свойства гетерогенных структур в опытах с жидкими металлами. Выполнена интерпретация результатов и даны рекомендации по обработке данных.

Метод крутильных колебаний [1] является основным для измерения вязкости высокотемпературных жидкостей и обладает широкими возможностями для выявления ньютоновского поведения [2]. Анализ опытных данных по жидким металлам позволил обнаружить некоторые закономерности в наблюдаемых в эксперименте параметрах, связанные с изменением декремента затухания δ и периода τ колебаний в зависимости от номера колебания N. Причиной этих факторов, не принимаемых во внимание при традиционной интерпретации, как раз и может служить нелинейный характер течения в тигле [2]. Фундаментальная задача об идентификации реологической принадлежности расплава и его свойств не может считаться решенной без реализации всего алгоритма параметрической идентификации [2], в т.ч. построения ковариационных матриц оцениваемых параметров по таковым для измеряемых величин, выполнения комплекса экспериментов согласно выбранным в терминах теории чувствительности оптимальным условиям и пр.

Имеющиеся данные получены в экспериментах, оптимизированных под определенную цель – надежную оценку кинематической вязкости ν ньютоновской среды. Поэтому построить строгое решение в их рамках не представляется возможным, т.к. могут быть найдены только точечные оценки без интервальных (недостаточно характеристик для статистической обработки или приводимые средние значения параметров в каждом из опытов, в их серии не являются подходящими в этом аспекте, опыты с хорошей наблюдаемостью неньютоновских эффектов (значительное изменение δ и τ от N) считались промахом и т.д.). К тому же, апробация на опыте «не преследует цели дать лишнее доказательство правильности теории метода, как это должно быть совершенно ясно» [1] для нелинейных сред из [2]. Приведенные ниже результаты интересны именно в том отношении, что обращают внимание на возможные варианты обработки данных и более полное использования поступающий из эксперимента информации. Это позволяет в рамках иного, чем ньютоновский, реологического типа расплава как исключить ряд противоречий в термодинамических зависимостях вязкости, так и установить особенности в строении чистых металлов или возникающих в процессе эксперимента гетерогенных систем, структурных превращений в них.

Модели и методы анализа. Для расчета вязкости ньютоновской жидкости по параметрам колебаний использовано вискозиметрическое уравнение Швидковского Е.Г. [1] вида

$$L'+L''p/q=2K(p-p_0); \qquad (1)$$

$$L=L_1+L_2,\ L_1=-2\nu M\beta\frac{J_2(\beta)}{J_1(\beta)},\ L_2=4\frac{M}{H}\frac{k^2}{\nu}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\mathrm{th}(\theta_n H/2)}{\mu_n^2\theta_n^3},$$

где $\beta=R\sqrt{k/\nu}$, $M=\rho\pi R^2H$, $\theta_n^2=\mu_n^2-k/\nu$; $k=p+iq$, $p=\delta/\tau$, $p_0=\delta_0/\tau_0$, $q=2\pi/\tau$, $q_0=2\pi/\tau_0$; $i=\sqrt{-1}$; J_l – функции Бесселя первого рода l-го порядка; M – масса среды в тигле высотой H и радиусом R; L_1 и L_2 – функции трения на боковой и одной торцовой поверхности; p – коэффициент затухания и q – циклическая частота колебаний; δ_0, τ_0 – δ, τ при $M=0$; μ_n – корни уравнения $J_1(\mu_n R)=0$. Введем также безразмерные комплексы, описывающими основные условия опыта: $A=MR^2/2K$ и $\xi_0=R/d$, где A – отношение моментов инерции среды в тигле и пустой подвесной системы K; $d=\sqrt{\nu/q_0}$ – естественный масштаб длины, толщина погранслоя.

Выделим наиболее важные моменты в чувствительности вязкости ньютоновской среды к наблюдаемым в эксперименте параметрам [1], в характере поведения параметров колебаний в процессе затухания для неньютоновских сред и особенностях параметрической идентификации таких систем, основах аналитического метода определения нелинейных свойств и пр. [2].

Для ньютоновской среды безразмерный период $\lambda = \tau / \tau_0$ уменьшается с ростом ξ_0 в основном при $\xi_0 \in (2;12)$, а поведение δ зависит от ξ_0: при $\xi_0 > \xi_{0_\delta}$ с ростом ξ_0 δ падает, а при $\xi_0 < \xi_{0_\delta}$ – растет [1]. Для длинного тигля $\xi_{0_\delta} \sim 4{,}3$, а с уменьшением H этот пик $\delta = \delta(\xi_0)$ смещается в сторону бóльших ξ_0. Тогда в районе максимума чувствительность v к δ, а, следовательно, и ошибка в v от ошибок измерения δ, очень высока, также как и к ошибкам в τ при ξ_0, близких к нулю и высоких ξ_0. При снижении A зависимости δ и λ от ξ_0 становятся более пологими, т.е. чувствительности, как и ошибки, вносимые одной и той же точностью измерения, растут. Слева от ξ_{0_δ} – сильновязкое приближение, при $\xi_0 > 10$ – слабовязкое, а интервал между ними отвечает промежуточной вязкости. С усилением упругих свойств число экстремумов на зависимостях τ и δ от ξ_0 растет, что определяется отношением длин вязкой и упругой волн.

Поведение реостабильных сред можно описать в терминах эффективных (усредненных, например, по периоду) значений $\xi_{0\text{эф}}$, а для вязкоупругих сред аналогично вводится понятие эффективного времени релаксации и т.д. [2]. В частности, для нелинейно вязких сред эффективное значение $\xi_{0\text{нв}} = \xi_0 / \sqrt{\bar{b}\widetilde{D}^{m-1}}$, где $\widetilde{D}$ – усредненная по внутренней поверхности тигля скорость сдвига D, $\bar{b}$ и m – постоянная и показатель степенного реологического закона, и $\xi_{0_{\text{нв}_\delta}} \sim 4{,}3$.

С ростом номера колебания N амплитудное значение $\widetilde{D}$ падает, поэтому для дилатантных сред ($m > 1$) $\xi_{0_{\text{нв}}}$ растет, а для псевдопластичных ($m < 1$) падает, и соответственно изменяются λ и δ. Так, при $m > 1$ если $\xi_{0_{\text{нв}}}$ при $N = 1$ находится в слабовязкой области, то λ и δ уменьшаются, а если сильновязкому – $\delta = \delta(N)$ проходит через максимум. Для вязкопластичных сред (предел текучести $\sigma_0 \neq 0$) при некотором $\widetilde{D}$ и ниже твердое ядро, где сдвиговые напряжения не превышают σ_0, заполняет весь тигль в любой момент времени и $\delta \sim \delta_0$, $\lambda_{\text{тв}} \sim (1+A)^{1/2}$. Для металлических образцов в вискозиметре в зависимости от величины и характера действия межчастичных сил характерен любой из этих типов, в т.ч. и с эффектами памяти. В каждом конкретном случае причины одного и того же реологического поведения могут быть различны.

Свойства нелинейных жидкостей определим из условия минимума функции качества, являющейся критерием соответствия экспериментальных и расчетных данных:

$$f = \sqrt{\sum \left(v_j - v_{\text{ýô}_j} \right)^2}, \tag{2}$$

где j – номер точки измерения (например, N); $v_{\text{эф}}$ – эффективная вязкость (например, для нелинейно вязкой среды $v_{\text{эф}_j} = \bar{b}\widetilde{D}_j^{m-1}$ ($\bar{b} = \bar{v}b$), для бингамовской среды $v_{\text{эф}_j} = \bar{v}c\left(1 + \bar{\sigma} / \widetilde{D}_j\right)$ ($\sigma_0 = \bar{v}c\bar{\sigma}$); v – вязкость, определенная по (1); $\bar{v} = \sum v_j / L$, L – число измерений;

$$\widetilde{D}_j = \frac{s_j}{RH + 0{,}5R^2} \left(\int_0^R D_1(r, -H) r dr + R \int_{-H}^{0} D_2(R, z) dz \right)\Bigg|_j, \tag{3}$$

где D_1 и D_2 – модуль $z\varphi$-й и $r\varphi$-й компонент тензора скоростей деформации в цилиндрической системе координат ($r, \varphi, z : r = 0$ – на оси, $r = R$ – на боковой стенке, $z = -H$ – на нижнем и $z = 0$ – на верхнем торцах); s_j – коэффициент усреднения по τ; первый и второй интегралы в (3)

$$\mathrm{I}_1 = \left|\mathrm{Re}(i_1)\right|,\ i_1 = -\sum_n a_n \theta_n \mathrm{th}(\theta_n H) \left[\frac{\pi R}{2\mu_n R} \left(J_1(\mu_n R)\mathbf{H}_0(\mu_n R) - J_0(\mu_n R)\mathbf{H}_1(\mu_n R) \right) \right];$$

$$\mathrm{I}_2 = \left|\mathrm{Re}(i_2)\right|,\ i_2 = -(RHi\beta q \alpha_j J_2(\beta) / J_1(\beta) + R\sum_n a_n J_2(\mu_n R)\mu_n \mathrm{th}(\theta_n H) / \theta_n), \tag{4}$$

$$a_n = 2iq\alpha_j \left(\mu_n^2 / \theta_n^2 - 1 \right) \Big/ \left(\mu_n J_0(\mu_n R) \right),\ \theta_n^2 = \mu_n^2 - k/v;\ J_l(z) = \pi^{-1} \int_0^{\pi} \cos(z \sin\theta - l\theta) d\theta,$$

$$\mathbf{E}_l(z)=\pi^{-1}\int_0^{\pi}\sin(l\theta-z\sin\theta)d\theta\,,\ \mathbf{H}_0(z)=-\mathbf{E}_0(z)\,,\ \mathbf{H}_1(z)=2/\pi-\mathbf{E}_1(z)\ \text{([142] в [2])};$$

$\mathbf{E}_l$, $\mathbf{H}_l$ – функции Вебера и Струве l-го порядка (l – целое положительное число или нуль); α_j – начальное угловое смещение тигля для каждого j ($\alpha_{N=1}=\alpha_0\sim 0{,}1$).

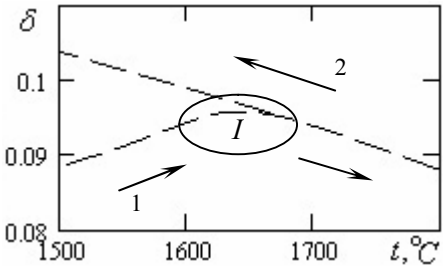


Рис. 1. Температурная зависимость δ

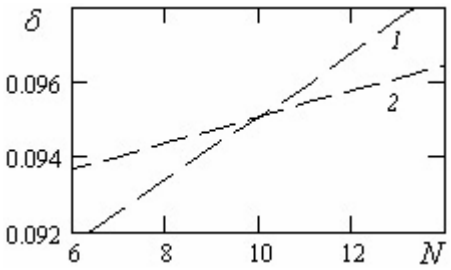


Рис. 2. Зависимость $\delta=\delta(N)$: 1, 2 – номера точек

Далее размерные величины даны в системе СГС (температура t в °С), данные сглажены, выводы выполнены при качественной воспроизводимости особенностей в различных экспериментах. Моделированием установлено отсутствие влияния на результаты по α_j переходных процессов при условиях и алгоритме опыта, когда движение инициировалось в вынужденном режиме.

Результаты и обсуждение. Несмотря на достаточно широкий разброс данных по декременту, общие тенденции в его изменении в процессе затухания колебаний проявлялись достаточно отчетливо. Свойство неизосинхронности наиболее существенно после расплавления материала и угасает по мере роста t. В этой связи интерес представляют эксперименты, когда образец длительное время находится при одной и той же t, а его свойства (а вероятно и реологический тип) изменяются, что проявляется в наблюдаемых в опыте параметрах колебаний. Здесь следует учитывать и факторы, упоминаемые еще Швидковским Е.Г. [1], например, возникновение пленок на поверхности, что изменяет расчетную зависимость от формулы для одного торца до таковой для двух, влияние плоских движений и пр. вопросы теории и техники эксперимента. Эффекты возникали и в процессе опыта, особенно если на температурных зависимостях вязкости имелись аномалии.

В ряде случаев зависимость $\delta=\delta(N)$ носила колебательный характер, что говорит о наличии упругих свойств. Такое характерно для линейных вязкоупругих систем в переходных процессах (здесь не проявляющихся) или при наличии дополнительно пластичных свойств. В пользу последнего говорит и то обстоятельство, что $\xi_{0\text{эф}}$ с ростом N изменяется, а наличие минимумов $\delta=\delta(N)$ обеспечивается таковыми на зависимости $\delta=\delta(\xi_{0\text{эф}})$ для вязкоупругих сред. Для линейной среды τ и δ в регулярном режиме постоянны, а свойства оцениваются из уравнения: для вязкой среды – по [1] (например, (1)), а вязкоупругой – в терминах комплексной вязкости [2]. Метод затухающих колебаний малоэффективен для измерения линейных вязкоупругих свойств [2], поэтому для уточнения упругого характера расплава комплекс экспериментов должен включать измерения в вынужденном режиме по зависимости Клеймана Р.Н. ([221] в [2]). Заметим, что для линейных сред τ и δ не зависят от α_0, а АФХ – от амплитуды вынуждающей силы.

Отмеченную систему поведения можно пояснить следующим образом. Разогретый металл демонстрирует вязко(псевдо)пластичное поведение (например, [98] в [2]), в общем случае с наличием упругой составляющей в уравнении состояния. В процессе плавления металла псевдопластичный характер остается, в т.ч. из-за присутствия в гетерогенной области кристаллов твердой фазы, но его свойства принимают значения по порядку более близкие к жидкому состоянию. По мере роста t происходит перестройка структуры в таковую, отвечающую ньютоновской среде (упругие и пластические составляющие теперь выражены хуже), определяющую роль начинают играть иные механизмы. Превращения в процессе опыта, наличие в гомогенной среде нерастворимых и растворимых примесей и пр. приводят реологический тип, например, к дилатантному.

Пример 1. Условия эксперимента: $\delta_0\sim 0{,}006$, $\tau_0\sim 3{,}09$; $\tau\sim 3{,}18$, $R\sim 0{,}68$; $\chi=H/R\sim 3{,}4$; $A\sim 0{,}12$. В опытном образце в районе точки ветвления (область I на рис. 1) зависимости $\delta=\delta(N)$ несколько колеблются около среднего значения, возрастающего с ростом N. Довери-

тельные интервалы для значений δ для верхней и нижней кривых пересекаются только вблизи точки ветвления. Будем исходить из монотонного характера $\delta = \delta(N)$ (рис. 2); рассмотрим точки, отвечающие ветви 2: 1 – $t = 1670$ и 2 – 1725. При отдалении от области I колебания приближаются к изосинхронным. Для точки 2, проходимой в опыте перед точкой 1 и отвечающей более высокой t, зависимость $\delta = \delta(N)$ более пологая (что качественно характерно и для случая равных свойств одного типа среды), а усредненные по всем N значения $\overline{\delta}$ и $\overline{v}$ ниже (слабовязкая область: $\xi_{0\text{эф}} \sim 10$, для первой точки $\xi_{0\text{эф}}$ ниже; $\overline{v} \sim 0{,}009$). Значения параметров колебаний для нелинейных сред зависят от α_0 и при измерении α_j при различных α_0 получаются различные $\overline{\delta}$ (для точек 1 и 2 разница $\Delta\alpha_0 < 1\%$). Для $t \sim 1675$ ветви 1 ситуация с $\delta = \delta(N)$ близка к таковой для точки 1, а при их совмещении с учетом α_0 ($\Delta\alpha_0 < 5\%$) данные можно считать совпадающими. Целевая функция (2) имеет криволинейный овраг на плоскости (m, b) и ввиду слабого изменения δ от N широкий диапазон значений f на оси оврага близок к минимальному, что осложняет процедуру корректной оценки. Для лучшей наблюдаемости свойств следует перейти к более низким ξ_0 (целесообразно в сильновязкую область), χ или высоким A, а оптимальные условия выбираются в рамках матрицы Якоби [2]. Псевдопластичные свойства выражены сильнее вблизи ветвления кривых $\delta = \delta(t)$: $m \sim 0{,}74$ ($b \sim 0{,}86$) для точки 1 и $m \sim 0{,}88$ ($b \sim 0{,}93$) для точки 2 (при $\alpha_0 \sim 0{,}1$), что говорит о структурных превращениях в этом диапазоне t. На рис. 3 отмечены кривые течения в диапазоне $\widetilde{D}$, проходимом в эксперименте. Для каждого опыта он может быть разный (в т.ч. разное число периодов L) и это еще один из путей получения иного $\overline{\delta}$.

Пример 2. В экспериментах с железом после расплавления наблюдалось ярко выраженное псевдо(вязко)пластичное поведение (рис. 4), пропадающее с ростом t ($\overline{v} \sim 0{,}199$, опытные условия близки к примеру 1). Оценивание свойств по (2)–(4) дает $m \sim 0{,}65$ и $b \sim 0{,}43$, а если использовать бингамовскую модель, то $\overline{\sigma} \sim 0{,}05$ и $c \sim 0{,}65$ (минимумы функций f имеют одинаковый порядок). При этом на оси оврага на плоскости $(c, \overline{\sigma})$ возникают локальные минимумы, выраженные слабее, что может быть обусловлено ошибками и низкой наблюдаемостью при этих условиях пластических эффектов. Таковой наблюдается в случае, когда пластическая вязкость в области, где существует течение, имеет такой же порядок ($\sim 5 \cdot 10^{-3}$), как и ньютоновская при более высокой температуре, что свидетельствует о $\sigma_0 \neq 0$, стремящемся к нулю с ростом t. Условия, возникающие в тигле [2], позволяют обнаружить малые σ_0, не проявляющиеся в иных методиках. Наличие σ_0 изменяет τ и δ, но для корректного решения прямой задачи реометрии ввиду обратной величины чувствительности требуется проведение специальной оптимизации и следует, например, увеличить продолжительность измерений в каждом опыте, т.е. L.

Нелинейное поведение возникало и при уменьшении t, например, в экспериментах с жидким алюминием (рис. 4 для $t = 630$; $A \sim 0{,}056$, $\xi_{0\text{эф}}$ при работе в слабовязкой области ~ 14 и в сильновязкой – $\sim 2{,}2$), что может быть обусловлено в т.ч. проникновением окислов в расплав и возникновением гетерогенной системы. Данные, как и для Fe, отвечают промежутку между солидусом и ликвидусом, но нелинейность носит дилатантный характер. На подобное поведение могут влиять схемы фазовых переходов, начинающихся при бóльших R. Расчеты выполнены для приведенного для всех температур τ, в то время как ниже ликвидуса период резко возрастает, как и чувствительность к ошибкам в нем. В обоих случаях условия отвечают сильновязкой области, что определяет выбор одного из двух решений по (1). Об этом свидетельствуют в т.ч. более низкие значения $\overline{\delta}$, чем в соседнем измерении и их тренд в процессе опыта. Модель с $m > 1$ обнаруживалась в ряде расплавов и выше ликвидуса, а с ростом t показатель $m \to 1$.

Пример 3. Пусть эксперименты начинаются при близких α_0 с расплавами одинакового реологического типа и свойствами (близкие содержание примесей, структура и пр.). Покажем, что неучет даже незначительного изменения δ при изменении N (обусловленное слабо нелинейным типом, например с $m = 0{,}85$) может приводить к ошибкам и следовательно противоречиям в данных по вязкости при использовании различных установок в предположении ньютоновского характера течения. Это особенно характерно для низких температур из исследуемого интервала.

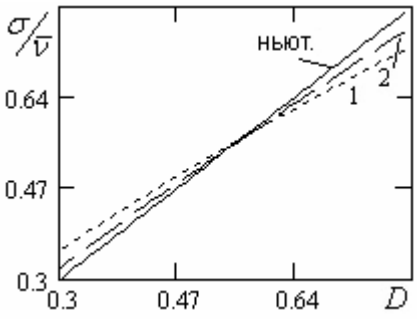


Рис. 3. Зависимость напряжения σ от скорости сдвига D

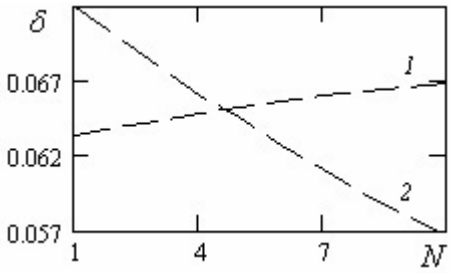


Рис. 4. Зависимость $\delta = \delta(N)$: 1 – для Al **, 2 – для** Fe

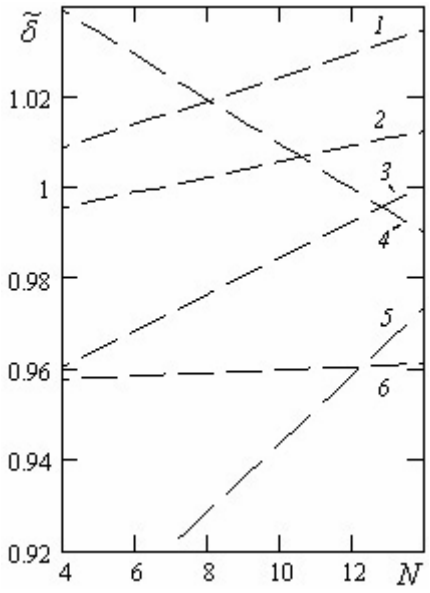


Рис. 5. Зависимости $\tilde{\delta} = \kappa\delta(N)$: 1 … 6 – номера точек; 1 – $\kappa = 30$, 2 – 45, 3 – 15, 4 – 34, 5 – 7, 6 – 150

Для наглядности примем приближение длинного цилиндра (при $\delta_0 \sim 0$) в терминах безразмерных параметров (D, b и пр.) [2], моделирование закона колебаний [2] выполним для $\alpha_0 \sim 0{,}11$ (с учетом переходных процессов). Значение $b = 0{,}7$ принято исходя из $bD^{m-1} - 1 \to \min$ в диапазоне рабочих $\tilde{D}$; $\xi_{0\text{эф}} = \xi_0\varphi$, где ξ_0 фиксировано. По традиционной методике оценим φ – величину, которая для ньютоновской жидкости при различных опытных условиях была бы константой, для точек: $A = 0{,}1$, $\xi_0 = 10$ (1); 0,2, 10 (2); 0,01, 10 (3); 0,1, 20 (4); 0,05, 15 (5); 0,075, 2 (6). Получаем: $\varphi \sim 1{,}08$ (1); 1,07 (2); 1,31 (3); 1,18 (4); 1,79 (5); 0,96 (6), т.е. результаты, например, по (1) и (5), часто встречаемых в опытах, отличаются в среднем на 50%. Ошибки в иных параметрах к тому же будут давать еще более значительные отклонения. Заметим, что относительное изменение вязкости в 2 раза выше, чем изменение ξ_0. Высокие ошибки в параметрах установки и колебаний и различная чувствительность вязкости к ним при различных A и ξ_0, конечно, также могут изменять оценку $\bar{v}$ и для ньютоновской среды. Но корректный учет в рамках [1] позволит выделить их из ошибок, описанных здесь, что может служить критерием нелинейного поведения.

Заключение. Итак, продемонстрированы возможности экспериментальной идентификации реологического типа расплавов в общем случае как нелинейно вязких жидкостей, что в свою очередь позволяет получить новую информацию о физико-химической природе этих труднодоступных для экспериментального изучения сред, а также выполнить рекомендации для производственных целей. Подобный подход, как указывалось в [1], «открывает возможность связать кинетику процесса затвердевания сплава с его вязкостными свойствами» и будет полезен при изучении влияния и механизма удаления из исследуемых систем примесей, структурных особенностей в сплавах, проверки согласованности данных и пр.

В работе использованы экспериментальные данные, полученные в лаборатории исследования физических свойств расплавов УГТУ–УПИ. Неоценимую помощь в ее проведении оказали Вьюхин В.В., Тягунов Г.В., Барышев Е.Е., за что авторы им весьма признательны.

Литература

1. Швидковский Е.Г. Некоторые вопросы вязкости расплавленных металлов. – М.: ГИТТЛ, 1955. – 206 с.

2. Елюхина И.В. Исследование неньютоновских свойств высокотемпературных жидкостей. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2006. – 140 с.

Поступила 1 ноября 2006 г.

УДК 534.2

ПАРАМЕТРЫ ИМПУЛЬСОВ РЭЛЕЕВСКИХ ВОЛН, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ В ФЕРРОМАГНИТНОМ МЕТАЛЛЕ[1]

С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, Е.В. Голубев

Проведены эксперименты по определению параметров ультразвуковых импульсов, возбуждаемых лазерным излучением в железоникелевом сплаве инварного состава 32НКД. Зафиксирован нелинейный рост амплитуды акустических импульсов при увеличении энергии возбуждающих оптических импульсов и различное относительное изменение амплитуды с температурой при различных значениях энергии оптических импульсов, что качественно согласуется с данными расчета, основанными на реальной температурной зависимости коэффициента теплового расширения образца.

Экспериментальные исследования проводились на установке, схема и характеристики которой подробно описаны в работе [1]. Образец представлял собой шлифованную пластину толщиной 10 мм, изготовленную из кованой заготовки железоникелевого сплава инварного состава 32НКД (32,8 мас. % Ni по химическому анализу). Выбор инвара, как среды моделирующей поведение ферромагнетиков при нагревании, обусловлен относительно невысоким значением температуры Кюри (220 °С). Быстрый рост коэффициента теплового расширения от минимального значения при комнатной температуре до почти постоянного значения при высоких температурах (больших 300 °С) позволяет наблюдать на одном образце акустические импульсы, соответствующие как большой нелинейности, так и случаю пренебрежимо малого изменения данного коэффициента в процессе лазерного возбуждения.

Первый этап исследований заключается в установлении характеристик акустических импульсов в зависимости от плотности энергии падающего излучения. Температура в зоне облучения, в первом приближении, пропорциональна энергии падающего излучения [2]. Согласно [3], максимальная плотность теплового потока, при которой еще реализуется термоупругий механизм возбуждения акустических волн, для данного материала составляет 10 МВт/см^2. В настоящих исследованиях мы ограничивались этим значением теплового потока первичного излучения для возможности сравнения опытных данных и результатов расчета. На рис. 1 приведена типичная зависимость амплитуды (размах) акустических сигналов (КПВТП) от средней плотности падающего теплового потока для диаметра лазерного пучка равного 1 мм. Каждая точка на рисунках является средним значением амплитуды для 40–60 импульсов. Отклонение значений амплитуды

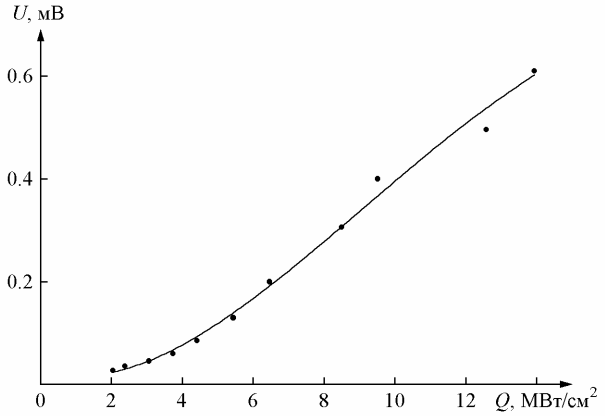


Рис. 1

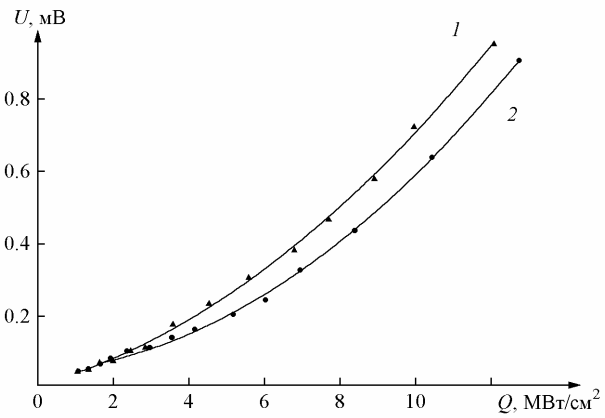


Рис.2

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ-Урал, проект № 04-02-96043-р2004урал_а.

импульсов от среднего значения не превышало ±(7–10) % и было обусловлено, в первую очередь, нестабильностью лазерного излучения по энергии. Аналогичные зависимости для диаметров лазерного пучка 1,5 и 2 мм представлены на рис. 2 кривыми 1 и 2. Согласно рис. 1 и 2, зависимость амплитуды импульса от интенсивности лазерного излучения имеет нелинейный характер, что подтверждается данными расчета [4].

Второй этап экспериментальных исследований заключался в определении зависимости характеристик сигналов от температуры ферромагнитного образца. Согласно результатам расчета, меньшее значение энергии падающего на поверхность образца оптического импульса при увеличении температуры образца из сплава 32НКД соответствует большему относительному изменению амплитуды акустического импульса. Для проверки данного утверждения был проведен ряд экспериментов с диаметром лазерного пучка 1,5 мм, в которых поверхность образца была обработана одинаковым образом для обеспечения независимости результатов экспериментов.

На рис. 3 и 4 приведены температурные зависимости амплитуды электрических импульсов, полученные при различных интенсивностях падающего излучения. На рис. 3 для температуры 505 К показаны доверительные интервалы, в пределы которых попадает 95% значений нормированной амплитуды импульсов, пропорциональных нормальной составляющей скорости упругих смещений. Аналогичные интервалы приведены и на рис. 4 для температуры 545 К. При увеличении величины средней плотности падающего теплового потока от 1,2 до 12 МВт/см^2 наблюдается устойчивое уменьшение максимального относительного изменения амплитуды от 4,5 до 1, что качественно согласуется с выводами теории. Значение падающего теплового потока 12 МВт/см^2 соответствует границе теплового механизма для исследуемого образца при используемом способе обработки поверхности.

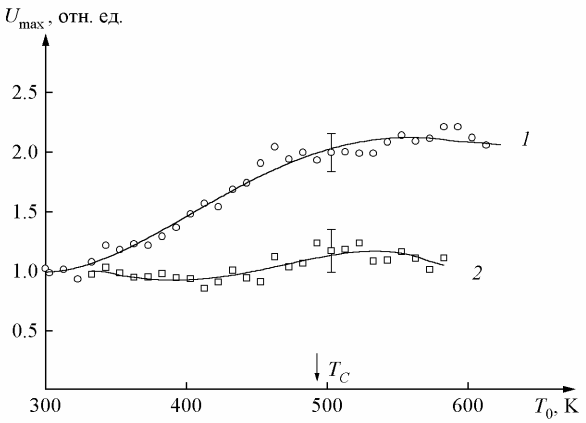


Рис. 3
***1* – 6; *2* – 12 МВт/см^2. ЭМАП. *d* = 1,5 мм**

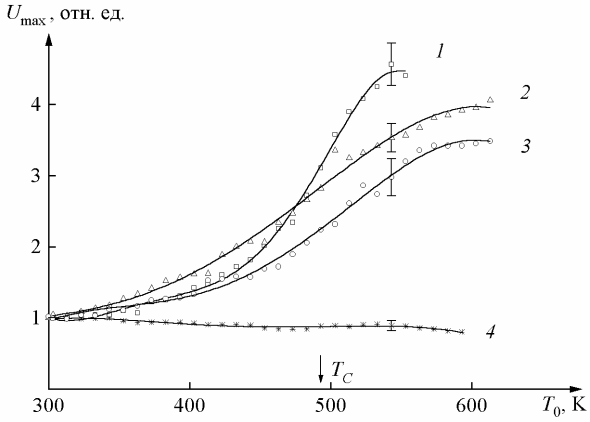


Рис. 4
***1* – 1,2; *2* – 2,1; *3* – 2,5; *4* – 50 МВт/см^2. КПВТП. *d* = 1,5 мм**

Литература

1. Гуревич С.Ю., Петров Ю.В., Голубев Е.В. Экспериментальные исследования по лазерной генерации поверхностных акустических волн в ферромагнетиках // Дефектоскопия. – 2004. – № 2. – С. 47–52.

2. Александров А.Н., Голубев Е.В. Нагрев бесконечной металлической пластины импульсным лазерным излучением // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 5. – № 2 (42). – С. 80–85.

3. О границах механизмов термоакустического преобразования при лазерной генерации ультразвука в металлах / С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, А.А. Шульгинов, К.В. Прокопьев // Дефектоскопия. – 2001. – № 4. – С. 69–75.

4. Гуревич С.Ю., Голубев Е.В. Лазерное возбуждение поверхностных акустических волн в ферромагнетике при тепловом механизме // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 4. – № 8 (24). – С. 54–59.

Поступила в редакцию 10 декабря 2006 г.

Химия

УДК 543.572.3

НОВЫЙ СПОСОБ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

В.В. Авдин, А.А. Лымарь, А.В. Батист

Предложен новый метод анализа данных дифференциального термического анализа (ДТА), основанный на предположении, что термические процессы дегидратации и кристаллизации описываются функцией Гаусса. Процессы, протекающие при термолизе, незначительно различаются по температурным интервалам, что приводит к уширению минимумов и максимумов на кривых ДТА. Для разделения перекрывающихся эффектов предложено аппроксимировать кривую ДТА функциями Гаусса. Методика проверена на кристаллогидратах сульфатов меди ($CuSO_4 \cdot 5H_2O$) и кобальта ($CoSO_4 \cdot 7H_2O$), а также на гидроксиде алюминия ($Al(OH)_3$ или $Al_2O_3 \cdot 3H_2O$). Обработка кривых ДТА аморфных оксигидратов циркония, иттрия и лантана показала, что дегидратация данных соединений может протекать в 8, 14 и 18 стадий соответственно.

Дифференциальный термический анализ (ДТА) является распространённым методом исследования как органических, так и неорганических систем, позволяющим, в частности, определить характеристики типов связанной воды в изучаемом материале. Современные дериватографы выдают данные о ходе ДТА с высокой точностью в цифровом виде, что даёт возможность получить гораздо больше информации о связанной воде.

В неорганических соединениях встречается несколько типов связанной воды. Наибольшее разнообразие наблюдается в аморфных материалах [1]. В них вода может быть: 1) поровой, удерживаемой капиллярными силами; 2) координированной матрицеобразующими элементами (аква-группы); 3) адсорбированной на гелевых частицах (связанной водородными связями с аква-группами); 4) химически связанной, образующейся при оксоляции концевых ОН-групп; 5) химически связанной, образующейся при оксоляции мостиковых ол-групп. Таким образом, на кривой ДТА пористых неорганических аморфных соединений, например, оксигидратов тяжёлых металлов, должно присутствовать не менее пяти эндоэффектов. Кроме того, такие соединения, как правило, состоят из полимерных агрегатов, различающихся как размером, так и строением [2]. Вода, образующаяся при оксоляции ОН- или ол-групп, расположенных внутри и снаружи крупного гелевого агрегата, очевидно, будет отщепляться в близких, но различных температурных интервалах. В результате температурные интервалы перекрываются, эндоэффекты на кривых ДТА уширяются, на них появляются раздвоенности и «плечи».

Процесс температурной дегидратации и кристаллизации фактически представляет собой фазовый переход, который происходит скачкообразно. С учётом инертности дериватографа процесс дегидратации одного типа связанной воды от одинаковых по строению и свойствам полимерных областей или процесс кристаллизации регистрируется в виде куполообразной зависимости. Обработка экспериментальных данных показала, что наилучшим образом для аппроксимации такой зависимости подходит кривая Гаусса.

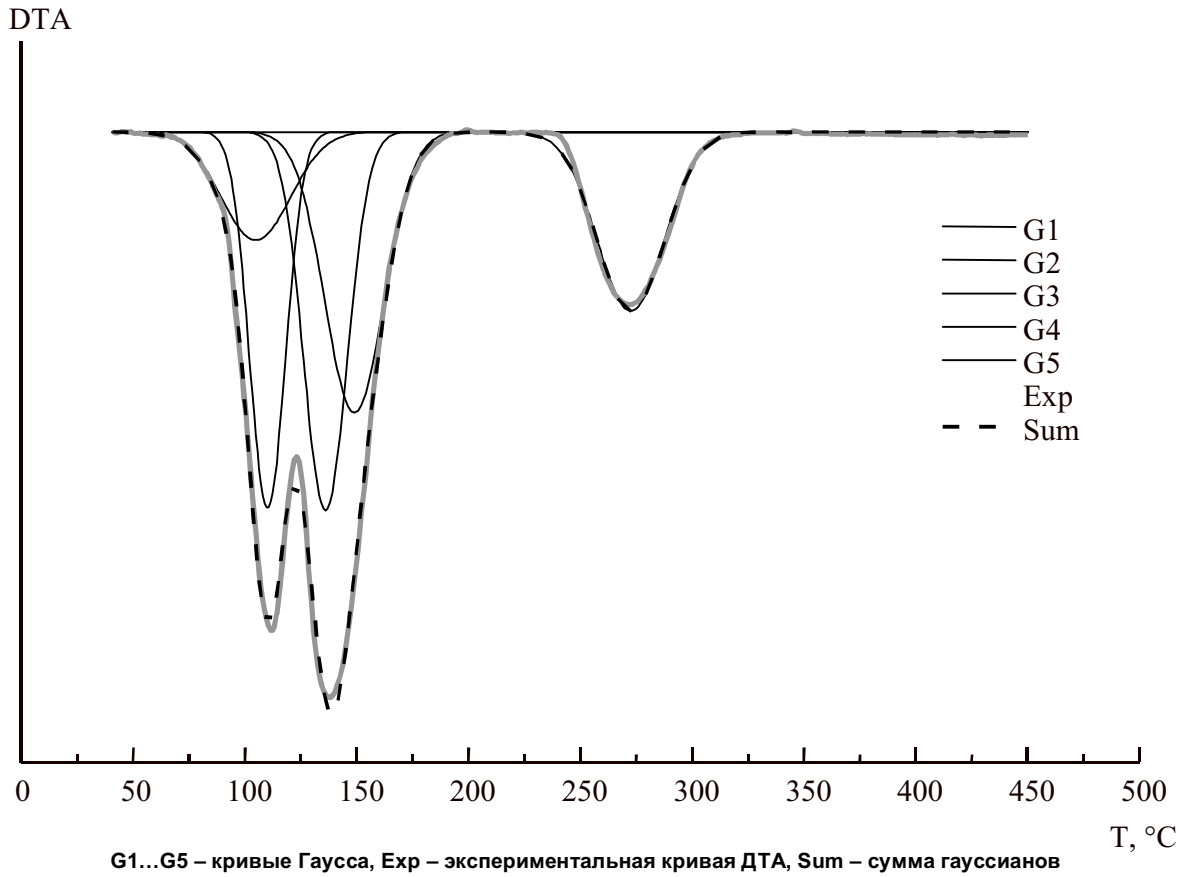
Таким образом, разделить перекрывающиеся эндоэффекты дегидратации различных сортов связанной воды и кристаллизации различных полимерных областей можно, аппроксимируя экспериментальную кривую ДТА функциями Гаусса. Впервые идея подобной обработки данных ДТА была высказана в работе [3], однако автор не привёл свидетельств правомерности предложенной методики.

Нами предпринята попытка экспериментально подтвердить правильность подобного подхода. Для проведения аппроксимации написана программа на языке Borland C++ Builder 6.0. В качестве минимизируемого функционала используется сумма квадратов отклонений от аппрокси-

мируемой кривой. Переменными аппроксимации являются положение вершины гауссиана, его среднеквадратическое отклонение и площадь под кривой. Таким образом, при аппроксимации кривой ДТА *n* пиками, количество переменных равно 3*n*, при этом количество экспериментальных точек – порядка тысячи. Начальными условиями аппроксимации служит примерное расположение кривых Гаусса. Для минимизации функционала используется метод покоординатного спуска Гаусса–Зейделя [4]. Данный метод позволяет находить локальные минимумы, соответствующие отдельным эндоэффектам. Качество аппроксимации оценивается по значению суммы квадратов отклонений, коэффициенту корреляции и линией разности между кривой ДТА и суммой гауссианов.

В качестве тестовых образцов использовали соединения, имеющие известный брутто-состав, которые не претерпевают при нагреве никаких превращений, кроме дегидратации. В частности, аппроксимировали кривые ДТА таких кристаллогидратов как сульфаты меди ($CuSO_4 \cdot 5H_2O$) и кобальта ($CoSO_4 \cdot 7H_2O$), а также гидроксид алюминия ($Al(OH)_3$ или $Al_2O_3 \cdot 3H_2O$). Все использованные реактивы имеют квалификацию «х.ч.». Экспериментальные кривые ДТА снимали на дериватографе Paulik-Paulik-Erdey 3434-C при скорости нагрева печи 10 °C/мин в атмосфере собственных паров с дискретностью 0,1 °C по температуре и 0,1 мин – по времени.

Кривые ДТА тестовых соединений с коэффициентом корреляции более 0,999 (между кривыми, полученными суммированием гауссианов и экспериментально) аппроксимированы соответственно 5, 7 и 3 функциями Гаусса. Пример аппроксимации кривой ДТА дегидратации сульфата меди приведён на рис. 1. Как видно из рисунка, аппроксимация гауссианами позволяет разделить все пять сортов воды, отщепляющихся от сульфата меди, не смотря на то, что первая со второй и третья с четвёртой молекулы считаются одинаково связанными с $CuSO_4$, и должны отщепляться одновременно [5].



G1…G5 – кривые Гаусса, Exp – экспериментальная кривая ДТА, Sum – сумма гауссианов

Рис. 1. Аппроксимация экспериментальной кривой ДТА дегидратации сульфата меди ($CuSO_4 \cdot 5H_2O$) функциями Гаусса

Разница между площадями под экспериментальной кривой и кривой, полученной суммированием гауссианов, составила (не более): для сульфата меди – 0,47 %, сульфата кобальта – 1,3 %,

гидроксида алюминия – 0,14 %. При помощи данной методики обработали более сотни кривых ДТА оксигидратов циркония, иттрия и лантана. Разница между площадями экспериментальной и расчётной кривых ДТА не превысила 1,5 %.

Оксигидраты тяжёлых металлов имеют сложное полимерное строение, поэтому их брутто-состав не совпадает с количеством стадий термолиза, определённым методом аппроксимации.

Оксигидрат циркония (брутто-состав $ZrO_2 \cdot kH_2O$) в воздушно-сухом виде имеет количество брутто-воды k от 2,87 до 5,50 в зависимости от способа получения [2]. На кривой ДТА, полученной на самописце дериватографа, наблюдается один широкий эндоэффект, лежащий в интервале температур от 80 до 220 °С. По таким данным нельзя определить эндоэффекты дегидратации не только концевых ОН-групп, но даже мостиковых ол-групп, которые обычно в других оксигидратных материалах образуют чётко выраженный минимум. При исследовании оксигидрата циркония самописец после первого эндоэффекта вычерчивает небольшой прогиб, который нельзя назвать достоверным свидетельством наличия второго эндоэффекта.

Обработка цифровых данных, полученных с дериватографа, позволяет утверждать, что второй эндоэффект существует и, также как для других оксигидратов, изменяет свою площадь, положение максимума и другие характеристики при старении гелей или варьировании условий синтеза [2]. На рис. 2 показаны кривые ДТА оксигидратов циркония, полученных при разных условиях облучения ультрафиолетом, а в увеличенном масштабе (на рис. 2б) – второй эндоэффект для тех же образцов. Как видно из рисунка, второй эндоэффект не просто существует, но имеет различный профиль для разных доз облучения.

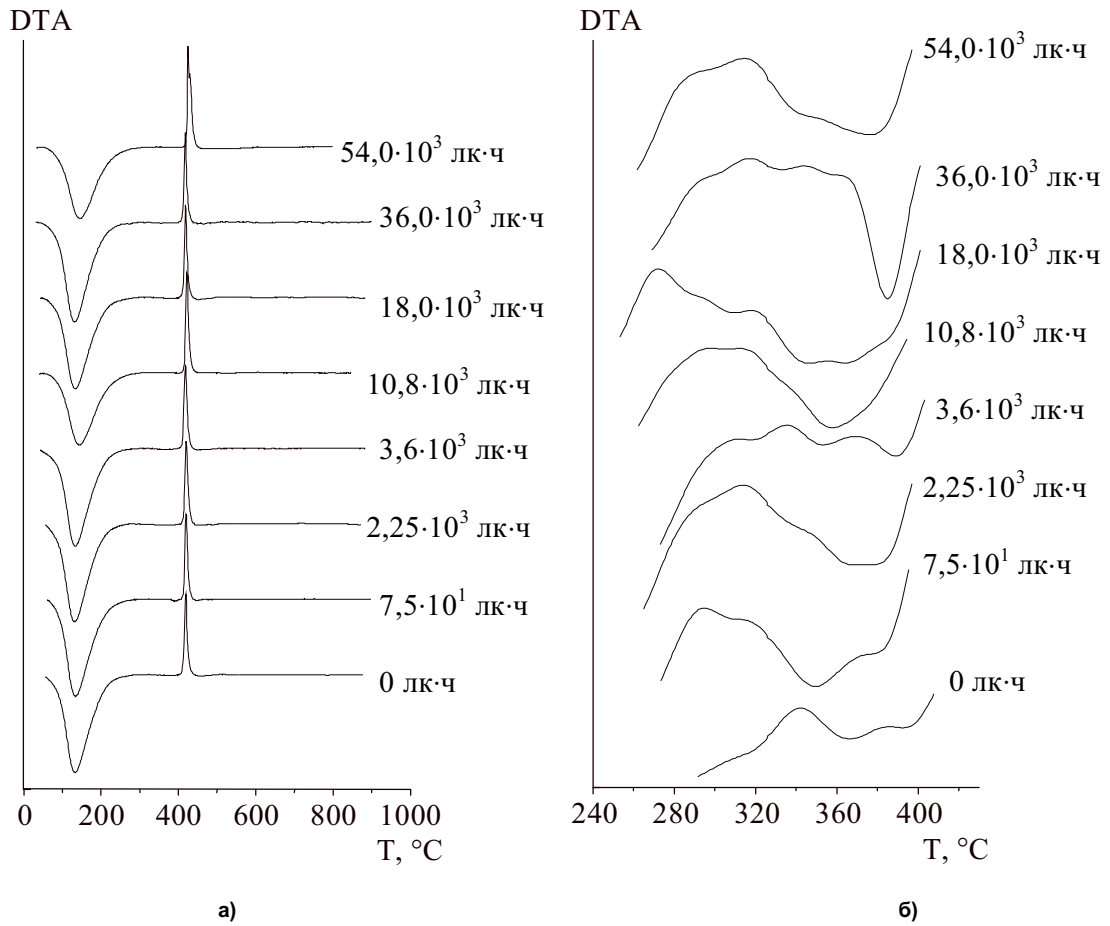


Рис. 2. Изменение профиля кривых ДТА (а) и второго эндоэффекта (б) при возрастании дозы облучения ультрафиолетом

Количество стадий дегидратации, обнаруженной аппроксимацией экспериментальных данных, для оксигидрата циркония составляет 8. Эти стадии наблюдаются в следующих температур-

ных интервалах: 85…95, 126…138, 153…166, 214…234, 318…322, 351…358, 377…392, 405…410 °С. Для кристаллизации обнаружено четыре стадии в следующих температурных интервалах: 411…423, 419…421, 422…431, 432…442 °С. По мнению авторов работы [6], стадии экзотермических превращений соответствуют: образованию зародышей кристаллов в аморфной массе оксида циркония (9 стадия), кристаллизации упорядоченных областей (10 стадия), кристаллизации неупорядоченных участков (11 стадия), релаксационным процессам в кристаллах (12 стадия).

На кривых ДТА оксигидрата иттрия наблюдается три этапа термического разложения. Все этапы термолиза соответствуют дегидратации. На первом этапе происходит удаление поровой, адсорбированной воды и аква-групп, на втором этапе – воды, образующейся при термодеструкции ОН-групп, на третьем этапе – воды, образующейся при температурной оксоляции ол-групп. Всего для оксигидрата иттрия выделено 14 стадий термолиза. Температурные интервалы, соответствующие разным стадиям, следующие (номера этапов термолиза указаны римскими цифрами, номера стадий – арабскими цифрами): I.1 – 102…106, I.2 – 139…146, I.3 – 187…194, I.4 – 225…233, II.5 – 295…320, II.6 – 325…335, II.7 – 337…356, II.8 – 358…367, II.9 – 412…455, II.10 – 460…500, III.11 – 524…530, III.12 – 532…542, III.13 – 547…570, III.14 – 603…638 °С.

Для оксигидрата лантана наблюдается четыре эндоэффекта, все соответствуют дегидратации. Первые три этапа аналогичны этапам оксигидратам иттрия, четвёртый, вероятно, соответствует оксоляции ол-групп, расположенных внутри каркасных структур, образованных оксо-связями между различными звеньями полимерной цепи оксигидрата. Кривая ДТА оксигидрата лантана аппроксимирована наибольшим количеством стадий дегидратации – 18. Стадии дегидратации наблюдаются в следующих температурных интервалах (нумерация – аналогично оксигидрату иттрия): I.1 – 98…102, I.2 – 128…136, I.3 – 155…165, I.4 – 215…225, II.5 – 312…318, II.6 – 331…339, II.7 – 340…350, II.8 – 353…358, II.9 – 371…378, II.10 – 385…392, II.11 – 440…460, III.12 – 511…519, III.13 – 558…562, III.14 – 581…589, III.15 – 605…615, IV.16 – 722…728, IV.17 – 781…787, IV.18 – 822…833°°С.

Таким образом, аппроксимация экспериментальных данных кривыми Гаусса позволяет различать сорта воды, входящей в состав разных структурных образований неорганических материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Челябинской области (грант № 04-03-96050).

Литература

1. Вода в дисперсных системах / Б.В. Дерягин, Н.В. Чураев, Ф.Д. Овчаренко и др. – М.: Химия, 1989. – 288 с.

2. Направления структурообразования оксигидратных гелей циркония и редкоземельных элементов / Ю.И. Сухарев, В.В. Авдин, А.А. Лымарь и др. // Журнал структурной химии. – 2006. – Т. 47. – № 1. – С. 146–151.

3. Лепп Я.Н. Периодический характер и воспроизводимость морфологических и сорбционных характеристик оксигидратов иттрия и гадолиния: дис. ... канд. хим. наук. – Челябинск: ЮУрГУ, 1998. – 230 с.

4. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. – М.: Наука, 1988. – 552 с.

5. Некрасов Б.В. Основы общей химии. – М.: Химия, 1973. – Т. 2. – 688 с.

6. Сухарев Ю.И., Антоненко И.В. Термические превращения структурированных гелей оксигидрата циркония // Известия Челябинского научного центра УрО РАН. – 2002. – № 4. – С. 131–136.

Поступила в редакцию 25 октября 2006 г.

УДК 540.145

КИНЕТИКА ОБРАЗОВАНИЯ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ В СИСТЕМЕ TiO_2 (рутил) – Cr_2O_3

Е.А. Белая, В.В. Викторов

Рентгеновский и электронномикроскопический анализ применен для исследования фазообразования и кинетики взаимодействия в системе TiO_2 – Cr_2O_3. Показано, что фазовый состав механических смесей из оксидов титана и хрома с содержанием хрома до 10 мас.% определяется временем и температурой термообработки. Уточнены границы растворимости Cr_2O_3 в TiO_2, установлены кинетические параметры образования твердых растворов на основе рутила.

Единственной термодинамически равновесной фазой системы TiO_2 – Cr_2O_3 с содержанием TiO_2 более 90 мас.% является твердый раствор Cr_2O_3, в TiO_2, представляющих интерес для технологии получения полупроводниковой керамики, огнеупорных изделий, а также как составная часть многокомпонентных систем. В системе TiO_2 – Cr_2O_3 с содержанием TiO_2 менее 90 мас.% образуются ряд соединений типа фаз Магнели состава $Cr_2Ti_{n-2}O_{2n-1}$. Оксид хрома образует в рутиле твердые растворы до содержания 6,5–7,4 мас.% Cr_2O_3 [1]. Однако, кинетика образования твердых растворов и механизм растворения неизоморфных оксидов в различных степенях окисления катионов, таких как Cr_2O_3 и TiO_2 изучен не достаточно, что затрудняет построение конкретной физико-химической модели образования твердых растворов в подобных системах.

Цель данной работы – изучение кинетики и механизма образования твердых растворов в системе TiO_2 – Cr_2O_3.

Экспериментальная часть

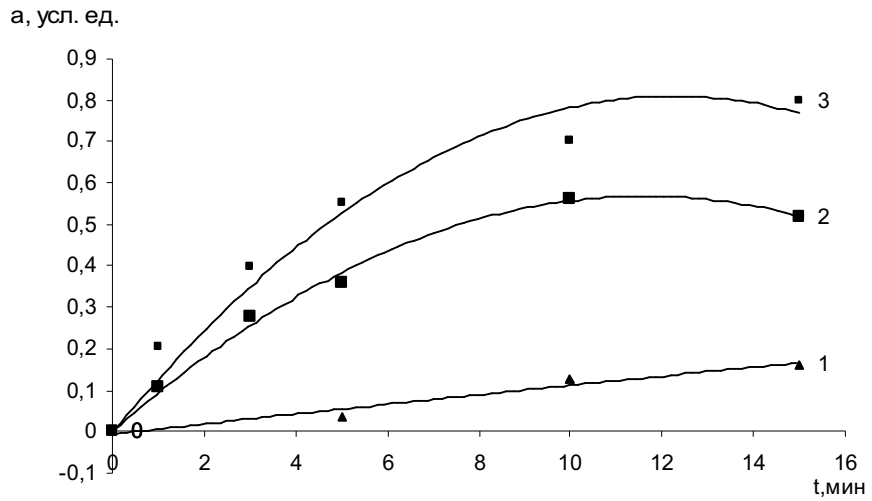
Исходные механические смеси получали путем тщательного смешения оксидов титана(IV) и хрома(III) квалификации «х.ч.» в агатовой ступке до получения порошков однородного цвета. Оксид титана (IV) (непигментный) рутильной модификации получали прокаливанием гидролизного оксида титана (ГДТ) при 1200 °С в течении 2-х часов. Технология получения непигментного оксида титана (IV) достаточно подробно изложена в [2–4]. Количественный и качественный фазовый анализ образцов проводили на дифрактометре ДРОН-3М с K_α-излучением кобальта. Параметры решетки рассчитывали методом наименьших квадратов. Точность определения межплоскостных расстояний не превышала $2 \cdot 10^{-3}$ Å. Электронно-микроскопические исследования образцов до и после прокаливания проводили на электронном микроскопе ПЭМ-100 по стандартным методикам.

Смеси оксидов, с содержанием Cr_2O_3 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 и 10 мас.% прокаливали в интервале температур 850–1200 °С в течении 1 часа. Кинетику твердофазного взаимодействия исследовали в изотермических условиях при 850, 900, 950, 1000, 1200 °С на образце состава 95 мас.% TiO_2 и 5 мас.% Cr_2O_3. Колебания температуры в печи в зоне реакции не превышали 10 °С. Количественный рентгеновский фазовый анализ проводили методом внутреннего эталона. Ошибка при определении степени превращения продуктов твердофазных реакций не превышала ±5 %.

Обсуждение результатов

Смеси с содержанием Cr_2O_3 до 6 мас.% включительно, представлены только твердыми растворами оксида хрома(III) в оксиде титана(IV), которые образуются за 5 мин при 1200 °С, что согласуется с литературными данными [1, 5]. Исходные механические смеси имеют характерный светло-зеленый цвет, тогда как все прокаленные – темно-коричневые. Смеси с содержанием Cr_2O_3 более 7 мас.% представляют собой фазы Магнели. Параметры решетки твердого раствора состава 95 мас.% TiO_2 и 5 мас.% Cr_2O_3 совпадают с параметрами решетки рутила, что связано по-видимому, с близостью ионных радиусов Ti^{4+} и Cr^{3+} (по Белову–Бокию).

Электронно-микроскопические исследования показали, что в исходных механических смесях частицы TiO_2 и Cr_2O_3 определяются своей морфологией и микродифракцией. После нагревания



Кинетические кривые зависимости степени превращения от времени:
1 – 850 °С; 2 – 900 °С; 3 – 1000 °С

частицы Cr_2O_3 по морфологическим признакам и микродифракцией электронов не обнаруживаются, что указывает на образование твердого раствора на основе рутила. Отсутствие заметного смещения дифракционных колец после прохождения твердофазной реакции может быть связанно с тем, что дифракция электронов характеризуется очень малым углом. Поэтому основное внимание уделялось рентгеноструктурному анализу.

На рисунке представлены кинетические кривые зависимости степени превращения от времени. Значения констант скорости k, степени превращения α и коэффициенты корреляции R сведены в таблице.

Линеаризацию экспериментально наблюдаемых зависимостей степени превращения α от времени изотермической выдержки τ при температурах 850, 900, 950 и 1000 °С в системе TiO_2 – Cr_2O_3, с оксидом титана (IV) рутильной модификации, проводили по уравнениям вида:

$$I(\alpha)=k\tau,$$

$$I(\alpha)=k \ln \tau,$$

где a – степень превращения, τ – время изотермической выдержки

Время выдержки отсчитывали с момента введения образца в зону реакции. Проверку на адекватность описания экспериментально наблюдаемых кинетических зависимостей проводили по величине коэффициента корреляции R. При анализе экспериментальных результатов использовали следующие кинетические уравнения:

1) уравнения, полученные на основании диффузионных моделей, лимитирующей стадии которых является объемная диффузия одного из компонентов (титана или хрома) через слой образующегося твердого раствора: уравнения Яндера $I_1=(1–(1–\alpha)^{1/3})^2 = k\tau$, уравнение Гистлинга $I_2=1–2\alpha/3–(1–\alpha)^{2/3} = k\tau$, уравнение Журавлева $I_3 = ((1+\alpha)^{1/3}–1)^2 = k\tau$, уравнение анти-Гистлинга $I_4 = 1+2\ \alpha/3–(1+\alpha)^{2/3} = k\tau$;

2) уравнения реакций, лимитируемые поверхностными процессами на границе раздела фаз для цилиндрических частиц $I_5 =1–(1–\alpha)^{1/2} = k\tau$;

3) уравнения, полученные на основании диффузионных моделей, лимитируемые объемной диффузией компонентов, находящихся в активном состоянии с высокой концентрацией неравноместных дефектов. В этом случае кроме уравнения Таммана $I_6 = 1–(1–\alpha)^{1/3} = k \ln \tau$, использовали уравнения I_7, I_8 отличающиеся от соответствующих I_2, I_1 только правой частью $I = k \ln \tau$ [6].

Для набора данных при расчете среднестатистических величин зависимости α от времени изотермической выдержки τ воспроизводили не менее 3 раз для каждой смеси.

Статистическая обработка кинетических данных показала, что коэффициент корреляции при аппроксимации экспериментально наблюдаемых кинетических зависимостей α от времени изотермической выдержки τ уравнениями $I(\alpha)$ существенно различен (см. таблицу). Наибольший ко-

эффициент корреляции соответствует уравнению Яндера, поэтому можно предположить, что в системе протекает односторонняя диффузия ионов хрома через слой образующегося твердого раствора.

Кажущаяся энергия активации образования твердого раствора, найденная из кинетических данных, составила 91±5 кДж/моль, что совпадает с найденной ранее энергией активации в системе Al_2O_3–Cr_2O_3 , при односторонней диффузии ионов хрома, с образованием твердого раствора [7, 8]. Найденная величина значительно ниже энергии активации самодиффузии катионов Cr^{3+} в α-Cr_2O_3 (419 кДж/моль). Таким образом, проведенные кинетические исследования и их математическая обработка позволяют сделать вывод, что по всей вероятности, при нагревании смесей рутила и оксида хрома (III) происходит диффузия ионов хрома с поверхности в объем кристалликов рутила.

Значения констант скорости, степени превращения реакции взаимодействия оксидов Cr_2O_3 и TiO_2 с массовым соотношением 5 и 95 % соответственно

τ, мин	α	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8
Смесь, прокаленная при 850 °С									
5	0,0369	0,0002	0,0002	0,2300	0,0494	0,0186	0,0125	0,0002	0,0002
10	0,1292	0,0020	0,0019	0,3458	0,1743	0,0669	0,0451	0,0019	0,0020
15	0,1600	0,0032	0,0031	0,3702	0,2164	0,0834	0,0565	0,0031	0,0032
30	0,1754	0,0039	0,0037	0,3811	0,2376	0,0919	0,0623	0,0037	0,0039
k		0,0001	0,0001	0,0172	0,0099	0,0038	0,0194	0,0011	0,0011
R		0,9298	0,9283	0,7633	0,8794	0,8815	0,8931	0,9095	0,9104
Смесь, прокаленная при 900 °С									
1	0,1711	0,0037	0,0035	0,3781	0,2317	0,8959	0,0607	0,0035	0,0036
3	0,2665	0,0096	0,009	0,4343	0,3643	0,1435	0,0982	0,0090	0,0096
5	0,4621	0,0349	0,0305	0,513	0,6467	0,2665	0,1867	0,0305	0,0348
10	0,5257	0,0485	0,0413	0,5328	0,7422	0,3112	0,2201	0,0413	0,0484
k		0,0051	0,0044	0,0709	0,0887	0,0368	0,1006	0,0169	0,0196
R		0,9638	0,9618	0,7311	0,9237	0,9322	0,9306	0,9472	0,9508
Смесь, прокаленная при 950 °С									
1	0,2692	0,0098	0,0092	0,4356	0,3682	0,1451	0,0992	0,0092	0,0098
3	0,2774	0,0105	0,0098	0,4397	0,3797	0,1499	0,1027	0,0098	0,0105
5	0,3590	0,0189	0,0172	0,4757	0,4958	0,1994	0,1377	0,0172	0,0189
10	0,5627	0,0581	0,0488	0,5434	0,7991	0,3387	0,2409	0,0487	0,0581
k		0,0053	0,0045	0,0709	0,0887	0,0369	0,0977	0,0165	0,0193
R		0,9685	0,9724	0,6911	0,9265	0,9403	0,8408	0,8143	0,8086
Смесь, прокаленная при 1000 °С									
1	0,36	0,0191	0,0173	0,0116	0,0125	0,2000	0,1382	0,0173	0,0191
3	0,40	0,0245	0,0219	0,0141	0,0152	0,2254	0,1565	0,0219	0,0245
5	0,55	0,0546	0,0461	0,0247	0,0273	0,3292	0,2336	0,0461	0,0546
10	0,70	0,1092	0,0851	0,0374	0,0422	0,4522	0,3305	0,0851	0,1092
15	0,80	0,1723	0,1246	0,0468	0,0536	0,5527	0,4152	0,1246	0,1723
k		0,0112	0,0084	0,0035	0,0039	0,0426	0,1481	0,0385	0,0507
R		0,9960	0,9962	0,9751	0,9793	0,9435	0,9347	0,9119	0,8974

Выводы

1. Исследовано образование твердых растворов в системе TiO_2 (рутил) – Cr_2O_3. Уточнена граница растворимости Cr_2O_3 в рутиле, которая составляет порядка 6 мас.%.

2. Показано, что кинетика образования твердых растворов описывается уравнением Яндера, которое предполагает одностороннюю диффузию ионов хрома с поверхности через слой образующегося твердого раствора в объем кристалликов TiO_2.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Губернатора Челябинской области Ур.Чел. №04-03-960-72.

Литература

1. Бережной А.С. Многокомпонентные системы окислов. – Киев: Наукова думка, 1970. – С. 141–143.

2. Беленький Е.Ф., Рискин И.В. Химия и технология пигментов. – Л.: Химия, 1974. – 656 с.

3. Хазин Л.Г. Двуокись титана. – Л.: Химия, 1970. – 176 с.

4. Горощенко Я.Г. Химия титана. – Киев: Наукова думка, 1970. – 415 с.

5. Gibb R.M., Anderson J.S. The system TiO_2 – Cr_2O_3: Electron Microscopy of Solid Solutions and Cristallographic Shear Structures // Journal of Solid State Chemistry. – 1972. – V. 4. – № 3. – P. 379–390.

6. Третьяков Ю. Д. Твердофазные реакции. – М.: Химия, 1978. – С. 164–183.

7. Викторов В.В., Евдокимов И.В., Ковель М.С. Кинетика образования твердых растворов в системе Al_2O_3-Cr_2O_3 // Журнал физической химии. – 1990. – Т. 64. – № 7. – С. 1820–1824.

8. Особенности образования твердых растворов $(Cr_x\ Al_{1-x})_2O_3$ при совместном прокаливании гидроксидов Al и Cr / Н.С. Ковель, В.В. Викторов, И.В. Евдокимов, А.А. Фотиев // Изв. АН СССР. Неорганические материалы. – 1989. – Т. 25. – № 7. – С. 1160–1164.

Поступила в редакцию 27 сентября 2006 г.

УДК 540.145

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ФАЗООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМЕ TiO_2 (АНАТАЗ) – Cr_2O_3

Е.А. Белая, В.В. Викторов

Рентгеновский и электронномикроскопический анализ применен для исследования взаимодействия и фазообразования в системе TiO_2 (анатаз) – Cr_2O_3. Показано, что Cr_2O_3 существенно понижает температуру фазового перехода анатаза в рутил. Установлено, что твердый раствор Cr_2O_3 в TiO_2 образуется только при переходе анатазной модификации в рутильную.

Известно, что фазовый переход анатазной в рутильную модификацию оксида титана (IV) в начинается с 600 °С и заканчивается при 900 °С [1]. Однако этот температурный интервал может существенно меняться в зависимости от способа приготовления оксида титана (IV). Установлено [2–4], что введение в состав гидратированного оксида титана (IV) небольших количеств некоторых соединений, значительно снижает температуру перекристаллизации фазового перехода. Скорость превращения анатаза в рутил определяется диффузионной подвижностью ионов в кристаллической решетке анатаза, при этом атомы добавок влияют на процесс полиморфного превращения в такой степени, в какой они изменяют условия диффузии. Если добавки стимулируют образование кислородных вакансий, они являются рутилирующими, появление ионов в междоузлии приводит к стабилизации анатаза, а значит к увеличению температуры фазового перехода [5]. Однако, литературные данные о влиянии добавок, таких как Cr_2O_3, вводимых непосредственно к анатазной модификации, на изменение температуры фазового перехода практически отсутствуют.

В системе TiO_2–Cr_2O_3 помимо фаз Магнели существует твердый раствор Cr_2O_3 в TiO_2 с содержанием TiO_2 более 90 мас.%. Оксид хрома образует в рутиле твердые растворы до содержания 6,5–7,4 мас.% Cr_2O_3 [6].Однако, кинетика массопереноса в системе TiO_2–Cr_2O_3, как и механизм растворения неизоморфных оксидов в различных степенях окисления катионов, таких как Cr_2O_3 и TiO_2 изучен недостаточно, что затрудняет построение конкретной физико- химической модели взаимодействия в подобных системах. Отметим что, исследования по образованию твердых растворов в системе TiO_2–Cr_2O_3 проводились только с использованием оксида титана(IV) рутильной модификации [7, 8]. Поэтому представляет интерес изучение образования твердых растворов в системе TiO_2 (анатаз) – Cr_2O_3.

Цель данной работы – изучение влияния Cr_2O_3 на фазовый переход анатаза в рутил.

Экспериментальная часть

Исходные механические смеси готовили путем тщательного смешения оксидов титана(IV) и хрома(III) квалификации «х.ч.» в агатовой ступке до получения порошков однородного цвета. Оксид титана (IV) анатазной модификации получали прокаливанием гидролизного диоксида титана (ГДТ) при 600 °С в течении 2-х часов. В свою очередь ГДТ получали по способу, детально описанному в [1], путем термического гидролиза растворов сульфатных соединений Ti (IV). Гидролиз проводили в присутствии анатазных зародышей, которые согласно [1] являются центрами образования первичных частиц ГДТ в процессе его гидролиза. Полученные смеси прокаливали в фарфоровых тиглях в интервале 850–1000 °С в течении 1 часа, которые исследовали рентгенографически. Количественный и качественный фазовый анализ образцов проводили на дифрактрометре ДРОН-3М с K_α-излучением кобальта. Параметры решетки рассчитывали методом наименьших квадратов. Точность определения межплоскостных расстояний не превышала $2–10^{-3}$ Å. Электронно-микроскопические исследования образцов до и после прокаливания проводили на электронном микроскопе ПЭМ-100 по стандартным методикам.

Смеси оксидов, с содержанием Cr_2O_3 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 и 10 мас.% прокаливали в интервале температур 850–1000 °С в течении 1–2 часов. Кинетику твердофазного взаимодействия исследовали в изотермических условиях при 850, 900, 1000 °С на образце состава 95 мас.% TiO_2 и

5 мас.% Cr_2O_3. Колебания температуры в печи в зоне реакции не превышали 10 °С. Количественный фазовый рентгеновский анализ проводили методом внутреннего эталона. Ошибка при определении степени превращения продуктов твердофазных реакций не превышала 5 %. Количественный фотоколориметрический анализ хрома (VI) и хрома (III) проводили по методикам подробно описанным в [9].

Обсуждение результатов

В ходе эксперимента установлено, что Cr_2O_3 не образует твердых растворов с TiO_2 анатазной модификации до тех пор, пока не произойдет полиморфное превращение анатаза в рутил. Рентгеноструктурный и электронномикроскопический анализы показали, что с увеличением температуры и времени выдержки постепенно растут кристаллики анатаза, и при появлении рутильной фазы начинается интенсивное растворение оксида хрома в рутиле. Полученные экспериментальные данные представлены в таблице и на рис. 1, 2. Отметим, что механизм взаимодействия TiO_2 анатазной и рутильной модификации с оксидом хрома (III) существенно различны. При совместном прокаливании анатаза с Cr_2O_3 на воздухе наблюдается интенсивное окисление последнего с образованием соединений с Cr^{6+}. При прокаливании исходной смеси в атмосфере аргона окисления оксида хрома (III) не происходит. При этом количество Cr^{6+} определяется временем и температурой изотермической выдержки. Наиболее интенсивное окисление происходит при 850 °С в течении 50–60 минут (рис. 3). Дальнейшее увеличение температуры и времени выдержки существенно снижают содержание Cr^{6+}. Следует отметить, что при взаимодействии TiO_2 рутильной модификации с Cr_2O_3, окисление значительно меньше, чем при взаимодействии анатаза с оксидом хрома (III). Подобное окисление оксида хрома (III) ранее наблюдали при совместном прокаливании Cr_2O_3 с γ-Al_2O_3 и связывали с наличием ОН-групп на поверхности оксида алюминия [10]. Отметим, что анатаз на своей поверхности содержит значительное количество воды [11]. В присутствии Cr_2O_3 временной интервал фазового перехода существенно снижается, для образцов прокаленных при 1000 °С на 5 мин, при 900 °С на 20 мин, прокаленных при 850 °С – более чем на 30 мин. Данный факт свидетельствует о том, что оксид хрома является рутилирующей добавкой, стимулирующей образование кислородных вакансий.

Окисление оксида хрома (VI) в системе TiO_2 (анатаз) – Cr_2O_3

Образец	Cr^{6+}/Cr общ, %								
τ, мин	1	3	5	10	15	20	30	45	60
850 °С	0,09	0,14	0,31	0,43	0,94	1,22	1,75	2,0	2,5
900 °С	0,12	0,34	1,82	2,0	1,34	1,21	1,18	1,21	1,0
1000 °С	0,09	0,22	0,31	2,0	1,91	1,35	1,26	1,18	1,11

Электронно-микроскопические исследования показали, что в исходных механических смесях частицы TiO_2 и Cr_2O_3 определяются своей морфологией и микродифракцией. После нагревания частицы Cr_2O_3 по морфологическим признакам и микродифракцией электронов не обнаруживаются. Это позволяет считать, что образуется твердый раствор на основе рутила. Отсутствие заметного смещения дифракционных колец после прохождения твердофазной реакции может быть связанно с тем, что дифракция электронов характеризуется очень малым углом.

Таким образом, полученные экспериментальные данные позволяют предположить следующую модель массопереноса в дисперсной системе TiO_2 – Cr_2O_3. При нагревании до температуры фазового перехода анатаза в рутил происходит интенсивное окисление Cr_2O_3 с образованием метастабильных соединений с Cr^{6+}, которые, по-видимому, в дальнейшем играют значительную роль в образовании твердого раствора оксида хрома (III) в рутиле. Массоперенос при взаимодействии оксидов облегчается за счет образующийся жидкой фазы метастабильных соединений с Cr^{6+}.

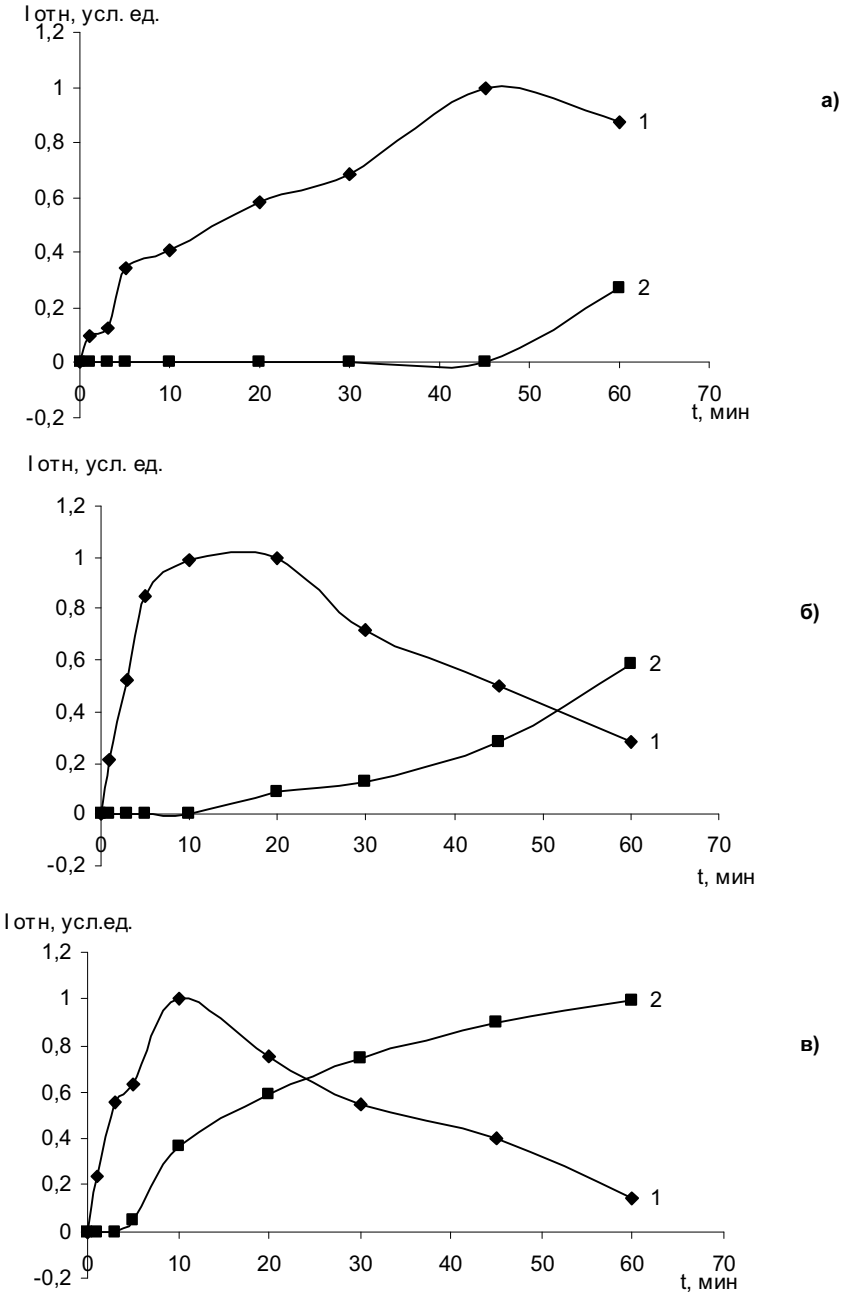


Рис. 1. Фазовый переход анатаза в рутил без добавок Cr_2O_3 при различных температурах изотермической выдержки:
а) 850 °С; б) 900 °С; в) 1000 °С.
1 **– интегральной интенсивности анатаза;**
2 **– интегральной интенсивности рутила**

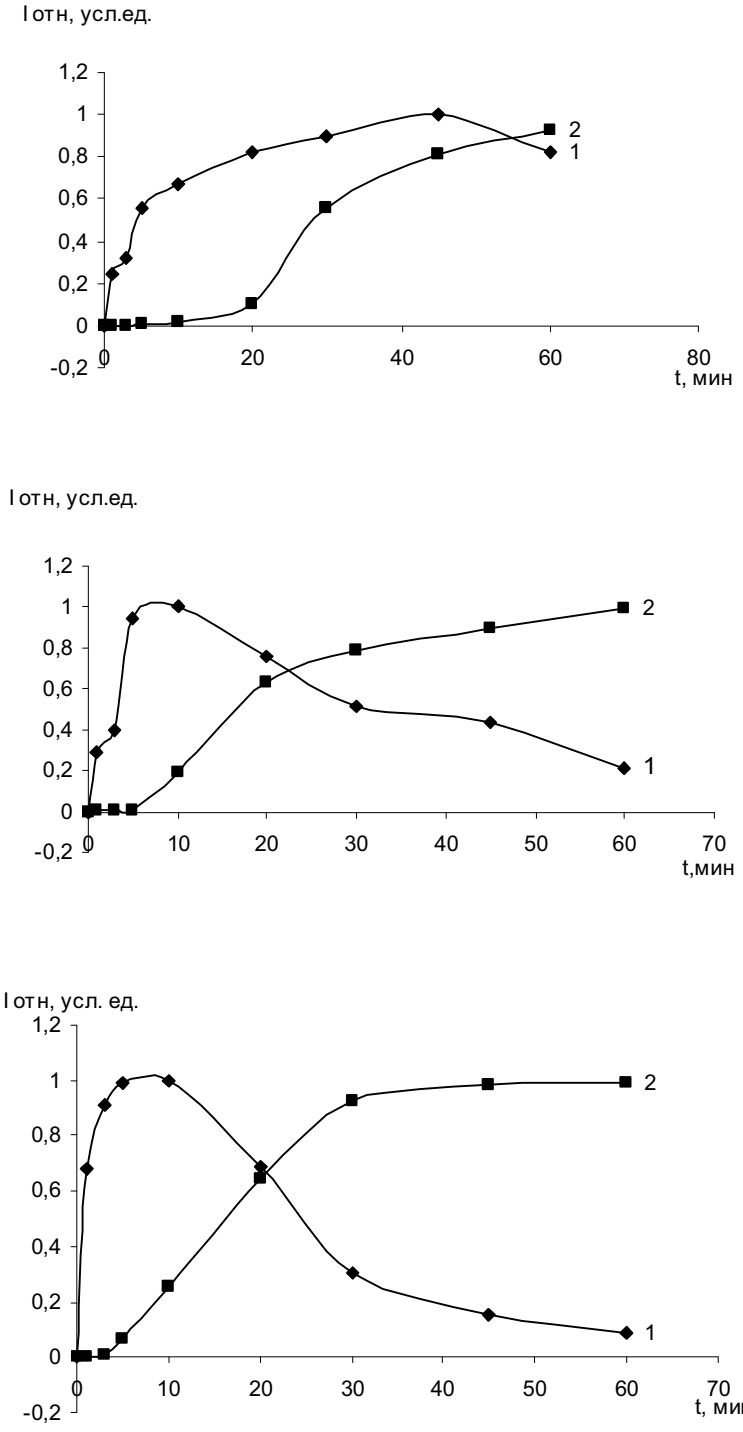


Рис. 2. Фазовый переход анатаза в рутил с добавками Cr_2O_3 при разных температурах изотермической выдержки :
а) 850 °С; б) 900 °С; в) 1000 °С.
***1* – интегральной интенсивности анатаза;**
***2* – интегральной интенсивности рутила**

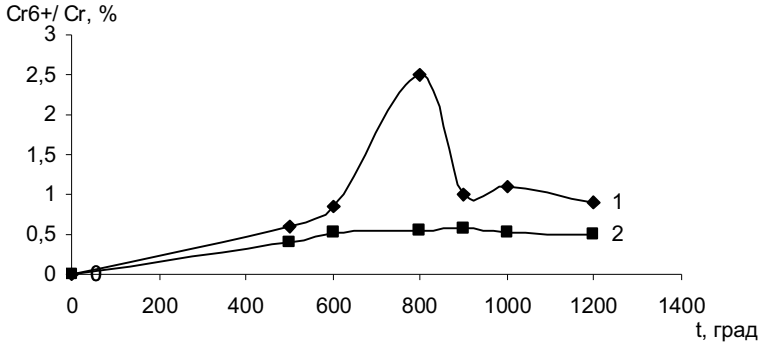


Рис. 3. Содержание Cr^{6+}/ Cr общ в образцах прокаленных при изотермической выдержке в течение 1 часа, %: 1 – анатаз; 2 – рутил

Выводы

1. Исследован фазовый переход анатаза в рутил в присутствии Cr_2O_3. Установлено, что добавки оксида хрома (III) существенно снижают температуру перекристаллизации и временной интервал фазового перехода.

2. Взаимодействие анатазной и рутильной модификации TiO_2 с Cr_2O_3 различно. При взаимодействии Cr_2O_3 с анатазом наблюдается интенсивное окисление Cr^{3+} с образованием метастабильных соединений с Cr^{6+}. Максимальное количество этих соединений наблюдается при 850 °С при изотермическом прокаливании в течении 50–60 минут. Окисление оксида хрома (III) в присутствии рутила незначительно и отличается более чем на три порядка.

3. Твердый раствор Cr_2O_3 в TiO_2 образуется только на основе рутильной модификации. При этом при образовании твердого раствора резко снижается содержание метастабильных соединений с Cr^{6+}.

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Челябинской области, проект №29 /М06/А.

Литература

1. Беленький Е.Ф., Рискин И.В. Химия и технология пигментов. – Л.: Химия, 1974. – 656 с.

2. Лучинский Г.П. Химия титана. – М.: Химия, 1971. – 470 с.

3. Хазин Л.Г. Двуокись титана. – Л.: Химия, 1970. – 176 с.

4. Горощенко Я.Г. Химия титана. – Киев: Наукова думка, 1970. – 415 с.

5. Shanon R.D., Rask G.A. Kinetiks of the anataz-rutile transformation // J. Amer. Ceram. Soc. – 1965. – V. 48. – № 8. – P. 391–397.

6. Бережной А.С. Многокомпонентные системы окислов. – Киев: Наукова думка, 1970. – С. 141–143.

7. Camara O.R. Electrochemical response of titanium and chromium mixed oxides on titanium substrates // J. of Electroanalytical Chemistry. – 1990. – V. 248. – № 1. – P. 155–172.

8. Metiko-Hukovi M., Ceraj-Ceri M. Investigations of chromium doped ceramic rutile electrodes // Materials Research Bulletin. – 1988. – V. 23. – № 11. – P. 1535–1544.

9. Золотов Ю.А. Основы аналитической химии. – М.: Высшая школа, 1999. – 351 с.

10. Ковель Н.С., Викторов В.В., Евдокимов И.В., Фотиев А.А. Особенности образования твердых растворов $(Cr_x\ Al_{1-x})_2O_3$ при совместном прокаливании гидроксидов Al и Cr // Изв. АН СССР. Неорганические материалы. – 1989. – Т. 25. – № 7. – С. 1160–1164.

11. Моррисон С. Химическая физика поверхности твердого тела. – М.: Мир, 1980. – 488 с.

Поступила в редакцию 27 сентября 2006 г.

УДК 504.064.3

ЯМР-СПЕКТРОСКОПИЯ КАЧЕСТВА ВОДЫ ПРИ МНОГОМЕРНОМ ГЕОЭКОЛОГИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ ПРИРОДНО-ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

С.В. Гаврилов, Б.И. Сарапульцев, В.А. Бочарников

Представлены оригинальные результаты исследования качества воды с применением ЯМР-спектроскопии и методов многомерного анализа унифицированных параметров природно-технических систем на примере контрастных по геоэкологическому статусу озер Южного Урала.

Техногенный фактор в формировании химического состава и биологического разнообразия водных экосистем становится по значимости в один ряд с природными геохимическими и биологическими процессами. Кроме того, не вызывает сомнения, что адекватное решение подобной задачи возможно только на основе анализа массива геоэкологических данных по максимально доступному количеству унифицированных параметров тестируемых водных экосистем с применением методов многомерной статистики и метода ЯМР-релаксации воды природных водоемов [3–5].

По данным работы [1] определены принятые в геоэкологии [2] классы качества воды в природно-технических системах (ПТС) (табл. 1).

Таблица 1

Классы качества воды и химические параметры ПТС

Водные объекты	O_2, мг/л	$БПК_5$, мгO_2/л	NH_4, мг/л
Оз. Смолино	4* (7,96)	2 (1,78)	3 (0,31)
Оз. Первое	4 (7,86)	3 (2,58)	3 (0,19)
Вдхр. Шершни	3 (9,50)	3 (2,47)	4 (0,44)
Оз. Тургояк	1 (12,18)	2 (1,28)	3 (0,13)
Оз. Миассово	1 (13,71)	2 (1,19)	2 (0,27)
Оз. Увильды	1 (12,08)	1 (0,85)	2 (0,18)

* 1 – очень чистые; 2 – чистые; 3 – умеренно загрязненные; 4 – грязные.

Из табл. 1 видно, что согласно классификации качества воды озера Смолино и Первое следует отнести к водоемам с низким уровнем геоэкологического состояния и умеренным уровнем загрязнения, в отличие от озер Увильды, Б. Миассово и Тургояк с высоким геоэкологическим статусом и относящихся к классу «чистые». Вдхр. Шершни занимает промежуточное положение.

При анализе независимой выборки экологических данных об озерах Южного Урала мы столкнулись с проблемой отсутствия в официальной отчетной документации (Рабочих документах Госкомгидромета) прецизионных методов экспресс-анализа биоорганических соединений в водных экосистемах (например, определение $БПК_{5–20}$ требует от 5 до 20 суток). Наиболее перспективным направлением исследования оказался использованный нами метод ЯМР-спектроскопии образцов воды ПТС, в частности метод ЯМР-релаксации.

Время релаксации T_1 позволяет определить, какие изменения произошли с пробой, или чем отличается одна проба от другой. Так, химически чистая вода имеет время релаксации 1,501 секунды. На показатель времени релаксации влияют все возможные парамагнетики органической природы (органические и биоорганические вещества).

Из табл. 2 видно, что результаты ЯМР-релаксации позволяют достоверно оценить уровень биоорганических соединений в пробах воды каждого из тестируемых ПТС.

Сигнал ЯМР-релаксации достоверно ниже ($p < 0,001$) у озер с высоким геоэкологическим статусом (оз. Увильды, оз. Тургояк, оз. Б Миассово) по сравнению с объектами, загрязненными в результате интенсивного техногенного использования, (оз. Смолино и оз. Первое), а также вдхр. Шершни, являющегося источником питьевой воды г. Челябинска.

Таблица 2

Результаты ЯМР-релаксации проб воды контрастных по геоэкологическому статусу ПТС Южного Урала, с

ПТС водоемов	оз. Смолино	оз. Первое	вдхр. Шершни	Оз. Б.Миассово	Оз. Тургояк	Оз. Увильды
Проба 1	1,917	1,857	1,835	1,697	1,735	1,688
Проба 2	1,987	1,924	1,869	1,850	1,669	1,700
Проба 3	1,968	1,838	1,840	1,640	1,635	1,689
Проба 4	1,933	1,876	1,812	1,555	1,702	1,599
Проба 5	1,947	1,864	1,823	1,690	1,700	1,600
Проба 6	1,954	1,874	1,827	1,698	1,705	1,600
Проба 7	1,944	1,870	1,828	1,699	1,699	1,628
Проба 8	1,956	1,875	1,811	1,694	1,698	1,677
Проба 9	1,951	1,874	1,820	1,694	1,702	1,688
Проба10	1,950	1,869	1,818	1,690	1,709	1,701
$\overline{X} \pm m$	1,950±0,006	1,872±0,007	1,828±0,005	1,691±0,022	1,695±0,008	1,690±0,014

Поскольку данные по ЯМР-релаксации биоорганических соединений в ПТС были получены впервые, представляло интерес провести корреляционный анализ между этими параметрами и унифицированными данными, представленными филиалами Госкомгидромета по Челябинской области (табл. 3).

Таблица 3

Корреляционная зависимость между показателями ЯМР-релаксации и унифицированными данными Госкомгидромета

Параметр	Прозр.	pH	O_2	Мин	Cl	SO_4	CO_3	NH_4	NO_3	NO_2	$P_{мин}$	$P_{общ}$
ЯМР	–0,59	0,52	–0,70	0,76	0,68	0,71	0,74	0,38	0,49	–0,1	0,24	0,32

Параметр	СПАВ	Нефт.прод	$БПК_5$	Фитомас	Fe	Cu	Zn	Si	Cr
ЯМР	–0,43	–0,03	0,56	0,76	–0,2	0,18	–0,43	–0,68	–0,48

При анализе табл. 3 четко выделяется отрицательная корреляционная зависимость с концентрацией O_2, а так же положительные корреляционные связи с минерализацией, концентрацией сульфат-ионов, бикарбонатов и биологической фитомассой водоемов. Подобные корреляционные связи однозначно свидетельствуют об адекватности метода ЯМР-релаксации для оценки геоэкологического статуса озер.

ЯМР-спектроскопия позволяет оценить содержание биоорганических соединений в природных водоемах, однако метод имеет существенный недостаток, поскольку нуждается в наличии дорогостоящего оборудования и предъявляет исключительно высокие требования к уровню профессиональной подготовленности персонала.

Для объективной оценки контрастных по геоэкологическому статусу ПТС Южного Урала по компьютерной программе «Статистика-6.0» были рассчитаны весовые коэффициенты для каждого тестируемого параметра, позволяющие оптимальным образом разделить контрастные группы водоемов и количественно оценить многомерную дискриминантную функцию в виде:

$$DF(x_i) = k_1x_1 + k_2x_2 + \ldots\ldots k_{14}x_{14},$$

где $k_1, \ldots, k_{14}$ – коэффициенты дискриминантной функции, а $x_1, \ldots, x_{14}$ – экспериментальные значения параметров из табл. 1. Результаты расчетов коэффициентов дискриминантной функции представлены в табл. 4.

Таблица 4

Коэффициенты дискриминантной функции для основных параметров контрастных по геоэкологическому статусу ПТС Южного Урала

Параметры	pH	O_2	NH_4	NO_3	NO_2	P мин	P общ
№ п/п	1	2	3	4	5	6	7
DF(x)	3,068	1,256	–2,565	–3,264	3,942	4,266	–6,341

Параметры	СПАВ	Нефте-прод.	$БПК_5$	Биомасса	Si	Cr	ЯМР
№ п/п	8	9	10	11	12	13	14
DF(x)	–3,923	–6,402	–1,439	–1,436	–3,225	–4,00	1,680

В случае исследованной нами модели контрастных по геоэкологическому статусу ПТС Южного Урала получены следующие значения дискриминантной функции:

1. оз. Первое – $DF(x_i) = 1,15$ (умеренно загрязненное – III класс)
2. оз. Смолино – $DF(x_i) = 1,79$ (умеренно загрязненное – III класс)
3. оз. Тургояк – $DF(x_i) = 11,62$ (чистое – II класс)
4. оз. Б. Миассово – $DF(x_i) = 12,30$ (чистое – II класс)
5. оз. Увильды – $DF(x_i) = 12,81$ (чистое – II класс)

При анализе значений дискриминантной функции видно, что различие между контрастными по геоэкологическому статусу ПТС достигают 10-тикратных величин.

Полученные в настоящей работе результаты многомерного дискриминантного анализа качества воды с использованием ЯМР-спектроскопии биоорганических соединений открывают принципиально новые возможности для качественной и количественной оценки ПТС.

Литература

1. Гаврилов С.В., Сарапульцев Б.И., Бочарников В.А. Многомерная оценка геоэкологического состояния озер с использованием метода спектроскопии ядерного магнитного резонанса // Тр. Третьей Всеросс.научн.-практич. конф. «Безопасность жизнедеятельности в третьем тысячелетии». – Челябинск: Изд-во ЗАО «Челябинская межрайонная типография». – 2006. – С. 239–243.

2. Дмитриев В.В., Фрумин Г.Т. Экологическое нормирование и устойчивость природных систем. – СПб.: Наука. – 2004. – 294 с

3. Гаврилов С.В., Сарапульцев Б.И. Европейский стандарт паспортизации озерных экосистем (Геохимический анализ) // Тр. Второй Всеросс. научно-практич. конф. «Безопасность жизнедеятельности в третьем тысячелетии». – Челябинск: Изд-во ЗАО «Челябинская межрайонная типография». – 2003 – С. 150–154.

4. Гаврилов С.В., Сарапульцев Б.И. Перспективы применения спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в экологических исследованиях // В кн.: Безопасность жизнедеятельности. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ. – С. 177–180.

5. Гаврилов С.В., Сарапульцев Б.И. ЯМР-спектроскопия при мониторинге качества воды озерных экосистем Южного Урала // Экология Риск. Безопасность: Тр. регион. научно-практич. конф., посвященной 10-летию КГУ и 30-летию кафедры «Экология и безопасность жизнедеятельности». – Курган, 2005. – С. 37–38.

Поступила в редакцию 30 сентября 2006 г.

УДК 541.1

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ УСЛОВИЯ НАЧАЛА ФОРМИРОВАНИЯ ШЛАКОВЫХ ОТЛОЖЕНИЙ ПРИ ИХ ФАКЕЛЬНОМ СЖИГАНИИ

В.Е. Гладков, Ж.З. Афлятунов, В.В. Викторов

Представлены результаты физико-химического анализа процессов взаимодействия и фазообразования в минеральной части углей, определяющих агрегатное состояние аэродинамического золового потока несущих дымовых газов с $t \le 1300$ °С. Показано, что температура несущих дымовых газов, при которой формируются шлаковые отложения и условия закрепления (налипания) золовых частиц, связана с температурным интервалом существования жидкой фазы, образующейся при взаимодействии сульфидного и силикатного расплавов.

Температура начала шлакования – основной экспериментально определяемый параметр, используемый для обеспечения бесшлаковочного режима при факельном сжигании углей. В практике за температуру начала шлакования принимают температуру несущих газов аэродинамического золового потока, при которой на неохлаждаемом металлическом зонде формируются шлаковые отложения, валовый химический состав которых соответствует таковому для летучей золы и близок к составу золы исходного угля.

Основываясь на статистической обработке результатов систематического прогнозирования температуры начала шлакования ($t_{ш}$) при факельном сжигании углей с кислым составом золы предложено эмпирическое уравнение [1]:

$$t_{\text{Ш}} = 930 + 11\frac{C_{\sum K}}{C_{\sum K}} (\pm 19\ ^\circ\text{C}), \qquad (1)$$

где $C_{\sum K}$ = %Al_2O_3+%SiO_2+%TiO_2, а $C_{\sum O}$=%CaO+%Na_2O+%K_2O+%MgO. Суммарное содержание кислых ($\sum K$) и основных ($\sum O$) оксидов (мол.%) в валовом составе золы исходного угля, пересчитанного на бессульфатную массу и определяемого из равенства:

$$C_{\sum K} + C_{\sum O} + C_{\text{Fe}_2\text{O}_3} = 100\%. \qquad (2)$$

Из (1) и (2) следует, что содержание Fe_2O_3 в составе золы углей при аппроксимации экспериментальных результатов не учитывали. Такое положение авторы [1] объясняют амфотерностью оксидов железа (Fe_2O_3 – кислый, FeO – основной), а их концентрационное соотношение, определяемое пирометрическим уровнем сжигания, коэффициентом избытка воздуха и исходным составом минеральной части, однозначно не установлено. Однако это не является основанием для исключения роли оксидов железа на температуру начала шлакования и условия формирования шлаковых отложений. Уравнение (1) с учетом (2) сводится к виду:

$$t_{\text{Ø}} = 920 + \frac{11}{\tilde{N}_{\sum O}}(1 - \tilde{N}_{\text{Fe}_2\hat{\text{I}}_3}). \qquad (3)$$

Из соотношения (3) следует, что для золы углей, у которых содержание основных оксидов одинаковое, температура начала шлакования тем меньше, чем больше $C_{\text{Fe}_2\text{O}_3}$. Поскольку среднее содержание оксида железа в составе золы анализируемых в [1] углей составляет величину $C_{\text{Fe}_2\text{O}_3} \sim 0,038$, то её влиянием можно пренебречь и для аппроксимации принять уравнение

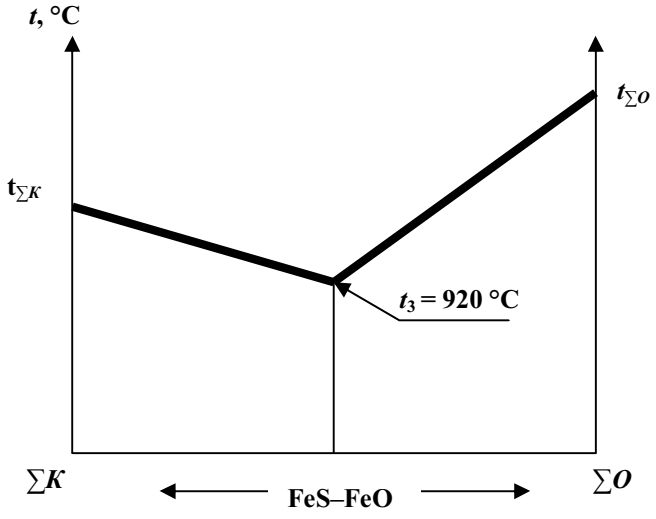
$$t_{\text{Ш}} = 920 + \frac{10,7}{\sum O} (\pm 20\ ^\circ\text{C}), \qquad (4)$$

описывающее экспериментальные результаты с такой же точностью, как и уравнения (1) и (3).

Для специалистов по факельному сжиганию энергетических углей в России и странах СНГ уравнение (1) является фундаментальным для прогнозирования $t_{Ш}$ и шлакующих свойств золы в целом. Однако до настоящего времени анализа физико-химического смысла зависимости $t_{Ш}$ от состава выражаемого через соотношение $C_{\sum K} / C_{\sum O}$ и, в итоге, определяющего агрегатное состояние золовых частиц и условия их закрепления (налипания) в момент формирования отложений, не проводилось. В ряде работ неоднократно отмечено только то, что величина температуры начала шлакования, устанавливаемая в условиях факельного сжигания меньше (на 150–200 °С) температур, определяемых в лабораторных условиях по деформационным характеристикам образцов золы (плавкость по методу пирометрических конусов, спекаемость и др.) [1–3]. Такое несоответствие связано с тем, что температуры сравнения, определяемые по резким изменениям в ходе зависимостей «деформация – температура», регистрируемых при скоростях нагрева менее 0,3 °С/с, отвечают образованию в составе образцов равновесной жидкой фазы. Её появление и увеличение количества с ростом температуры связано с последовательностью плавления эвтектических составов, реализующихся в многокомпонентной системе из кислых и основных оксидов в валовом составе золы, пересчитанном на бессульфатную массу.

В реальных условиях факельного сжигания сульфидная и органическая сера является неотъемлемым компонентом в процессах взаимодействия железосодержащих минералов с силикатными. В [4] показано, что с увеличением скорости нагрева до 1,1–1,8 °С/с деформация образцов золы резко возрастает, и на кривых её зависимости от температуры появляются максимумы, связанные с расслоением образующегося расплава на две жидкие фазы: сульфидную (FeS–FeO) и силикатную. При этом скорость деформации образцов характеризуется наличием максимумов, температуры которых хорошо согласуются с температурой начала шлакования, определенной в промышленных условиях. В связи с этим считаем целесообразным провести сопоставление температурных интервалов устойчивости сульфидно-силикатного расплава с результатами систематических исследований температуры начала шлакования в [1].

Появление максимумов на зависимостях «скорость деформации – температура» связано с взаимодействием кислых и основных оксидов с расплавом эвтектического состава FeS–FeO, образующегося при $t \geq$ 920 °С. В процессах взаимодействия изменяется количество сульфидного расплава за счет его эвакуации из объема образцов и окисления FeS и FeO до оксидов Fe_3O_4 и Fe_2O_3. Начало эвакуации из золы кислого состава в интервале $6 \leq C_{\sum K} / C_{\sum O} \leq 20$ наблюдали [4] при температурах, соответствующих максимуму скорости деформации по появлению пятна на



Псевдобинарная диаграмма, иллюстрирующая взаимодействие эвтектических составов

подложках и сильного приваривания к ним образцов. Полное расслоение расплава в составе образцов происходило при более высокой температуре, отвечающей началу расширения (вспучивания) образцов за счет выделения газов, образующихся при окислении FeS.

Зависимость скорости деформации от температуры для образцов золы основного состава ($C_{\sum K}/C_{\sum O} \le 6$) также характеризуется наличием максимума, но эвакуации сульфидного расплава (появление пятна на подложках) не наблюдали [4]. Вспучивание образцов с ростом температуры не происходило.

Различное дилатометрическое поведение образцов и их взаимодействие с подложкой связано с противоположным влиянием кислых и основных оксидов на устойчивость FeS и FeO в составе образующегося расплава в объеме образцов, которое можно описать с помощью квазибинарной диаграммы (см. рисунок). Растворение только кислых оксидов в составе расплава эвтектического состава (FeS–FeO) приводит к улучшению условий десульфации [5]. Мольная доля серы в расплаве уменьшается, а, следовательно, уменьшается концентрация FeS в его составе. Напротив, с увеличением содержания кислых оксидов устойчивость FeO в составе расплава увеличивается. Следовательно, температура ликвидуса расплава по мере растворения кислых оксидов и десульфации будет повышаться и стремиться к температуре $t_{\Sigma K}$, соответствующей температуре эвтектики, реализующейся в системе $FeO-SiO\cdot Al_2O_3$ [9].

При растворении только основных оксидов мольная доля серы в составе образующегося расплава хотя и возрастает, но мольная доля двухвалентного железа очень резко снижается [5], а следовательно, уменьшается концентрация FeS и FeO. В связи с этим по мере растворения основных оксидов температура ликвидуса образующегося расплава будет возрастать более круто и стремиться к температуре плавления эвтектики $t_{\Sigma O}$, реализующейся в системе $\sum O$–Fe_2O_3.

В процессе совместного растворения основные оксиды поставляют ионы кислорода, а кислые их потребляют. В таком представлении на диаграмме [$\sum K/\sum O$–(FeS–FeO)] температура ликвидуса образующегося расплава согласно [6] слабо зависит от природы химических элементов, а определяется только концентрацией ионов кислорода, вносимых основными оксидами при их растворении. Для такой системы связь между инвариантными точками и составом согласно теплового баланса для одного моля расплава можно определить из равенства [7]:

$$(Q_{\sum K,t\sum K} - Q_{\sum K,t_Э}) = (Q_{\sum O,t\sum O} - Q_{\sum O,t_Э}), \qquad (5)$$

где Q – долевые теплосодержания кислых и основных оксидов в составе сульфидно-силикатного расплава при температурах плавления $t_э$ (920 °С) – эвтектики FeS–FeO; $t_{\Sigma K}$ – кислых и $t_{\Sigma O}$ – основных оксидов. После подстановки в (5) долевых теплосодержаний, выраженных через теплоёмкость и концентрацию, и соответствующих преобразований получаем:

$$\frac{C_{\sum K}}{C_{\sum O}} = \frac{\int_{t_Э}^{t_{\sum O}} C\rho, \sum O^{dT}}{\int_{t_Э}^{t_{\sum O}} C\rho, \sum K^{dT}}. \qquad (6)$$

Принимая независимость теплоемкости кислых и основных оксидов от температуры и учитывая, что $C_{P,\sum K}/C_{P,\sum O} \sim 1$, получим тождество:

$$\frac{C_{\sum K}}{C_{\sum O}} = \frac{t_{\sum O} - t_Э}{t_{\sum K} - t_Э}, \qquad (7)$$

решение которого относительно $t_{\sum O}$ с учетом, что $t_Э =$ 920 °С, приводит к уравнению

$$t_{\sum O} = 920 + (t_K - 920)\frac{C_{\sum K}}{C_{\sum O}}, \qquad (8)$$

описывающему зависимость температуры ликвидуса сульфидно-силикатного расплава от его химического состава.

Граничные значения параметров $t_{\sum K}$ и $C_{\sum K}$ зависят от микрохимического состава минеральной части исходного угля [8]. Величина параметра $C_{\sum K}$ определяет количество кислых оксидов, растворяющихся в составе образующегося расплава при взаимодействии их с железосодержащими минералами. Железо в минеральной части углей входит в состав пирита FeS_2 либо содержит $FeCO_3$. По данным микрохимического анализа углей [8] индивидуальных включений данных минералов, как правило, не наблюдается. В общем случае они входят в сростки (минеральные композиции) с алюмосиликатами. Это позволяет оценить максимальную величину $C_{\sum K}$ по стехиометрическому соотношению для реакции взаимодействия в таких сростках:

$$2FeS_2 + 5SiO_2 + 2Al_2O_3 + 5O_2 = 2FeO\ 2Al_2O_3\ 5SiO_2 + 4SO_2, \qquad (9)$$

из которого следует, что при образовании железистого кордиерита 1 моль FeO связывает 3,5 моль кислых оксидов и в пересчете на Fe_2O_3 $C_{\sum K} \le 3{,}14C_{Fe_2O_3}$, где $C_{Fe_2O_3}$ – содержание оксида Fe_2O_3 в составе золы угля. Если в исходном угле железосодержащие минералы находятся в сростках с чисто алюмосиликатными (каолинит $Al_2O_3 \cdot 2SiO_2 \cdot 2H_2O$), то максимальная величина параметра $t_{\sum K}$ будет соответствовать эвтектической композиции с $t_{пл}$ = 1088 °С в системе $FeO–SiO_2–A1_2O_3$ [9], реализующейся при нестехиометрическом развитии реакции (9) и полной десульфурации образующегося расплава. При наличии в минеральных композициях глин, насыщенных катионами K, Ca, Na, а также в сростках железосодержащих минералов с полевым шпатом (альбит, апортит, ортоклаз) величина параметра уменьшается до минимального значения $t_{\sum K}$ = 990 °С, отвечающего температуре плавления эвтектики в системе $Al_2O_3 \cdot SiO_2–FeO–K_2O$ [6, 9].

Считаем необходимым отметить, что предельные значения 990 °С $\le t_{\sum K} \le$ 1083 °С, соответствующие полной десульфурации расплава, не зависят от исходной природы железосодержащих минералов. В реальном процессе кратковременного взаимодействия органическая сера и минеральные компоненты в составе угля являются неотъемлемыми компонентами при образовании сульфидно-силикатного расплава даже при отсутствии пирита. В [4] показано, что при скоростях нагрева 1,1–1,8 °С/с образцов золы образование сульфидно-силикатного расплава при $t \ge$ 920 °С и его расслоение на две жидкие фазы происходит вне зависимости от фазового состава железосодержащих минералов в исходном угле, а определяется валовым химическим составом золы с учетом сульфатной массы.

В таблице представлены результаты расчетов температуры ликвидуса оксидно-сульфидного расплава по уравнению (8) в сравнении с величиной температуры начала шлакования, определенной в реальных условиях факельного сжигания и рассчитанной по уравнению аппроксимации (1) [1]. Для расчетов по уравнения (8) параметр $t_{\sum K}$ принимали как температуры плавления эвтектических композиций (см. таблицу), состав которых устанавливали по результатам анализа микрохимического состава образцов исходного угля и утвердившихся положений о фазовом составе их минеральной части и сопутствующей породы.

Сопоставление показывает, что $t_л$ и $t_ш$, определяемое экспериментально, различаются в среднем на 3–5 °С. Исключение наблюдается только для кызылкийского угля, которое объясняется следующим. Пирит в составе данного угля входит в минеральные композиции, в которых обнаруживается до 8–12 мол.% калия [8]. Взаимодействие в таких композициях приводит к одновременному присутствию в составе аэродинамического золового потока двух жидких фаз: на основе FeS–FeO с $t_л$ = 949 °С и на основе эвтектической композиции $KAlSi_3O_8 – KFeSi_3O_8$ с $t_л$ = 1004 °С. Следовательно, реальная величина $t_ш$ должна находиться в пределах 949–1004 °С. С учетом этого среднее значение данного интервала $t_л$ = 976 °С находится в хорошем согласии с $t_ш$ = 970 °С, определенной экспериментально.

Сопоставление величины температуры начала шлакования, установленной экспериментально [1], с температурой ликвидуса, рассчитанной по данным о валовом составе золы и микрохимического состава минеральных композиций в исходном угле

№	Месторождение угля	Химический состав, мол.%			$t_ш$ по уравнениям в тексте, °С	Расчет $t_л$ с учетом микрохимического состава углей по уравнению (8)			$t_ш$, °С (эксп)
		$C_{\sum K}$	$C_{\sum O}$	$C_{\sum Fe_2O_3}$		$t_{\sum K}$, °С	Эвтектика в системе	$t_{\ddot{e}}$, °Ñ	
1	Сибергинский	87,01	10,62	2,83	1020	1088	$FeO–Al_2O_3–SiO_2$	1038	1040
2	Анжуйский	87,85	9,47	2,48	1032	1088	$FeO–Al_2O_3–SiO_2$	1058	1060
3	Ангренский	76,59	20,18	3,4	971	1050	$CaO–FeO–SiO_2–Al_2O_3$	989	995
4	Черемховский	88,54	9,21	2,21	1036	1050	$CaO–FeO–Al_2O_3–SiO_2$	1018	1020
5	Ирша-Борьдинский	58,26	38,68	3,2	946	1040	$CaO–FeO–Fe_2O_3–Al_2O_3–SiO_2$	951	950
6	Экибастузский	93,33	3,81	2,83	1201	1040	$CaO–FeO–Fe_2O_3–Al_2O_3–SiO_2$	1209	1205
7	Азейский	86,89	10,9	2,19	1018	1040	$CaO–FeO–Fe_2O_3–Al_2O_3–SiO_2$	992	995
8	Челябинский	85,32	9,98	4,71	1024	990	$Al_2O_3–FeO–K_2O–SiO_2$	1026	1030
9	Минусинский	77,7	17,19	5,12	980	990	$Al_2O_3–FeO–K_2O–SiO_2$	985	980
10	Приозёрный	85,14	11,26	3,62	1013	990	$Al_2O_3–FeO–K_2O–SiO_2$	990	990
11	Кызылкийский	77,22	16,49	6,33	981	990	$Al_2O_3–FeO–K_2O–SiO_2$	949/ 1004	970

В заключение считаем необходимым отметить, что для практических оценок температуры начала шлакования по химическому составу золы выбор уравнения не имеет принципиального значения, поскольку они все приводят к результатам, достаточным для организации бесшлакового режима при факельном сжигании. Однако для анализа шлакующих свойств углей в целом, агрегатного состояния золовых частиц в составе аэродинамического потока и условий их закрепления выбор вида функциональной зависимости является определяющим. Уравнение (8) при статистическом усреднении параметров $t_{\sum K}$ и $C_{\sum K}$ легко преобразуется в уравнение (3), что позволяет сделать следующее заключение о физико-химическом смысле температуры начала шлакования и её зависимости от валового химического состава угля.

По физико-химическому смыслу температура начала шлакования для углей с кислым составом золы соответствует температуре ликвидуса (устойчивости) сульфидно-силикатного расплава в составе формирующихся шлаковых отложений. Закрепление (налипание) частиц при формировании отложений с химическим составом золы, адекватным золе исходного угля, связано не с их агрегатным состоянием в целом, а с взаимодействием с сульфидно-силикатным расплавом, играющим роль «клея» в связи с его уникальными реологическими свойствами, отмеченными в [4]. Количество сульфидно-силикатного расплава в составе аэродинамического золового потока, необходимое для формирования отложений, по оценке среднего значения не превышает 7 мол.%.

Работа выполнена при поддержке гранта губернатора Челябинской области Ур. Чел. №104-03-96072.

Литература

1. Алехнович А.Н., Богомолова В.В. Температурные условия начала шлакования при сжигании углей с кислым составом золы // Теплоэнергетика. – 1988. – № 1. – С. 34–38.

2. Алехнович А.Н., Богомолова В.В., Гладков В.Е. Шлакование и отложения в газовом тракте котлов // В кн.: Развитие технологий подготовки и сжигания топлива на электростанциях. – М.: ВТИ, 1996. – С. 111–123.

3. Алехнович А.Н., Богомолов В.В., Гладков В.Е. Прогнозирование шлакующих и загрязняющих свойств углей // Электрические станции. – 1988. – № 4. – С. 2–6.

4. Афлятунов Ж.З., Гладков В.Е., Викторов В.В. Влияние скорости нагрева на деформацию образцов из золы углей // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 6. – № 6 (46). – С. 129–134.

5. Кожеуров В.А. Термодинамика металлургических шлаков. – Свердловск, 1958. – 160 с.

6. Бережной А.С. Многокомпонентные системы окислов. – Киев: Наукова Думка, 1970. – 544 с.

7. Васильев М.В. К вопросу о положении эвтектической точки на диаграмме состояния бинарных систем // Известия вузов (цветная металлургия). – 1969. – № 6. – С. 90–95.

8. Афлятунов Ж.З., Гладков В.Е., Викторов В.В. Особенности микрохимического состава энергетических углей // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 6. – № 6 (46). – С. 135–138.

9. Минералы: Справочник. – М.: Наука, 1974. – Вып.1–2.

Поступила в редакцию 29 сентября 2006 г.

УДК 541.182.644:541.183.24

АДСОРБЦИЯ КАРБОНАТ-ИОНОВ ОКСИГИДРОКСИДАМИ ЖЕЛЕЗА(III) И АЛЮМИНИЯ

С.И. Печенюк, Н.А. Будникова

Изучена адсорбция углекислого газа из воздуха и карбонат-ионов из водного раствора свежеосажденными оксигидроксидами железа(III) и алюминия. Найдено, что величины адсорбции плавно возрастают с увеличением pH осаждения оксигидроксидов. Установлено, что адсорбция CO_2 из воздуха достигает 0,08 моль/моль $Me(OH)_3$ для обоих гидроксидов, а карбонат-ионов – 0,3 моль/моль феррогеля и 0,76 моль/моль алюмогеля. Адсорбция карбонат-ионов из раствора гелями, осажденными щелочью, отличается низкой избирательностью, изотермы адсорбции описываются уравнением Фрейндлиха и Генри. Карбонат-ионы занимают на поверхности гидрогелей 4–5 ммоль-центров/г $Me(OH)_3$. Карбонат-ионы не могут конкурировать при адсорбции с фосфат- или арсенат-ионами, но имеют сродство к оксигидроксидам, близкое к сродству хлорид- или сульфат-ионов.

Введение

Физико-химические исследования имеют большое значение для изучения процессов, протекающих в окружающей среде. В частности, большой интерес представляет роль углекислого газа и карбонат – ионов в природных процессах сорбции и миграции микроэлементов. Активными сорбентами в природе являются обычно оксиды, оксигидроксиды, алюмосиликаты и продукты выветривания последних. Поступление в окружающую среду ионов металлов за счет техногенных факторов приводит к постоянному образованию свежеосажденных оксигидроксидов. Значительная часть токсичных микроэлементов присутствуют в природе в форме анионов (элементы V–VII групп). В условиях нашей практической деятельности мы всегда находимся в атмосфере, содержащей углекислый газ, и пользуемся водой, содержащей карбонат-ионы. Следовательно, интересно и практически важно знать влияние карбонатов на адсорбцию других анионов. В литературе же сорбции карбонат-ионов из растворов уделяется самое минимальное внимание. До сих пор нам известны только работы [1–3], посвященные этому вопросу. В одной из них [1] рассматривается адсорбция карбонат-ионов из раствора на реактивном TiO_2, в другой [2] – на ZrO_2 и в третьей [3] – на гетите. Между тем карбонат-ион, имеющий конфигурацию треугольника и заряд –2, является аналогом сульфит- и селенит-ионов, отличающихся высоким сродством к оксигидроксидам[4]. Сорбция CO_2 из газовой фазы, напротив, широко изучена, но в качестве сорбента обычно использовали активированные угли, а не оксигидроксиды (кроме щелочи).

В настоящей работе мы изучали адсорбцию карбонат-ионов из растворов и CO_2 из воздуха аморфными оксигидроксидами (гидрогелями) алюминия и железа(III) с целью определить сорбируемость CO_2 и сравнить закономерности сорбции карбонат-ионов и других анионов на этих высокоактивных адсорбентах.

Экспериментальная часть

В работе были использованы гидрогели оксигидроксидов Fe(III) с pH осаждения 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13 (осадитель NaOH) и 5,6, 7, 8, 9, 9,5, 10, 10,5 (осадитель Na_2CO_3) и гидрогели оксигидроксида алюминия с pH осаждения 6, 7, 8, 9 (осадители NaOH и Na_2CO_3). Для получения гидрогелей использовали растворы $FeCl_3$ (77,7 г/л) и $Al(NO_3)_3$ (37,65 г/л). Пользовались ранее описанным способом быстрого щелочного гидролиза растворов солей металлов [5]. Для получения каждого образца использовали аликвоту исходного раствора, соответствующую ~0,01 моля оксигидроксида, разбавленную до ~50 мл. Гидрогели осаждали при нужном pH (pH_{oc}), прибавляя к разбавленной аликвоте раствора соли раствор NaOH или Na_2CO_3 до тех пор, пока заданное значение pH_{oc} не оставалось постоянным в течение ~5 мин. После осаждения гель отделяли от маточного раствора и трижды промывали дистиллированной водой декантацией с помощью центрифуги с n = 2000 об/мин (угловой ротор центрифуги ОПн-8, минимальное ускорение 1400, максимальное – 4000 м/с^2) каждый раз по 5 мин. Полученные таким образом гидрогели либо репульпи-

ровали в воде, разбавляли в мерной колбе до 100 мл и использовали в опытах по адсорбции карбонат-ионов (осадитель NaOH), либо высушивали при комнатной температуре на воздухе до постоянной массы.

В первом случае 100 мл суспензии гидрогеля вносили в раствор, содержащий аликвоту исходного раствора сорбата, разбавленную до 100 мл. Суммарный объем суспензии составлял 200 мл. В качестве адсорбата служил раствор Na_2CO_3 (0,998 моль/л), который разбавляли до нужных концентраций (интервал от 0,05 до 0,5 моль/л, обычно 8 значений). Систему выдерживали в течение часа при постоянном перемешивании магнитной мешалкой при комнатной (18–20 °С) температуре. Предварительными опытами было установлено, что сорбционное псевдоравновесие устанавливается менее чем за 10 мин. Пробы суспензии из системы отбирали трижды, через каждые 20 мин, чтобы избежать ошибки, связанной с неправильным определением времени установления равновесия $\tau_р$. Пробы фильтровали через фильтр «синяя лента» и определяли в фильтрате остаточное содержание адсорбата (равновесную концентрацию $C_Р$). Исходную и равновесную концентрации карбонат-ионов определяли титрованием 0,1М раствором HCl по метилоранжу и фенолфталеину [6]. Величину адсорбции вычисляли по формуле

$$A = 0,2\frac{C_{исх} - C_p}{m}, \text{ моль/г } (m \text{ –масса сорбента в г}^1).$$

Во всех случаях контролировали также pH исходного раствора адсорбата и суспензии. Все измерения pH проводили на pH-метре pH410 «АКВИЛОН» с комбинированным электродом ЭСК-10601/7.

Высушенные образцы подвергали анализу на содержание углерода (сжигание образца) и на содержание воды, которое определяли прокаливанием до постоянной массы при 800 °С. Считали, что при прокаливании удаляется и адсорбированный CO_2, и принимали, что остаток от прокаливания имеет состав Fe_2O_3 или Al_2O_3. Отсюда рассчитывали состав исходного вещества. Однако если адсорбируются молекулы соды или щелочи, то после прокаливания Fe_2O_3 или Al_2O_3 содержат примесь щелочи. Чтобы определить содержание щелочи, остаток от прокаливания помещали в 50 мл дистиллированной воды, измельчали и выдерживали в течение 2 часов. За это время щелочь должна была раствориться. Затем раствор отфильтровывали и измеряли pH фильтрата. Если pH было не выше 9–10, то считали, что примесь щелочи пренебрежимо мала (так было для феррогелей). Если же pH было >11 (для алюмогелей), то фильтрат титровали кислотой и вычисляли содержание щелочи в образце. Из формул, приведенных в табл. 1, видно, что алюмогель сорбирует и карбонат и щелочь, тогда как феррогель – только карбонат (углекислый газ). Таким образом определяли, сколько CO_2 адсорбируется из воздуха при сушке образцов, осажденных щелочью, и сколько карбонат-ионов адсорбируется на поверхности гидрогеля из раствора, когда осадителем является сода.

Пример расчета: Образец – Al-гель, осажденный Na_2CO_3, высушенный на воздухе, с $pH_{oc} = 6$. Образец содержит 1,12 % С, следовательно, исходя из М.в. CO_2, содержание его равно: 1,12 × 44/12 = 4,1 %. Потеря массы при прокаливании приходится на H_2O+CO_2 и равна 42,25 %, тогда содержание H_2O = 42,25 – 4,1 = 38,15 %.

После обработки остатка от прокаливания водой pH фильтрата был равен 10,83 для навески 0,1115 г и 11,26 для навески 0,1144 г. По результатам титрования фильтратов нашли среднее содержание в образце NaOH 4,4 мас.%, отсюда в исходной навеске было 53,37 % Al_2O_3. Далее известным способом находим формулу исходного соединения: 53,37/102 : 4,1/44 : 38,15/18 : 4,4/40 = = 0,523 : 0,0932 : 2,119 : 0,11 = 1 : 0,178 : 4,036 : 0,21, т.е. $Al_2O_3 \cdot 4H_2O \cdot 0,178CO_2 \cdot 0,21NaOH$ = = $Al(OH)_3 \cdot 0,5H_20 \cdot 0,089NaHCO_3 \cdot 0,0115NaOH$

Полученные данные приведены в табл. 1. Данные, полученные для сорбции карбонат-ионов из растворов, приведены в табл. 2 и 3 и на рисунке.

Результаты и обсуждение

Приведенные в табл. 1 данные о составе высушенных гелей согласуются с данными капельного титрования растворов $FeCl_3$ щелочью и содой [7]. Было найдено [7], что как при титровании щелочью, так и содой образующийся гидроксид поглощает сверхстехиометрические количества

[1] Расчет ведется на 1 г $Fe(OH)_3$ или $Al(OH)_3$, содержащегося в гидрогеле или ксерогеле.

Таблица 1

Состав высушенных на воздухе ферро- и алюмогелей

Осадитель	pH осаждения	Состав продукта	Отношение Me:C	Адсорбция, 10^3, моль/г $Me(OH)_3$
Феррогели				
NaOH	5	$3FeOOH \times Fe(OH)_3 \times 0{,}054\ HCO_3^-$	1: 0,0135	0,126
	6	$9FeOOH \times Fe(OH)_3 \times 0{,}12\ HCO_3^-$	1:0,012	0,112
	7	$9FeOOH \times Fe(OH)_3 \times 0{,}125\ HCO_3^-$	1:0,0125	0,116
	8	$10FeOOH \times Fe_2O_3 \times 0{,}18\ HCO_3^-$	1:0,015	0,140
	9	$6FeOOH \times Fe_2O_3 \times 0{,}212\ HCO_3^-$	1:0,0265	0,246
	10	$6FeOOH \times Fe_2O_3 \times 0{,}4\ HCO_3^-$	1:0,050	0,468
	11	$3FeOOH \times Fe_2O_3 \times 0{,}263\ HCO_3^-$	1:0,0526	0,492
	12	$3FeOOH \times Fe_2O_3 \times 0{,}313\ HCO_3^-$	1:0,0626	0,582
	13	$3FeOOH \times Fe_2O_3 \times 0{,}4\ HCO_3^-$	1:0,08	0,748
Na_2CO_3	5	$Fe(OH)_3 \times 0{,}5H_2O \times 0{,}028\ CO_2$	1:0,028	0,262
	6	$Fe(OH)_3 \times 0{,}5H_2O \times 0{,}034\ CO_2$	1:0,034	0,318
	7	$5FeOOH \times Fe(OH)_3 \times 0{,}27\ CO_2$	1:0,045	0,412
	8	$5FeOOH \times Fe(OH)_3 \times 0{,}42\ CO_2$	1:0,070	0,654
	9	$3FeOOH \times Fe(OH)_3 \times 0{,}44\ CO_2$	1:0,110	1,03
	10,5	$4FeOOH \times Fe(OH)_3 \times 1{,}5H_2CO_3$	1:0,3	2,804
Na_2CO_3 в атм. Аргона	5	$8Fe(OH)_3 \times 3H_2O \times 0{,}112\ CO_2$	1:0,014	0,131
	6	$3FeOOH \times 5Fe(OH)_3 \times 0{,}264H_2CO_3$	1:0,033	0,308
	7	$FeOOH \times 2Fe(OH)_3 \times 0{,}2625H_2CO_3$	1:0,0875	0,818
Na_2CO_3 в атм. аргона	8	$FeOOH \times 4Fe(OH)_3 \times 0{,}55H_2CO_3$	1:0,11	1,028
	9	$FeOOH \times 4Fe(OH)_3 \times 0{,}795H_2CO_3$	1:0,159	1,486
	10	$3FeOOH \times 2Fe(OH)_3 \times 0{,}95H_2CO_3$	1:0,190	1,775
	10,5	$FeOOH \times Fe(OH)_3 \times 0{,}61H_2CO_3$	1:0,305	2,850
Алюмогели				
NaOH	6	$Al(OH)_3 \times 0{,}026\ Na_2CO_3 \times 1{,}75H_2O$	1:0,026	0,333
	7	$Al(OH)_3 \times 0{,}035\ Na_2CO_3 \times 0{,}35H_2O$	1:0,035	0,449
	8	$Al(OH)_3 \times 0{,}054\ Na_2CO_3$	1:0,054	0,692
	9	$Al(OH)_3 \times 0{,}072\ Na_2CO_3 \times 2{,}575H_2O$	1:0,072	0,923
NaOH в атм. аргона	6	$Al(OH)_3 \times 0{,}085\ Na_2CO_3 \times 0{,}98H_2O$	1:0,085	1,090
	7	$Al(OH)_3 \times 0{,}113\ Na_2CO_3 \times 0{,}62H_2O$	1:0,113	1,449
	8	$Al(OH)_3 \times 0{,}224\ Na_2CO_3 \times 0{,}365H_2O$	1:0,224	2,872
	9	$Al(OH)_3 \times 0{,}185\ Na_2CO_3 \times 0{,}2H_2O$	1:0,185	2,372
Na_2CO_3	6	$Al(OH)_3 \times 0{,}089\ NaHCO_3 \times 0{,}5H_2O \times \times 0{,}011NaOH$	1:0,088	1,135
	7	$Al(OH)_3 \times 0{,}189\ Na_2CO_3 \times 1{,}5H_2O \times \times 0{,}041NaOH$	1:0,189	2,429
	8	$Al(OH)_3 \times 0{,}391\ Na_2CO_3 \times 0{,}5H_2O \times \times 0{,}059NaOH$	1:0,391	5,006
	9	$Al(OH)_3 \times 0{,}76\ Na_2CO_3 \times 0{,}5H_2O \times \times 0{,}42NaOH$	1:0,760	9,744

основания, например, при pH 10 – до 0,2 моль OH^- /моль гидроксида или до 0,5 моль карбоната/моль гидроксида, причем отмыть удается не более 10 % щелочи или 30 % карбонат-ионов. Количество поглощаемого сверхстехиометрического основания растет с увеличением pH в системе [7]. Эти данные показывали, что, по крайней мере, феррогели обладают определенным сродством к карбонат-ионам и углекислому газу. Можно было предположить, что это характерно и для

алюмогелей. Как показывает табл. 1, это предположение подтвердилось. В таблице приведены формулы полученных продуктов высушивания; колонка «соотношение Me:C» позволяет видеть мольное отношение адсорбата к адсорбенту, а колонка «Адсорбция,·10^3, моль/г $Me(OH)_3$» позволяет сравнить величины адсорбции CO_2 из воздуха и карбонат-ионов из раствора. Из табл. 1 видно, что, во-первых, если осадителем является раствор щелочи, то при сушке на воздухе на поверхности гидрогелей адсорбируются заметные количества CO_2, плавно возрастающие с увеличением pH_{oc} гелей. Если осадителем является раствор соды, то в ксерогеле обнаруживаются значительно большие количества карбоната, которые быстрее возрастают с увеличением pH_{oc}. Если осаждение содой проводить в токе аргона, то адсорбируются близкие и даже несколько большие количества карбонат-ионов, следовательно, карбонат-ионы сорбируются именно из раствора. Величина сорбции CO_2 из воздуха во всех случаях не превышает 1 ммоль/г, тогда как сорбция карбонат-ионов феррогелями из раствора доходит до 3 ммоль/г. Еше более активно поглощает CO_2 и карбонат-ионы алюмогель. Мольное отношение Al:C при сорбции карбонат-ионов в процессе осаждения доходит почти до 1, а адсорбция в ммоль/г $Al(OH)_3$ – почти до 10. Следует также отметить, что феррогели не адсорбируют заметных количеств катионов натрия ни из растворов соды, ни щелочи, тогда как алюмогели поглощают и карбонат-ионы, и щелочь, причем последнюю – в избытке к углекислоте. Хотя в табл. 1 приведены простейшие из формул, которые следуют из результатов количественного анализа, они не противоречат выводу из работы [1], что адсорбируются главным образом бикарбонат-ионы.

При обработке экспериментальных данных по адсорбции карбонат-ионов из раствора мы исходили из предположения, что однозарядный ион занимает 1 сорбционный центр, двухзарядный – 2 и т.д. Тогда адсорбцию лучше выражать не в моль/г, а в моль-центрах/г[2], что было введено в практику в работе [8] для образцов, величины удельной поверхности которых плохо поддаются определению традиционным методом БЭТ, поскольку изменяются при пробоподготовке, что характерно для гелеобразных оксигидроксидов металлов. Для того, чтобы экспериментально полученные величины адсорбции выразить в моль-центрах/г, нужно экспериментальную величину адсорбции *A* умножить на заряд иона. Анионы угольной кислоты за счет реакций диссоциации и гидролиза в водном растворе легко превращаются друг в друга. Пользуясь величинами констант диссоциации угольной кислоты [9], и экспериментальными значениями pH суспензии, рассчитали для каждой экспериментальной точки с карбонат-ионами содержание каждой из форм, которые могут существовать при данном значении pH, как показано, например, в табл. 2.

Пример расчета: заменяя активности концентрациями, получаем:
$H_2CO_3 \leftrightarrow HCO_3^- + H^+$; $K_{дI} = 4\cdot10^{-7} = [HCO_3^-][H^+]/[H_2CO_3]$,
отсюда $[HCO_3^-]/[H_2CO_3] = 4\cdot10^{-7}/[H^+]$
$HCO_3^- \leftrightarrow CO_3^{2-} + H^+$; $K_{дII} = [CO_3^{2-}][H^+]/[HCO_3^-] = 4{,}69\cdot10^{-11}$,
Отсюда $[CO_3^{2-}]/[HCO_3^-] = K_{дII}/^-[H^+]$;

Если pH суспензии составляет 6, то $[HCO_3^-]/[H_2CO_3] = 4\cdot10^{-7}/10^{-6} = 0{,}4$, следовательно, в растворе существует смесь 29 % бикарбонат-ионов и 71 % молекул H_2CO_3. При pH = 11 отношение $CO_3^{2-}]/[HCO_3^-] = 4{,}69$, следовательно, в смеси будет содержаться 83.4 % CO_3^{2-} и 17.6 % HCO_3^- и т.д. Далее приняли, что ионный состав адсорбата в фазе адсорбента соответствует ионному составу адсорбата в равновесном растворе. Основываясь на этих допущениях, рассчитали приведенные к моль-центрам/г величины сорбции, которые обозначили как $A_П$. Пример такого расчета вместе с экспериментальными величинами A представлен в табл. 2.

Адсорбция карбонат-ионов из раствора происходит так же быстро, как и для большинства неорганических ионов. Адсорбируются карбонат-ионы как на положительно, так и на отрицательно заряженных поверхностях, так же, как, например, фосфат- и арсенат-ионы [10,11]. Адсорбция карбонат-ионов на ферро- и алюмогелях отличается крайне низкой избирательностью: при всех исходных концентрациях степень извлечения не превышает 2–3 % (см. табл. 2). Однако за счет большого избытка адсорбата практически все адсорбционные центры гидрогелей заняты, и $A_П$ достигает 4–5 ммоль-центров/г, т.е даже несколько больше, чем в случае фосфат-ионов[11]. Изотермы адсорбции карбонат-ионов из растворов ферро- и алюмогелями приближенно описываются уравнением изотермы Фрейндлиха, которое очень близко к уравнению Генри вида

[2] Моль-центр – количество сорбционных центров, равное числу Авогадро.

$A = KC_р$, поскольку величины $1/n$ во всех случаях близки к 1 (см. табл. 3). Формы изотерм сорбции показаны на рисунке. Таким образом, изотермы адсорбции карбонат-ионов из растворов на гидрогелях Fe и Al не являются изотермами высокого сродства, в отличие от адсорбции CO_2 на диоксиде циркония [2].

Таблица 2

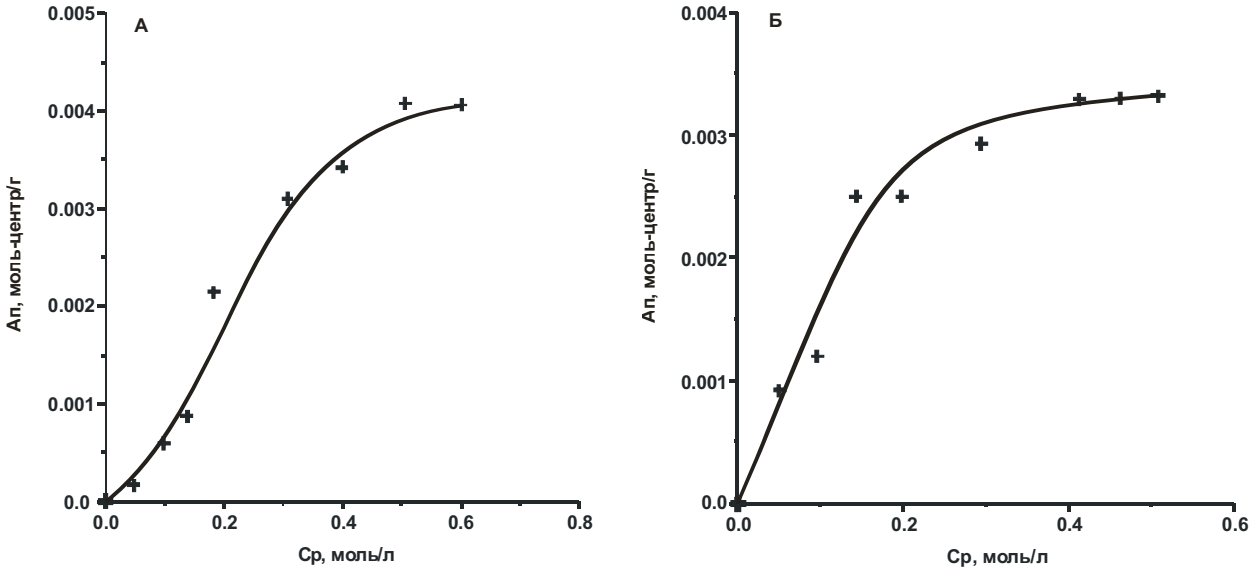
Пример расчета изотермы сорбции карбонат-ионов из раствора (феррогель с pH осаждения 7)

$C_{исх}$, моль/л	$C_р$, моль/л	$pH_{сусп}$	$A \cdot 10^3$, моль/г	$[CO_3^{2-}]/[HCO_3^-]$	$A_П \cdot 10^3$, моль-центров/г
0,047	0,045	10,53	0,40	1,63	0,76
0,092	0,090	10,62	0,40	1,70	0,68
0,136	0,132	10,65	0,80	1,94	1,08
0,182	0,177	10,66	1.00	2,03	1,39
0,309	0,300	10,63	1,80	1,71	3,00
0,328	0,317	10,63	2,20	1,71	3,50
0,499	0,487	10,62	2,40	1,70	3,91
0,505	0,493	10,60	2,40	1,67	4,00

Таблица 3

Параметры уравнения Фрейндлиха, описывающего сорбцию карбонат-ионовиз растворов ферро- и алюмогелями

pH осаждения	K, л/г	1/n
Феррогели		
6	6,00	0,60
7	9,60	1,08
8	10,70	0,99
9	13,46	1,36
11	8,46	1,07
Алюмогели		
6	2,56	0,96
7	5,80	0,81
8	5,11	0,64
9	5,84	0,62



Изотермы адсорбции CO_3^{2-}-ионов из водных растворов Na_2CO_3 на оксигидроксидах железа(III) (А) и алюминия (Б) с pH осаждения 9

Работа показала, что карбонат-ионы не могут составить конкуренции адсорбции таких ионов, как фосфат, арсенат, селенит и даже хромат, (последнее следует из работы [3]), но сравнимs по своей адсорбируемости с сульфат- и хлорид-ионами. Поэтому при изучении сорбции анионов с высоким сродством к оксигидроксидам присутствием карбонат-ионов в воде и CO_2 в воздухе можно пренебречь, но при изучении сорбции сульфат-, хлорид-, селенат- и подобных анионов желательна инертная атмосфера.

При высушивании же гидрогелей нужно считаться с появлением в материале значительной примеси CO_2. При этом на феррогелях сорбированный углекислый газ превращается в карбонат- или бикарбонат-ионы за счет взаимодействия с водой гидрогеля, что не сопровождается сорбцией катионов натрия. Алюмогели же, очевидно, в процессе осаждения поглощают щелочь, которая затем, за счет сорбции CO_2 превращается в карбонат или бикарбонат натрия. При осаждении содой алюмогель поглощает из раствора не только молекулы карбоната натрия, но и щелочь.

Литература

1. Schulthess C.P., Belek J.Z. Proton adsorption on a titanium oxide in the presence of bicarbonate // J.Am.Soil Sci. Soc. – 1998. – V. 62. – P. 348–353.

2. Bachiller-Baeza B., Rodriguez-Ramos I., Guerrero-Ruiz A. Interaction of carbon dioxide with the surface of zirconia polymorphs // Langmuir. – 1998. – V. 14. – P. 3556–3564.

3. Geen A.van, Robertson A.P., Leckie J.O. Complexation of carbonate species at the goethite surface: Implications for adsorption of metal ions in natural waters // Geochim. Cosmochim. Acta. – 1994. – V.58. – P. 2073–2086.

4. Hayes K.F., Roe A.L., Brown G.E. a.o. *In situ* X-ray absorption study of surface complexes: selenium oxyanions on α-FeOOH // Science. – 1987. – V. 238. – P. 783–785.

5. Оксигидраты, полученные быстрым гидролизом концентрированных растворов солей Fe(III) / С.И. Печенюк, Д.Л. Рогачев, А.Г. Касиков и др. // Журн. неорган. химии. – 1985. – Т.30. – № 2. – С. 311–316.

6. Фритц Д., Шенк Г. Количественный анализ. – М.: Мир, 1978. – 558 с.

7. Печенюк С.И. Сорбционно-гидролитическое осаждение платиновых металлов на не органических сорбентах. – Л.: Наука, 1991. – 236 с.

8. Davis J.A. and Leckie J.O. Surface ionisation and complexation at the oxide/water interface / II. Surface propertiesof amorphous iron oxyhydroxide and adsorption of metal ions // J.Colloid Interface Sci. – 1978. – V.67. – № 1. – P. 90–107.

9. Добош Д. Электрохимические константы. – М.: Мир, 1980.

10. Печенюк С.И., Семушина Ю.П., Иванов Ю.В. Сравнительные данные о свойствах гидро- и ксерогелей оксигидроксидов железа(III) и хрома(III) // Изв. Челяб. науч. центра. Химия и биоэкология. – 2004. – № 3(24). – С. 62–66.

11. Печенюк С.И., Семушина Ю.П., Кузьмич Л.Ф. Оценка удельного содержания сорбционных центров оксигидроксидов железа (III) и циркония (IV) // Изв. РАН. Серия хим. – 2005. – № 8. – С. 1736–1741.

Поступила в редакцию 4 октября 2006 г.

УДК 544.6.076.32

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ АНОДНЫХ МАКСИМУМОВ ОКИСЛЕНИЯ МЕДИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОЛЬЦЕВОГО МИКРОЭЛЕКТРОДА

А.Г. Рябухин, Е.И. Иванов, Е.В. Шарлай

В работе при потенциодинамических условиях с помощью кольцевого микроэлектрода изучена зависимость тока и потенциала максимума при анодном растворении меди от температуры и скорости линейной развертки потенциала. Сделаны предварительные выводы о природе образующихся на аноде осадков.

Введение

В вольтамперометрических методах исследования кинетики электрохимических реакций имеет огромное значение адекватный выбор индикаторного электрода, который должен давать воспроизводимые и легко интерпретируемые данные. Наиболее перспективными на сегодняшний день считаются различные конструкции микроэлектродов – электродов с микронными размерами [1]. При этом проблема регистрации малого аналитического сигнала решена нашей исследовательской группой с изготовлением кольцевой конструкции микроэлектрода из заизолированной гальванической фольги, имеющего рабочую поверхность в виде металлического кольца на торце цилиндра [2].

Методика исследования

Для приготовления электролита (4н КОН) использовался реактив марки ч.д.а. и дистиллированная вода. Деаэрирование перед опытами не производилось. Применялась стандартная трехэлектродная ячейка, где рабочим электродом служила кольцевая конструкция микроэлектрода на основе медной фольги толщиной 10 мкм (кольцо с d = 0,5 см), а электродом сравнения являлся насыщенный хлорсеребряный электрод (ХСЭ). Вспомогательным электродом был графитовый стержень (d = 0,5 см; l = 3 см).

Кольцевая поверхность рабочего электрода обновлялась перед снятием каждой вольтамперограммы шлифованием наждачной бумагой (грубой и тонкой), промывалась дистиллированной водой и полировалась куском материи. При снятии i-, φ-кривых температура поддерживалась с помощью жидкостного циркуляционного термостата UH8 и дополнительно контролировалась термометром с точностью ±0,25 °С. Скорость изменения потенциала варьировалась в пределах 0,001…0,1 В/с. Потенциодинамический режим обеспечивался потенциостатом ПИ-50-1 и программатором ПР-8. Вольтамперограммы регистрировались двухкоординатным самописцем ЛКД4-003.

Съемка кривых осуществлялась следующим образом:

1) соответствующе подготовленный электрод опускали в электролит;

2) через 15 с поляризовали рабочий электрод до установленного ранее стационарного потенциала (–0,404 В по ХСЭ);

3) через 15 с начинали развертку потенциала в анодную область.

Все потенциалы пересчитывались относительно установленного стационарного потенциала.

Результаты исследований и их обсуждение

1. Исследование зависимости $(I\cdot(\varphi_{\text{отн}})) = f(T)$

Вид получаемой вольтамперограммы приведен на рис. 1.

Вольтамперограммы, снятые при средних скоростях развертки потенциала Vp (0,005…0,02 В/с), имеют три четко выраженных перекрывающихся пика. Потенциалы полученных волн соответствуют различным процессам окисления меди [3].

Обработка всего массива данных заключалась в построении зависимостей силы тока и потенциала максимума кривой (либо произведения первого на второе) от температуры и скорости

развертки. Наиболее интересной из полученных зависимостей оказалась зависимость произведения силы тока максимума на его потенциал (фактически, это подводимая при поляризации к системе энергия) от температуры, приведенная на рис. 2.

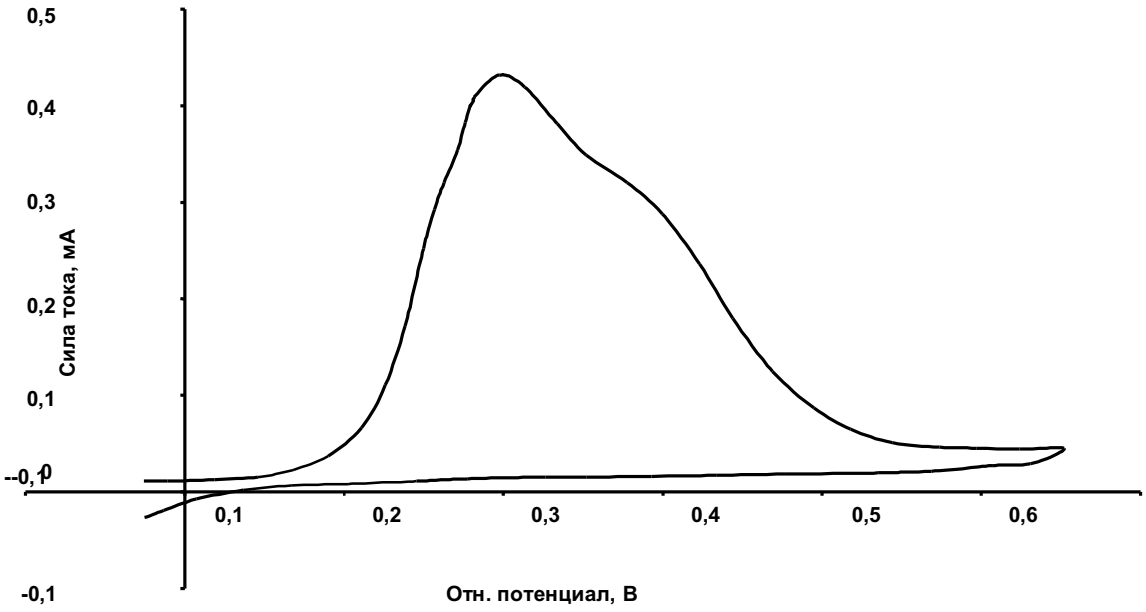


Рис. 1. Пример вольтамперограммы (25 °С, 0,02 В/с, 4 н КОН)

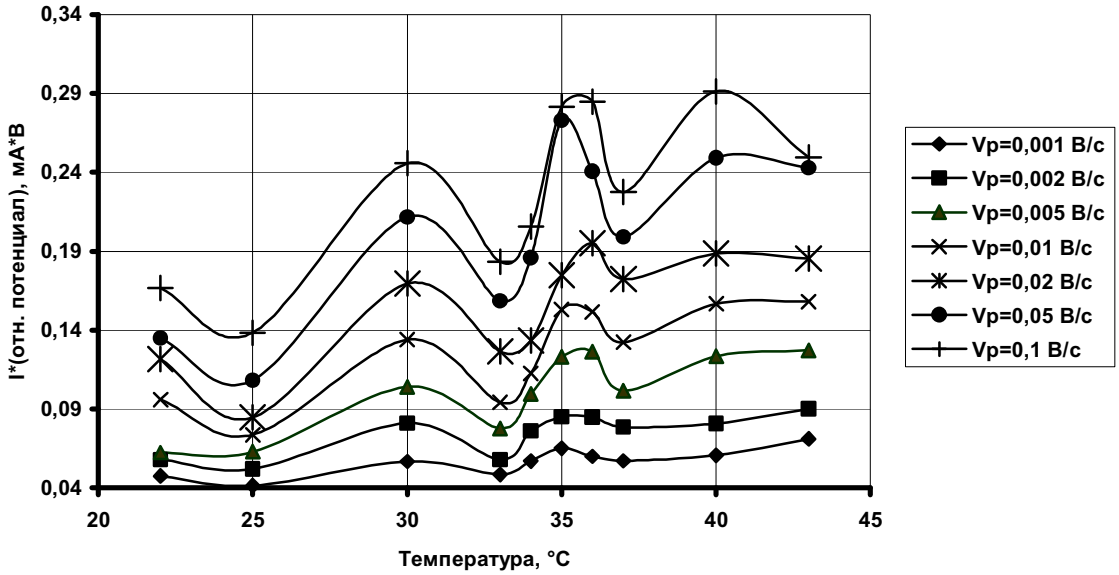


Рис. 2. Зависимость произведения силы тока на отн. потенциал максимума от температуры

Данные по графику приведены в табл. 1.

Как видно из графика, полученные зависимости немонотонны, и наблюдаются две температуры, при которых происходит резкий спад энергии системы (33 и 37 °С), соответственно, при температуре 35…36 °С наблюдается максимум. Поскольку именно в этой области обнаружен минимум стандартной теплоемкости воды [4], можно предположить, что здесь происходит некая

смена структуры электролита. Заметим, что графики зависимостей силы тока и потенциала максимума от температуры симбатны приведенному.

Таблица 1

Данные по зависимости ($I\cdot(\varphi_{отн})) = f(T)$ при различных развертках потенциала

Температура, °С	$I\cdot(\varphi_{отн})$, А·В						
	0,001 В/с	0,002 В/с	0,005 В/с	0,01 В/с	0,02 В/с	0,05 В/с	0,1 В/с
22	0,048	0,058	0,062	0,096	0,122	0,135	0,167
25	0,041	0,052	0,063	0,074	0,085	0,108	0,138
30	0,057	0,081	0,104	0,134	0,170	0,212	0,246
33	0,048	0,058	0,078	0,094	0,126	0,159	0,183
34	0,057	0,076	0,100	0,113	0,133	0,186	0,206
35	0,065	0,085	0,123	0,153	0,175	0,273	0,282
36	0,060	0,085	0,126	0,152	0,195	0,241	0,285
37	0,057	0,079	0,102	0,132	0,172	0,199	0,228
40	0,061	0,081	0,123	0,157	0,189	0,249	0,291
43	0,071	0,090	0,127	0,158	0,185	0,243	0,250

2. Исследование природы осадков, образующихся на аноде

Часть обработки экспериментальных данных заключалась в построении зависимостей потенциала максимума кривой от корня квадратного либо натурального логарифма скорости развертки потенциала при различных температурах, представленных на рис. 3. Данные по графикам сведены в табл. 2 и 3.

Таблица 2

Потенциалы анодных максимумов в зависимости от температуры

Температура, °С	$\varphi_{отн}$,·В						
	0,001 В/с	0,002 В/с	0,005 В/с	0,01 В/с	0,02 В/с	0,05 В/с	0,1 В/с
22	0,171	0,178	0,182	0,197	0,216	0,240	0,261
25	0,163	0,177	0,184	0,188	0,198	0,216	0,245
30	0,163	0,172	0,186	0,197	0,213	0,236	0,246
33	0,160	0,174	0,177	0,190	0,191	0,207	0,222
34	0,163	0,180	0,188	0,192	0,208	0,224	0,232
35	0,164	0,166	0,184	0,198	0,209	0,234	0,234
36	0,154	0,166	0,183	0,193	0,203	0,227	0,228
37	0,165	0,179	0,181	0,190	0,208	0,223	0,228
40	0,149	0,158	0,181	0,189	0,200	0,220	0,227
43	0,151	0,163	0,177	0,187	0,198	0,218	0,218

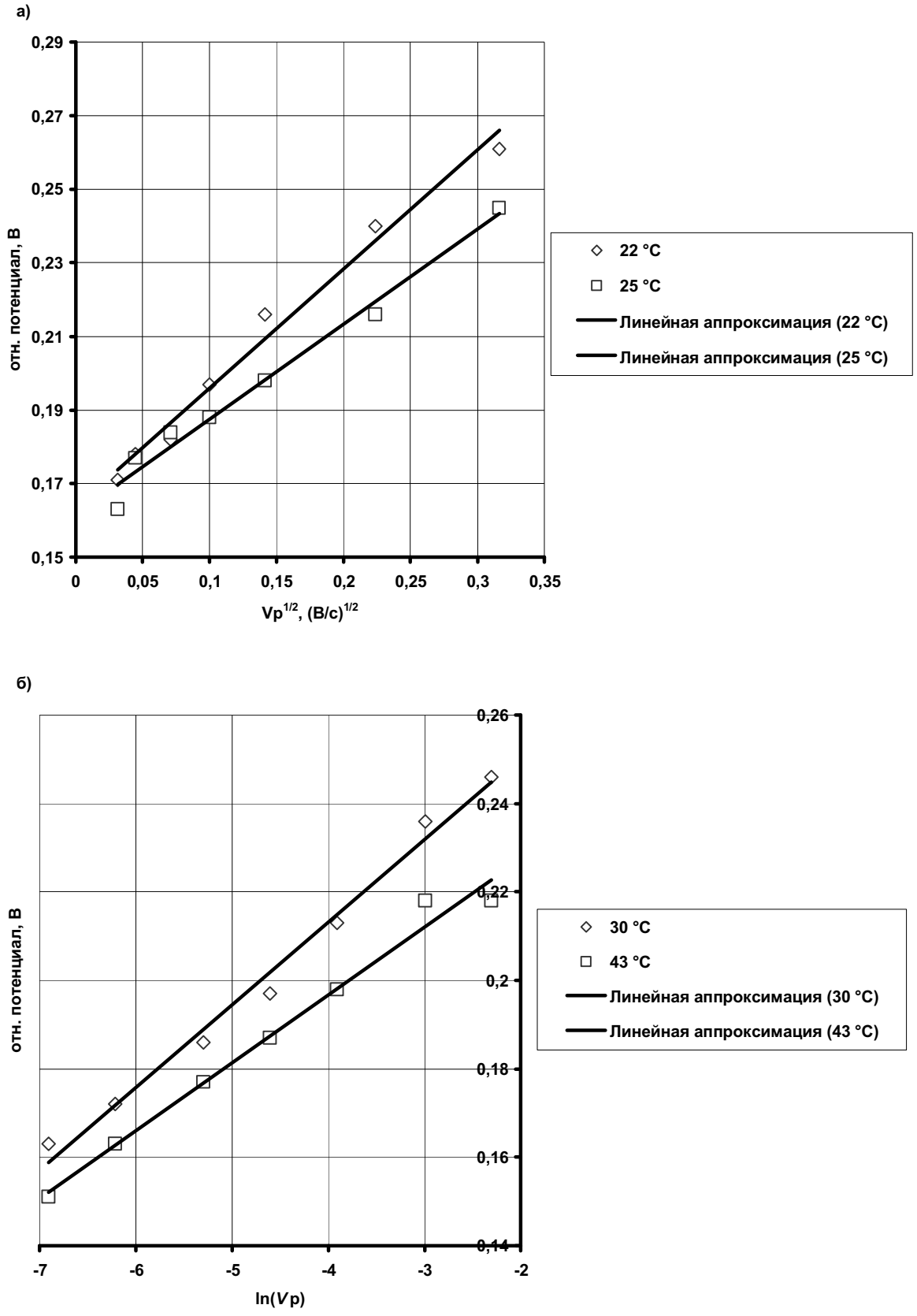


Рис. 3. Зависимость отн. потенциала анодного мах от корня квадратного из скорости развертки (а), либо от натурального логарифма скорости развертки потенциала(б) в температурном ряду 22…43 °С

Таблица 3

Аппроксимирующие зависимости $\varphi_{отн} - (Vp)^{1/2}$ и $\varphi_{отн} - \ln(Vp)$ для различных температур

Температура, °С	Аппроксимирующее уравнение зависимости $\varphi_{отн} - (Vp)^{1/2}$	Аппроксимирующее уравнение зависимости $\varphi_{отн} - \ln(Vp)$
22	$y = 0{,}3245x + 0{,}1634$ $R^2 = 0{,}9836$	$y = 0{,}0197x + 0{,}2973$ $R^2 = 0{,}9396$
25	$y = 0{,}2595x + 0{,}1614$ $R^2 = 0{,}9793$	$y = 0{,}0156x + 0{,}2677$ $R^2 = 0{,}9135$
30	$y = 0{,}2928x + 0{,}163$ $R^2 = 0{,}9404$	$y = 0{,}0187x + 0{,}2879$ $R^2 = 0{,}9881$
33	$y = 0{,}1953x + 0{,}1628$ $R^2 = 0{,}9418$	$y = 0{,}0123x + 0{,}2453$ $R^2 = 0{,}9606$
34	$y = 0{,}2254x + 0{,}1682$ $R^2 = 0{,}9117$	$y = 0{,}0145x + 0{,}2651$ $R^2 = 0{,}9794$
35	$y = 0{,}2635x + 0{,}1635$ $R^2 = 0{,}8852$	$y = 0{,}0172x + 0{,}2776$ $R^2 = 0{,}9732$
36	$y = 0{,}2549x + 0{,}1596$ $R^2 = 0{,}8728$	$y = 0{,}0169x + 0{,}2711$ $R^2 = 0{,}9863$
37	$y = 0{,}2186x + 0{,}1673$ $R^2 = 0{,}9103$	$y = 0{,}014x + 0{,}2608$ $R^2 = 0{,}9645$
40	$y = 0{,}2644x + 0{,}1541$ $R^2 = 0{,}8804$	$y = 0{,}0175x + 0{,}2696$ $R^2 = 0{,}9923$
43	$y = 0{,}2308x + 0{,}1568$ $R^2 = 0{,}8609$	$y = 0{,}0154x + 0{,}2582$ $R^2 = 0{,}9854$

Как видно из графиков а, б рис. 3 и таблиц (соотношение коэффициентов корреляции R^2), полученные зависимости говорят о том, что в интервале температур 22…30 °С линейна зависимость $\varphi_{отн} - (Vp)^{1/2}$, а в интервале 30…43 °С – $\varphi_{отн} - \ln(Vp)$. Следовательно, до температуры 30 °С образующийся при потенциале максимума анодный осадок имеет фазовую природу, после – адсорбционную [5].

Литература

1. Wightman Mark R. Voltammetry with Microscopic Electrodes in New Domains // Science. – 1988. – V. 240. – P. 415–419.

2. Иванов Е.И., Рябухин А.Г., Шарлай Е.В. Новый микроэлектрод для электрохимических исследований // Вторая международная научно практическая конференция «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности»: Тез. докл. – СПб., 2006. – Т. 5. – С. 236–237.

3. Видмецкая М.В. Электрохимическое поведение меди в щелочных растворах // Дипломный проект. – Челябинск. – 1993. – 96 с.

4. Химическая энциклопедия. – М.: Изд-во «Советская энциклопедия», 1988. – 623 с.

5. Новосельский И.М., Менглишева Н.Р. Метод вольтамперометрии многостадийного процесса пассивации металлов // Электрохимия. – 1981. – Т. 17. – С. 1621.

Поступила в редакцию 9 октября 2006 г.

УДК 541.183.57:546.3

КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ ГИДРОГЕЛЕЙ ОКСИГИДРОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА (III), ЦИРКОНИЯ (IV) И ХРОМА (III)

Ю.П. Семушина, С.И. Печенюк

Изучено влияние сорбированных анионов HPO_4^{2-} и $H_2AsO_4^-$ на кислотно-основные свойства поверхности оксигидроксидов Fe(III), Cr(III) и Zr(IV) с pH осаждения 9. Кислотно-основные свойства поверхности характеризовали величиной pH точки нулевого заряда ($pH_{ТНЗ}$). $pH_{ТНЗ}$ определяли потенциометрическим титрованием по методу Паркса. Установлено, что сорбция HPO_4^{2-}-иона приводит к повышению pHтнз, а сорбция $H_2AsO_4^-$ – напротив, к значительному ее понижению. Нагревание в растворах NaCl и Na_2SO_4 воздействует на оксигидроксиды с сорбированными анионами слабее, чем просто на свежеосажденные гидрогели.

Введение. Кислотно-основные свойства поверхности адсорбентов можно выражать величиной pH точки нулевого заряда ($pH_{ТНЗ}$). Это является обычной практикой в работах зарубежных ученых: в любой статье по вопросам адсорбции адсорбент, помимо величины удельной поверхности, характеризуется величиной $pH_{ТНЗ}$, например, [1]. Известно, что величины $pH_{ТНЗ}$ коррелируют с величинами констант кислотно-основной диссоциации поверхностных ОН-групп [1, 2]. По изменению $pH_{ТНЗ}$ можно, следовательно, судить об изменениях кислотно-основных свойств поверхности оксигидроксида. Ранее мы определили величины $pH_{ТНЗ}$ ряда оксигидроксидов, свежеосажденных и подвергнутых разного рода обработке [3–5]. Здесь изучено влияние адсорбированных фосфат- и арсенат-ионов на кислотно-основные свойства поверхности гидрогелей оксигидроксидов железа (III), циркония (IV) и хрома (III).

Эксперимент. Исходные гели готовили, как описано ранее [3, 4]. Использовали только одно значение pH осаждения – 9. Это значение ранее широко использовалось нами в сорбционных исследованиях и в то же время близко к необходимому для получения образцов с $pH_{ТНЗ}$, близким к истинному, т.е. не зависящему от концентрации электролита в растворе [3]. Для получения образцов для титрования с сорбированным анионом проводили сорбцию фосфат (HPO_4^{2-})- и арсенат-($H_2AsO_4^-$) ионов, с последующей троекратной отмывкой геля от маточного раствора с помощью центрифуги. Величина сорбции как арсената, так и фосфата составляла ~1,1 ммоль/г геля. Полученные таким образом гидрогели репульпировали в воде и разбавляли в мерной колбе до 50 мл. Образцы либо сразу же титровали, либо предварительно подвергали старению в течение 18 часов при температуре 96 °С в 1М растворе NaCl или в 0,5М растворе Na_2SO_4 с последующей троекратной отмывкой от маточного раствора с помощью центрифуги (одинаково для всех образцов). Дополнительными опытами было установлено, что при старении десорбции анионов сорбата с поверхности гелей не происходит. Для этого в течение старения из системы отбирали пробы и анализировали на содержания фосфат- или арсенат-ионов.

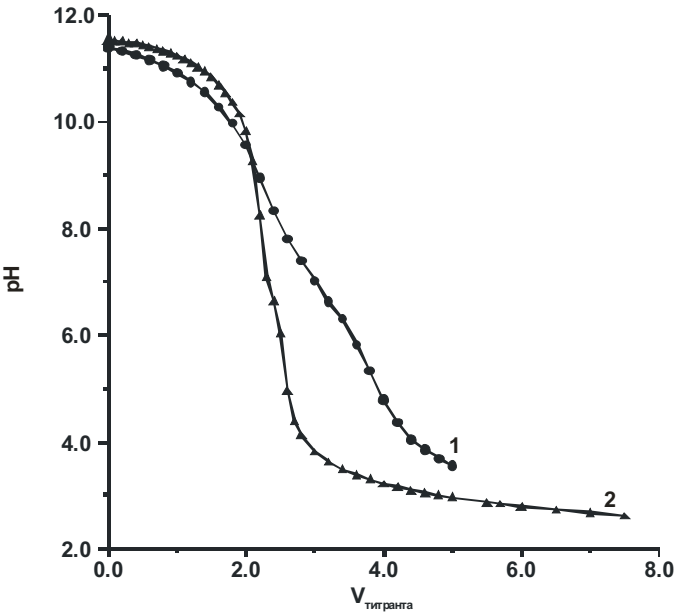


Рис. 1. Пример кривой титрования Fe-геля, состаренного в 1,0 М NaCl, среда 0,5 М NaCl: 1 – кривая титрования Fe-геля; 2 –«холостой» опыт

Точку нулевого заряда определяли по методу Паркса [6]. Для потенциометрического титрования использовали кварцевую ячейку полуоткрытого типа и иономер И-160М со стеклянным электродом ЭСЛ-43-07СР и вспомогательным электродом ЭСр-10103, погруженными в реакционную смесь. Для приготовления раствора фонового электролита брали соответствующие аликвоты раствора NaCl (4 М), чтобы в конечном объеме (200 мл) получить концентрацию 0,5 и 1,0 М. Гель и раствор электролита синхронно продували аргоном для удаления растворенного CO_2 до установления постоянного значения pH. Затем суспензию вносили в раствор электролита. Для установления первоначального значения pH добавляли строго определенное и во всех случаях для данной серии образцов одинаковое количество раствора безкарбонатной щелочи (1 или 2 мл 0,1–0,25 N NaOH) и титровали суспензию соляной кислотой (0,1 N), с интервалом 0.1 мл/2 мин. Каждому эксперименту по титрованию образца геля соответствовал «холостой» опыт титрования раствора электролита в тех же условиях. Величину $pH_{ТНЗ}$ находили графическим путем, как точку пересечения графиков зависимости $pH_{сусп}$ *vs* $V_{титранта}$ и $pH_{эл}$ *vs* $V_{титранта}$. Полученные результаты представлены в табл. 1, 2; примеры кривых титрования – на рис. 1–4. Для сравнения приведены соответствующие данные для гидрогелей без сорбированных анионов.

Результаты. Из приведенных таблиц видно, что сорбция анионов и выдержка свежеосажденных гидрогелей в растворах хлорида и сульфата натрия приводит для каждого изученного гидрогеля к несколько отличным результатам.

Таблица 1

$pH_{ТНЗ}$ гидрогелей с pH осаждения 9, фон 0,5 М NaCl

Условия получения геля	Разновидность гидрогеля		
	Fe-гель	Zr-гель	Cr-гель
Без сорбированного аниона			
Свежеосажденный	9,00	8,10	9,05
Состарен в NaCl	9,30	4,20	8,75
Состарен в Na_2SO_4	9,80	6,45	8,95
С сорбированным фосфат-ионом			
Свежеосажденный	9,68	8,85	10,25
Состарен в NaCl	8,65	8,55	9,75
Состарен в Na_2SO_4	9,50	8,65	10,28
С сорбированным арсенат-ионом			
Свежеосажденный	6,85	5,35	8,15
Состарен в NaCl	6,85	6,35	8,35
Состарен в Na_2SO_4	6,55	6,10	7,85

Таблица 2

$pH_{ТНЗ}$ гидрогелей с pH осаждения 9, фон 1,0 М NaCl

Условия получения геля	Разновидность гидрогеля	
	Fe-гель	Zr-гель
Без сорбированного аниона		
Свежеосажденный	8,65	9,00
Состарен в NaCl	9,20	6,40
Состарен в Na_2SO_4	10,00	6,30
С сорбированным фосфат ионом		
Свежеосажденный	9,05	8,40
Состарен в NaCl	7,64	8,10
Состарен в Na_2SO_4	8,90	8,00
С сорбированным арсенат-ионом		
Свежеосажденный	6,40	4,90
Состарен в NaCl	8,68	5,80
Состарен в Na_2SO_4	8,39	5,70

Сорбция гидрофосфат-ионов приводит в случае всех трех гелей к существенному повышению pHтнз в среде 0,5 М NaCl и к относительно небольшим изменениям в среде 1,0 М NaCl (см.

табл. 1, 2), а сорбция дигидроарсенат-ионов, напротив, к существенному снижению $pH_{ТНЗ}$. Следует отметить, что сорбированные HPO_4^{2-} и $H_2AsO_4^-$ анионы занимают около 60 % и 30 % имеющихся на поверхности гидрогелей монодентатных сорбционных центров, содержание которых было оценено нами в 3,0÷3,5 ммоль-центров/г [7], и каждый анион HPO_4^{2-} занимает 2 центра, а $H_2AsO_4^-$ – соответственно один центр. Итак, в результате сорбции фосфат-ионов свежеосажденными гелями их $pH_{ТНЗ}$ возрастает на 0,7 – 1 ед. pH, т.е. область положительного заряда образцов расширяется, поскольку фосфат-ионы вносят дополнительный отрицательный заряд, что увеличивает способность поверхности сорбировать протоны. Несмотря на то, что фосфат- и арсенат-ионы являются очень близкими аналогами, они по-разному влияют на свойства поверхности. Вероятно, имеет большое значение то, что мы имели дело с дигидроарсенатом, но с гидрофосфатом. Дигидроарсенат вносит на поверхность значительно меньший отрицательный заряд, и сам менее склонен присоединять протоны, чем гидрофосфат, а возможно, даже склонен диссоциировать с отщеплением протонов, в результате чего сорбированный дигидроарсенат подкисляет поверхность.

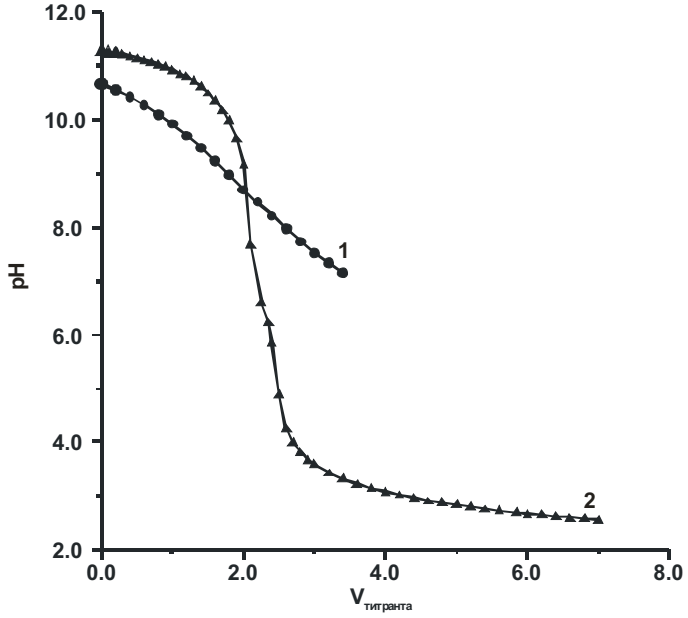


Рис. 2. Пример кривой титрования Fe-геля с сорбированным фосфат-ионом, состаренного в 1,0 М NaCl, среда 0.5 М NaCl: 1 – кривая титрования Fe-геля; 2 – «холостой» опыт

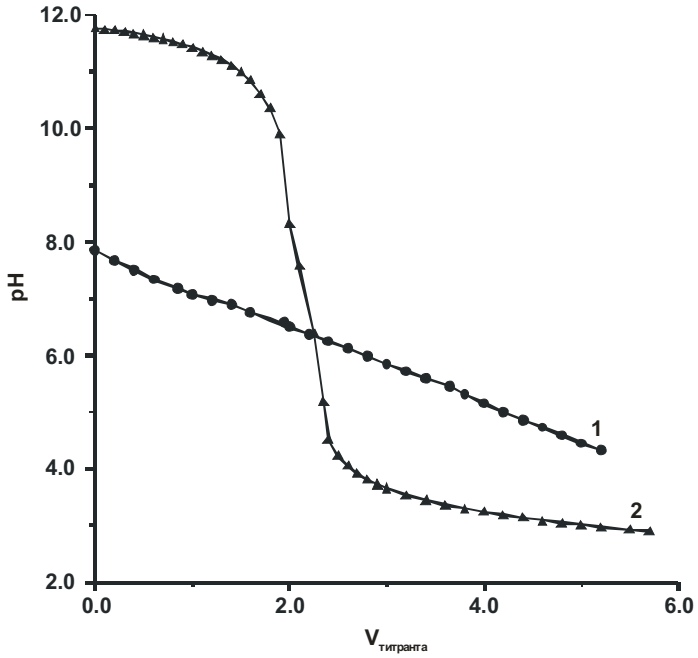


Рис. 3. Пример кривой титрования Zr-геля с сорбированным арсенат-ионом, состаренного в 1,0 М NaCl, среда 0,5 М NaCl: 1 – кривая титрования Zr-геля; 2 – «холостой» опыт

Выдержка в среде электролита при нагревании приводит для гелей с сорбированным гидрофосфат-ионом к незначительному снижению pHтнз при обеих концентрациях фонового электролита. Для гелей с сорбированным дигидроарсенат-ионом аналогичная выдержка, в подавляющем большинстве случаев, приводит к некоторому повышению $pH_{ТНЗ}$.

Ранее мы показали [8], что такая обработка для цирконогеля приводит к потере молекулы воды, образованию цирконила и полимерных форм, что, естественно, приводит к ослаблению основных и усилению кислотных свойств оксигидроксида. Для хромогеля, который при той же обработке сохраняет состав $Cr(OH)_3$ [9], кислотно-основные свойства почти не изменяются. В дальнейшем у хромо- и феррогелей имеет место однотипное поведение, а поведение цирконогеля значительно отличается.

Обработка раствором хлорида натрия при нагревании приводит к более сильному снижению $pH_{ТНЗ}$ феррогеля, чем обработка раствором сульфата натрия. Хромогель, как и в других случаях, реагирует на обработку слабо, но так же слабо реагирует на нее и цирконогель, его кислотно-основные свойства

как бы стабилизируются. Возможно, имеет место образование слоя фосфата циркония на поверхности. Видно (см. рис. 1), что в результате старения кривая титрования феррогеля без сорбированного фосфата очень похожа на кривые титрования кристаллических оксигидроксидов, Действительно, ранее [9] было показано, что феррогель в этих условиях в значительной степени кристаллизуется с образованием гематита. Феррогель же с сорбированным фосфатом, состаренный в тех же условиях, дает кривую титрования, типичную для гелей (см. рис. 2).

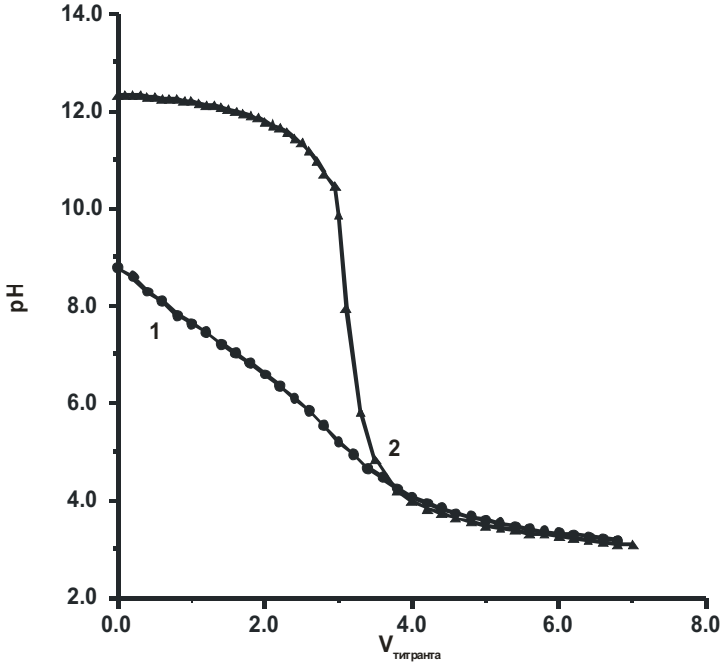


Рис. 4. Пример кривой титрования Zr-геля состаренного в 1,0 M NaCl, среда 0,5 M NaCl:
1 – кривая титрования Zr-геля; 2 – «холостой» опыт

У всех трех оксигидроксидов $pH_{ТНЗ}$ за счет сорбции $H_2AsO_4^-$ образцы затем почти не реагируют на дальнейшую обработку электролитами при титрование в 0,5 М растворе NaCl. При титрование в 1,0 М NaCl, напротив, в результате обработки растворами NaCl и Na_2SO_4 $pH_{ТНЗ}$ возрастает для феррогелей примерно на 2 ед. pH, а для цирконогелей – 0,8–0,9 ед. pH. Сорбированный дигидроарсенат как бы оказывает защитное действие на оксигидроксиды (см. табл. 1, 2).

На рис. 3 видно, что, хотя $pH_{ТНЗ}$ цирконогеля в результате старения сильно понизился, но вид кривой титрования типичен для гелей, тогда как цирконогель без сорбированного арсената, состаренный таким же образом, имеет кривую титрования, близкую к кривым титрования кристаллических оксигидроксидов (рис. 4).

Следует заметить также, что старение всех описанных образцов в сульфатном электролите приводит к гораздо меньшим изменениям, чем старение в присутствие хлорид-ионов.

Выводы. Итак, сорбированные гидрофосфат-ионы несколько повышают $pH_{ТНЗ}$ гидрогелей оксигидроксидов железа (III), хрома (III) и циркония (IV) (на 0,7–1,2 ед. pH в среде 0.5 M NaCl). Сорбированные дигидроарсенат-ионы, напротив, снижают $pH_{ТНЗ}$ (на 2,0–4,0 ед. pH). И те и другие сорбированные анионы делают величины $pH_{ТНЗ}$ более стабильными по отношению к концентрации электролита и старению в растворе электролита при нагревании.

Литература

1. Hiemstra T., van Riemsdijk W.H. // J. Colloid and Interface Sci. – 1996. – V. 179. – P. 488–508.

2. Печенюк С.И. // Успехи химии. – 1992. – Т. 61. – № 4. – С. 711–733.

3. Печенюк С.И. // Изв. АН. Серия хим. – 1999. – № 2. – С. 229.

4. Печенюк С.И., Матвеенко С.И. // Изв. АН. Серия хим. – 2000. – № 8. – С. 1329–1332.

5. Печенюк С.И. Сорбционно-гидролитическое осаждение платиновых металлов на поверхности неорганических сорбентов. – Л.: Наука, 1991. – 246 с.

6. Parks G.A., de Bryun P.L. // J. Phys. Chem. – 1962. – V. 66. – P. 967.

7. Печенюк С.И., Семушина Ю.П., Кузьмич Л.Ф. // Изв. АН. Серия хим. – 2005. – № 8. – С. 1736.

8. Печенюк С.И., Кузьмич Л.Ф., Михайлова Н.Л. // Журн. неорган. химии. – 2003. – Т. 48. – № 9. – С. 1420–1425.

9. Печенюк С.И., Кузьмич Л.Ф., Макарова Т.И., Михайлова Н.Л. // Журн. неорган. химии. – 2003 – Т. 48. – № 8. – С. 1255–1265.

Поступила в редакцию 3 октября 2006 г.

УДК: 544.725 + 544.431.8

СТОХАСТИЧЕСКИЙ ШУМ КАК ОТРАЖЕНИЕ КОНФОРМЕРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ МАКРОМОЛЕКУЛ ОКСИГИДРАТА ЦИРКОНИЯ

Ю.И. Сухарев, Т.Г. Крупнова, А.Ю. Орлова

В настоящей работе рассмотрены отображения первого и второго возвращения гелевой системы оксигидрата циркония, являющиеся отражением конформерных взаимодействий и перестроек поляризованных ДЭС гелевых фрагментов. Выделены основные типы отображений гелей оксиграта циркония, формирующиеся в течение пятидесяти суток. Обнаружена геометрия стохастической паутины, которая близка к геометрии периодической стохастической паутины, рассчитанной в литературе теоретически. Установлена сложная фрактальная структура стохастической паутины оксигидрата циркония.

Введение

В предыдущих работах при регистрации импульсного микроэлектротока в электрохимической ячейке было обнаружено возникновение стохастического шума в гелевой системе оксигидрата циркония [1, 2]. Вероятно, оно является отражением действующих сил вязкого трения в макросистеме.

Было показано, что конформерные взаимодействия, которые в гелях (в пересчете на моль матрицеобразующего элемента) исчисляются десятками тысяч [1], и перестройки поляризованных ДЭС макромолекул оксигидратных фрагментов, служат толчком для высвобождения или, наоборот, связывания ионных потоков в геле. Это создает на платиновых электродах разность потенциалов. При этом в проводниках первого рода измерительной системы возникает электрический ток [2]. Изучение данного явления представляет огромный интерес.

Экспериментальная часть

Электролитическая ячейка регистрации тока состояла из полой стеклянной трубки, на концах которой были закреплены круглые платиновые электроды (R = 0,4 см), и электронного блока, регистрирующего изменения тока на электродах. Ячейку со свежеприготовленным гелевым оксигидратом помещали в термостат. Расстояние между электродами варьировали от 1 до 70 мм. Продолжительность эксперимента составляла 8 часов, частота опроса 5 Гц. Для предотвращения искажения результатов измерений внешним электромагнитным фоном ячейку с гелем и подводящие токовые шины экранировали [3].

Образец геля оксигидрата циркония готовили следующим образом. В лабораторную ёмкость на 20 л наливали 1698 мл раствора $ZrOCl_2 \cdot 8H_2O$ (0,94 М), к нему добавляли 3400 мл дистиллированной воды. При перемешивании с постоянной скоростью в систему по каплям вводили раствор NH_4OH (1:9) в количестве 7800 мл. В процессе синтеза контролировали pH раствора и доводили его до заданного значения (pH = 9,25). После установившегося значения pH слабое перемешивание не прекращали в течение 50 суток. Все процессы термостатировали при t = 30,0 °С (с ошибкой ± 0,1 °С).

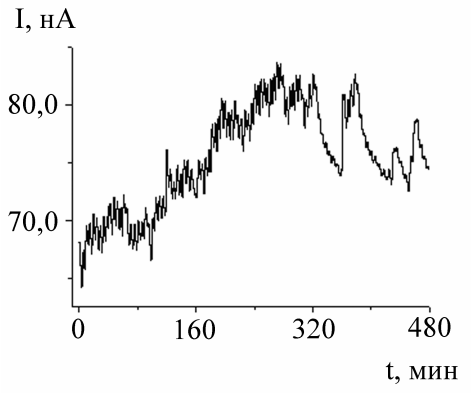


Рис. 1. Кинетика тока гелевой системы оксигидрата циркония

Результаты экспериментов и их обсуждение

С помощью вышеупомянутого прибора были получены кинетические кривые токовых выплесков гелевой системы. Одна из характерных кривых тока показана на рис. 1.

По данным экспериментальным зависимостям были построены отображения первого и второго возвращения. Отображения содержат по 144 000 точек (время эксперимента 8 часов, частота опроса 5 раз в секунду). Отображения носят как регулярный (рис. 2а, б), так и хаотический характер (рис. 2в, 2г). Можно выделить следующие основные типы стохастических проявлений (точечное зачернение рисунка) в гелевой системе: 1) стохастическое море [4] (рис. 3); 2) линейные участки, окруженные стохастическим слоем (рис. 4а); 3) сэндвичевые (плоскостные) перемежающие структуры (рис. 4б); 4) сложная пространственная паутина (рис. 7).

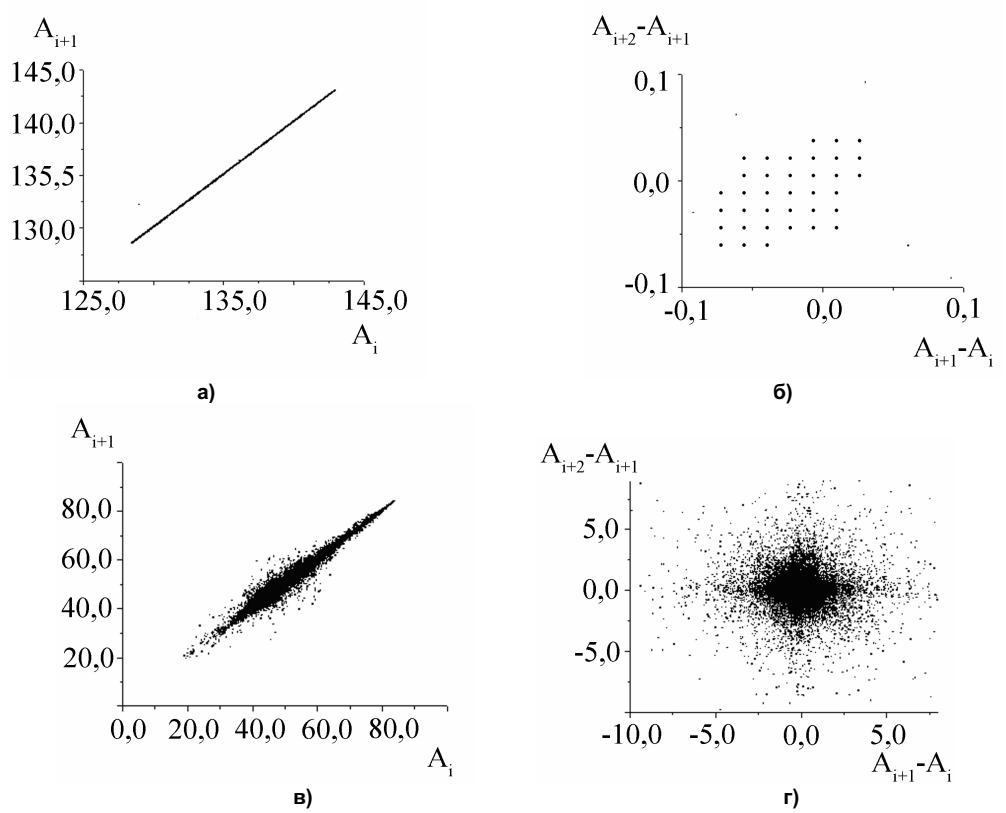


Рис. 2. Регулярный (а, б) и хаотический (в, г) характер отображений. Отображения первого (а, в) и второго возвращения (б, г). Образцы синтезированы при pH = 9,25, n_{ZrO2} = 0,0094 моль. Возраст геля 35 суток (а, б), 42 суток (в, г)

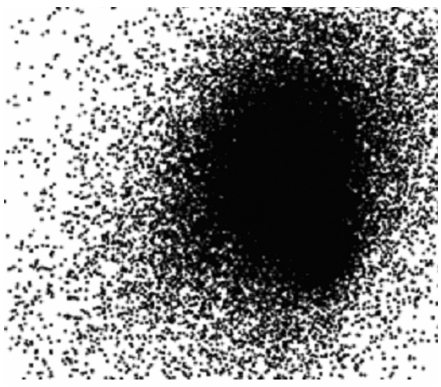
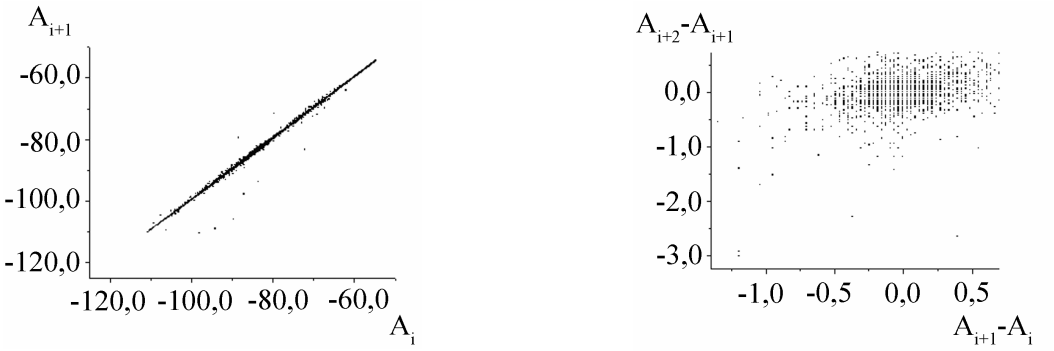


Рис. 3. Стохастическое море гелевой системы оксигидрата циркония

На рис. 5 представлена геометрия неких точечных множеств. Представленные конструкции очень напоминают предельное L множество, которое является совокупностью окружностей [5]. Эти множества похожи на дракон Сан-Марко – самоквадрируемое множество, основанное на двух инверсиях отображения $x \to 3x(1-x)$. То есть данное множество образуется в результате инверсных отображений токовых выплесков гелевой системы практически в одну точку, точнее в узкую область пространства.

На представленных рисунках отображения первого возвращения демонстрируют фактически линейные зависимости в координатах $A_{i+1} = A_i$. Однако эти прямые окружены стохастическими слоями нелинейного резонанса. Уравнение движения точек, описывающих орбиты в сечении Пуанкаре, можно записать так [4, 6]:

$$H = \frac{1}{2I^2} - K\cos\theta \sum_{m=-\infty}^{\infty} \cos(mvt), \qquad (1)$$



а) б)

Рис. 4. Линейные участки, окруженные стохастическим слоем. Отображения первого (а) и второго (б) возвращения. Образцы синтезированы при pH = 9,25, n_{ZRO2} = 0,0094 моль; возраст геля 10 суток

$$K = \left| \frac{\delta\bar{\varphi}}{\delta\varphi} - 1 \right|,$$

где H – гамильтониан системы, I – действие, δ-функция. Поскольку возмущение является периодической функцией времени, то фаза возмущения записывается:

$$\varphi = vt + \text{const}.$$

Уравнение движения имеет вид

$$I = -K\sin\theta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{t}{T} - n\right), \theta = I \qquad (2)$$

между двумя δ-функциями. При этом $I = \text{const}$, $\theta = It + \text{const}$. Принимаем, что (I, θ) – значения переменных непосредственно перед n-м толчком конформационного возмущения (или конформационной перестройки), $\bar{\theta}$, $\bar{I}$ – значения перед следующим $(n+1)$ толчком, то из (2) следует отображение

$$\bar{I} = I - K\sin\theta\,,\ \bar{\theta} = \theta + \bar{I}\,, \qquad (3)$$

которое эквивалентно уравнению (2).

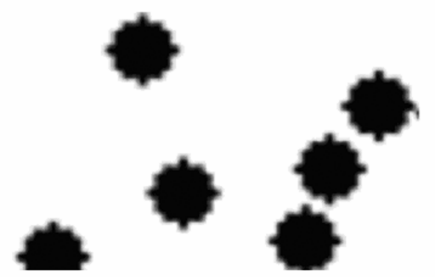


Рис. 5. Геометрия точечных множеств токовых выплесков

Анализ уравнений, свидетельствует о том, что выполненные нами эксперименты и анализ полученных эффектов электрических выплесков в гелевых оксигидратных системах не противоречат концепции слабого хаоса в квазирегулярных системах, развитой Г.М. Заславским и Р.З. Сагдеевым с соавторами в монографии [4]. Таким образом, оксигидратные гели – это квазирегулярные системы.

Интересны случаи малых возмущений в гелевой системе, когда $K \ll 1$. Несмотря на кажущуюся простоту уравнения (3) оно является очень сложным. Фазовые портреты следует рассматривать на торе с попарно склеенными правой и левой, а также верхней и нижней сторонами квадрата.

На приведенных экспериментальных рисунках сепаратрисы разрушены, а на их месте образованы стохастические слои. Вероятно внутри стохастического слоя (см. рис. 4а) и, особенно по краям его, располагается семейство вложенных друг в друга инвариантных кривых. На рисунках они практически не видны, вследствие ограниченного числа экспериментально сканированных точек. Вне главного стохастического слоя имеется ожерелье сепаратрисных ячеек с узкими стохастическими слоями. Эти сепаратрисные ячейки располагаются в дырах (светлых областях) стохастических областей. Дыры соответствуют нелинейным резонансам различных порядков. Между резонансами находятся инвариантные кривые, охватывающие тор. Поэтому фазовый портрет напоминает сэндвич с бесконечным числом чередующихся инвариантных кривых и стохастических слоев. Увеличение параметра K приводит к расширению стохастического слоя и, начиная с критического значения K_c, стохастические слои соединяются, образуя «стохастическое море» (см. рис. 3).

В работе [6] показано, что стохастичность является практически универсальным свойством динамических систем. В общем случае области хаоса в гелевых системах представляются достаточно узкими. Дальнейшая жизнь стохастических траекторий в гелевой системе определяется тем, как эти области хаоса взаимодействуют между собой, иначе говоря, топологией слабого хаоса в фазовом пространстве. Объединение всех стохастических слоев в фазовом пространстве может образовать единую пространственную сетку, которая называется стохастической паутиной. По паутине возможно сколь угодно далекое блуждание частиц и, как отмечают Г.М. Заславский и Р.З. Согдеев, это означает качественно новые характеристики хаоса. Во-первых, они обнаруживаются в качественно новых проявлениях неустранимой диффузии в реальных гелевых системах, отражением которых является фазовое пространство. Например, обнаружено периодическое изменение неких приведенных коэффициентов диффузии ионов [7] во времени в гелях $SiO_2 \cdot H_2O$ (диффузия Арнольда). Другое важное свойство гелей связано с геометрией паутины.

Фазовый портрет стохастической паутины выглядит как система инвариантных П-торов внутри ячеек паутины. Сама паутина имеет свойства стохастичности, конечную толщину и внутри нее динамика взаимодействующих макромолекул также стохастическая.

Изменения, происходящие в геометрии паутины, вызываются переходом КАМ-торов в П-торы [4]. Тип паутины, представленной на рис. 6 называется равномерной. Для нашего случая гелевых оксигидратных систем характерно отображение с подкручиванием (на угол α), которое записывается следующим образом [4]:

$$\widehat{M}_\alpha : \begin{cases} \overline{u} = (u + K_0 \sin v)\cos\alpha + v\sin\alpha, \\ -(u + K_0 \sin v)\sin\alpha + v\cos\alpha, \end{cases}$$

где индексы n и $(n+1)$ опущены и обозначено:

$$K_0 = K/\alpha \; ; \; u = kv_x/\omega_0 \; ; \; v = kv_y/\omega_0 = -kx,$$

где K – некоторая константа, характеризующая условия перехода системы к хаосу, v_x, v_y – проекции скоростей перемещающейся коллоидной частицы после n-толчка (бифуркации с появлением выплеска электротока в нашем случае), k – волновая постоянная. Данное отображение позволяет проанализировать резонансные условия, которые возникают, когда за один период колебаний осциллятора $2\pi/\alpha$ происходит целое число толчков q. Условием возникновения резонанса является следующее:

$$2\pi/\alpha = q$$

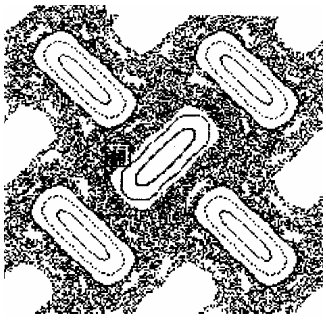


Рис. 6. Стохастическая паутина Детали фазового портрета отображения $\widehat{M}_4$: часть паутины при $K_0 = 2$, размер квадрата $4\pi \times 4\pi$ (а) [4]

Оно эквивалентно уравнению:

$$q\omega_0 = 2\pi/T \, .$$

Если положить для частоты возмущения $v = 2\pi/T$, то отображение $\widehat{M}_q$ получается из отображения $\widehat{M}_\alpha$. При этом резонанс возникает при целочисленных значениях $q = 1, 2, 3, 4$. Начиная с $q \geq 2$, система уже не является интегрируемой, и ее анализ усложняется.

На фазовой плоскости, например, отображения $\widehat{M}_4$ возникает периодическая паутина (рис. 8в), внутри ячеек которой основная часть семейства орбит представляет собой замкнутые периодические траектории, являющиеся сечениями инвариантных торов и которые могут быть не видны. Узкие стохастические слои отделены друг от друга инвариантными кривыми (орбитами) и поэтому значительного диффузионного продвижения перпендикулярно слоям, то есть возрастание энергии, невозможно.

Сложная фрактальная структура стохастической паутины представлена на рис. 7 и рис. 8. Эта паутина близка к квадратным ячейкам, которые выстраиваются в сэндвичевые плоскостные образования. Возмущения, возникающие в данной оксигидратной системе, приводят к слабой периодической ее модуляции на фазовой плоскости. Эта модуляция разрушает сепаратрисы с образованием периодической стохастической паутины. На рис. 8 показаны увеличенные фрагменты экспериментальной стохастической паутины и фазовый портрет расчетной периодической паутины [4] с симметрией квадратной решетки.

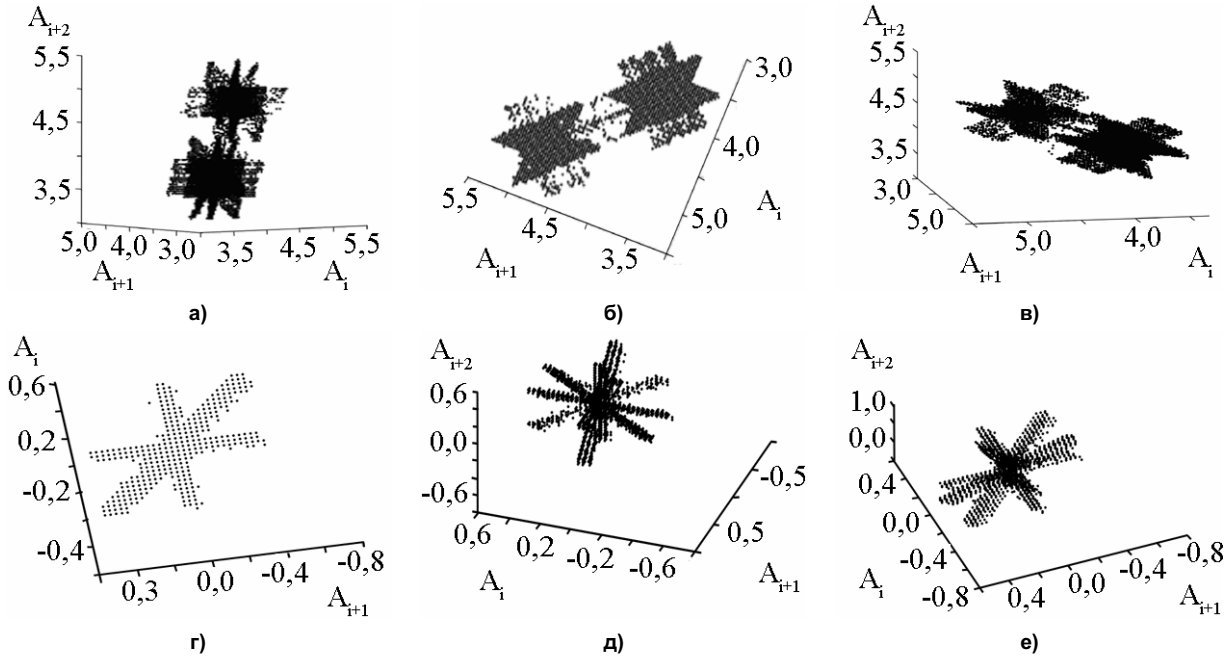


Рис. 7. Фрактальный характер стохастической паутины:
а, б, в – возраст геля 17 суток (разные проекции): г, д, е – возраст геля 36 суток (разные проекции)



Рис. 8. Увеличенные фрагменты экспериментальной стохастической паутины рис.1 (а, б) и фазовый портрет расчетной периодической паутины (в) [4] с симметрией квадратной решетки (K_0 = 0,7; размер квадрата $24\pi \times 24\pi$)

Заключение

Создана установка регистрации нанотоковых выплесков гелевых оксигидратных систем.

Экспериментально получены отображения первого и второго возвращения по самопроизвольным токовым выплескам гелей оксигидрата циркония, которые являются отражением конформерных взаимодействий и перестроек поляризованных ДЭС макромолекул, при этом в пространстве они выглядят как предельные (точечные) L множества, являющиеся совокупностью окружностей и похожи на дракон Сан-Марко.

Выделены основные типы отображений поведения гелей оксигидрата циркония, формирующиеся в течение пятидесяти суток.

Фазовые портреты гелевой системы напоминает сэндвич с бесконечным числом чередующихся инвариантных кривых и стохастических слоев. Увеличение параметра K приводит к расширению этих стохастических слоев, которые могут соединяться, образуя «стохастическое море».

В гелях оксигидрата циркония обнаружена геометрия стохастической паутины, которая близка геометрии периодической стохастической паутины, рассчитанной в литературе теоретически.

Установлена сложная фрактальная структура стохастической паутины оксигидрата циркония. Увеличенные фрагменты экспериментальной стохастической паутины и фазовый портрет расчетной периодической паутины имеют одинаковую симметрию квадратной решетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ и правительства Челябинской области (грант 04-03-96059).

Литература

1. Сухарев Ю. И., Марков Б. А. Нелинейность гелевых оксигидратных систем. – Екатеринбург: УрО РАН, 2005. – 468с.

2. Sukharev Yu.I., Markov B.A., Prokhorova A.Yu., Lebedeva I.Yu.. Spontaneous pulsating current in zirconium oxyhydrate gels // WSEAS transactions on circuits and systems – Issue 11. – Vol. 4. – November 2005. – P. 1477–1484.

3. Кострюкова А.М., Сухарева И.Ю, Прохорова А.Ю. Ток самоорганизации гелевых оксигидратных систем циркония и иттрия // Новые химические технологии: производство и применение: 6 Всероссийская научно-техническая конф. авг., 2005: Сб. ст. – Пенза, 2005. – С. 50–52.

4. Слабый хаос и квазирегулярные структуры / Г.М. Заславский, Р.З. Сагдеев, Д.А. Усиков, А.А. Черников. – М.: Наука, 1991. – 235 с.

5. Mandelbrot B.B., The Fractal Geometry of Nature, New York: W.H. Freeman and Company, 1982. – P. 282.

6. Chernikov A.A., Natenzon M.Yu., Petrovichev B.A., Sagdeev R.Z., Zaslavsky G.M. // Phys. Lett. – 1987. – V. 122A. – P. 377.

7. Yu.I. Sukharev, V.V. Avdin. Frequency-diffusion characteristics of silicic acid gels // Cross- Disciplinary Applied Research in Materials Science and Technology. Trans tech publications LTD 11. – Vol. 4, October 2003. – P.629–634.

Поступила в редакцию 2 ноября 2006 г.

УДК 541.1

ИЗУЧЕНИЕ МОРФОЛОГИИ МИКРОКРИСТАЛЛОВ КОРУНДА, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ ТЕРМООБРАБОТКЕ ГИББСИТА В ЗАМКНУТОМ ОБЪЕМЕ

А.В. Толчев, Д.Г. Клещев, В.И. Лопушан, Д.Д. Ларин

Методами рентгенографии и атомно-силовой микроскопии исследованы морфология и форма микрокристаллов корунда (α-Al_2O_3), формирующихся в процессе термообработки в замкнутом объеме образцов γ-$Al(OH)_3$ (гиббсит) с заданной степенью дисперсности. Показана возможность получения монокристаллических и монодисперсных микрокристаллов корунда с гексагональной огранкой.

В работах [1–3] был описан эффект инициирующего влияния паров воды, выделяющейся при химических превращениях гидроксидов, на формирование оксидной фазы. В частности, показано, что при термообработке в замкнутом объеме в условиях повышенного парциального давления паров воды, гиббсит (γ-$Al(OH)_3$) в интервале 180–375 °С испытывает превращение в оксигидроксид алюминия модификации бемит, а при более высоких температурах бемит превращается в оксид алюминия модификации корунд(α-Al_2O_3), минуя стадии формирования промежуточных метастабильных полиморфных модификаций Al_2O_3, как это происходит при термообработке на воздухе. Сделано предположение, что превращения гиббсит → бемит и бемит → корунд сопровождаются растворением кристаллов неравновесной фазы, образованием и ростом кристаллов равновесной фазы (механизм «растворение–осаждение»-РО), причем лимитирующей стадией этих превращений может выступать как стадия образования зародышей равновесной фазы, так и массопереноса кристаллообразующего вещества к зародышам.

Исходя из рассматриваемого в [1–3] механизма РО, можно предположить, что микрокристаллы корунда должны иметь форму близкую к равновесной для данной фазы, например, в виде гексагональных монокристаллов с узким распределением по размеру.

Целью данной работы являлось исследование морфологии и формы микрокристаллов корунда, формирующихся в процессе термообработки в замкнутом объеме образцов гиббсита с заданной степенью дисперсности.

Объектами исследования являлись образцы гидроксида алюминия различной степени дисперсности. В качестве исходного использовали технический гидроксид алюминия, который по данным [3–5] характеризуется составом (мас.%): Al_2O_3 – 64,2 ± 0,5; H_2O – 35,5±0,5; Me_2O – 0,4±0,1.

При выполнении работы использовали методы рентгенографии, оптической и атомно-силовой микроскопии. Рентгенографический анализ образцов проводили на дифрактометре ДРОН–3 с использованием фильтрованного CuK_α или CoK_α излучения. Съемку рентгенограмм проводили методом непрерывного сканирования в диапазоне углов дифракции θ от 50 до 500, скорость вращения образца варьировали от 0,25 до 1,0 град/мин. Для определения интегральной интенсивности дифракционных максимумов их сканировали по точкам: шаг сканирования по углу 2θ составлял 0,050; время счета импульсов – 40 с.

Фазовый состав исследуемых образцов определяли путем анализа углового местоположения дифракционных максимумов и их относительных интенсивностей. По формуле Вульфа–Брэгга вычисляли экспериментальные значения межплоскостных расстояний $d_{hkl}^{эксп}$. Погрешности в определении $d_{hkl}^{эксп}$ и относительных интенсивностей $I_{(hkl)_{отн}}^{эксп} = \frac{I_{hkl}^{эксп}}{I_0}$, где $I_{hkl}^{эксп}$ – интегральная интенсивность рефлекса с индексами Миллера (*hkl*); а I_0 – интенсивность самого интенсивного максимума, присутствующего на рентгенограмме дифракционных максимумов, не превышали 1

и 10 %, соответственно. Идентификацию фазового состава образцов проводили исходя из сопоставления набора $d_{hkl}^{эксп}$ и $I_{(hkl)_{отн}}^{эксп}$ с данными [6].

Микроскопические исследования проводили по стандартным методикам, изложенным в инструкции по эксплуатации к приборам. Увеличенное изображение наиболее характерных фрагментов исследованных объектов фотографировали с помощью цифровой видеокамеры.

Для получения образцов корунда использовали специально подготовленную муфельную печь, предварительно нагретую до 450 °С, в которую помещали титановые толстостенные герметично закрывающиеся капсулы с гиббситом, объемом 0,003 дм^3. Полнота загрузки капсул составляла 12,5 % объемных. Время термообработки составляло 6 ч, после чего капсулы вынимали из муфельной печи, охлаждали под струей воды до комнатной температуры и вскрывали. Точность поддержания заданной температуры составляла ±5 °С.

Исходный образец гиббсита характеризуется высокой степенью полидисперсности. Кристаллы имеют таблитчатую (пластинчатую) форму, размером от нескольких единиц или десятков до сотен микрометров в поперечнике (рис. 1). Согласно данным лазерного седиментационного анализа, средний размер частиц образцов составляет ~100 мкм.

Исходный образец подвергали классификации на ситах с диаметром ячеек 100 и 140 мкм. Это позволило получить довольно однородную по размеру фракцию гиббсита с размером частиц от 100 до 140 мкм, которая по данным оптической микроскопии состоит из таблитчатых кристалликов, форма которых близка к округлой или гексагональной (рис. 2).

Рассмотрим полученные экспериментальные данные. На рентгенограммах образцов, полученных в процессе термообработки в замкнутом объеме образцов гиббсита с заданной степенью дисперсности (рис.3), присутствует набор дифракционных максимумов, удовлетворительно идентифицирующихся в рамках гексагональной сингонии, к которой, согласно данным [4–6], относится оксид алюминия α-модификации.

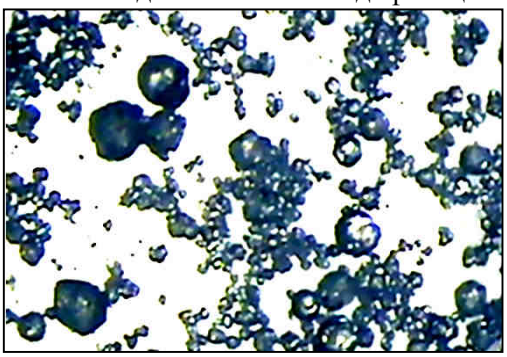


Рис. 1. Микрофотография образца исходного гиббсита, масштаб: 1 см – 150 мкм

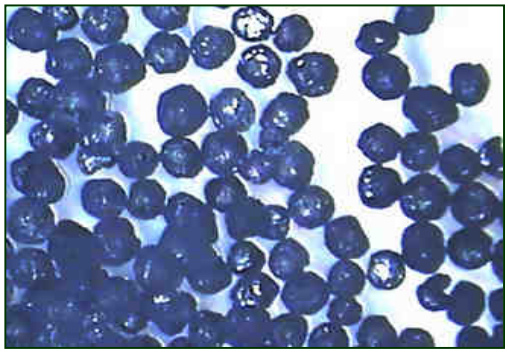


Рис. 2. Микрофотография образца фракции гиббсита 100–140 мкм, масштаб: 1 см – 150 мкм

Методами оптической микроскопии были определены средние размеры формирующихся кристаллов корунда. Так, образец корунда, полученный термообработкой гиббсита фракции 100–

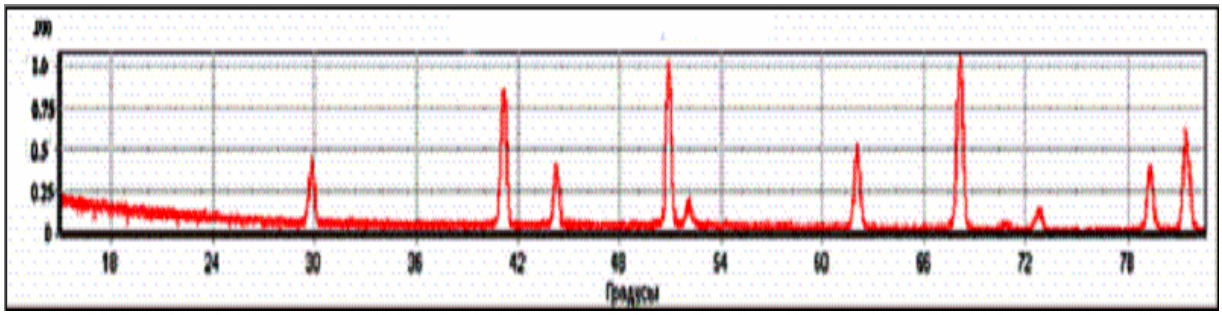


Рис. 3. Фрагмент рентгенограммы образца корунда, полученного термообработкой в замкнутом объеме фракции гиббсита 100–140 мкм. Излучение – Со K_α

140 мкм, представляет собой довольно монодисперсную систему, состоящую из монокристаллов с гексагональной огранкой, средний размер которых составляет ~100 мкм (рис. 4). Для подтвер-

ждения предположения о том, что полученный образец состоит из монокристаллических частиц, были проведены исследования морфологии частиц методом атомно-силовой микроскопии.

На микрофотографии (рис. 5) представлен фрагмент отдельного кристаллика корунда, полученного термообработкой фракции гиббситта 100–140 мкм в замкнутом объеме при 450 °С. Следует отметить, что кристаллик корунда имеет огранку, близкую к гексагональной, отчетливо видны грани и ступени роста. Блочность и мозаичность, межзеренные границы, характерные для поликристаллических тел отсутствуют. Полученные экспериментальные данные позволяют сделать вывод о том, что, действительно формирование корунда в замкнутом объеме осуществляется в рамках механизма «растворение–осаждение» и сопровождаются растворением кристаллов неравновесной фазы, образованием и ростом кристаллов равновесной фазы. Подтверждением этому является гексагональная форма монокристаллических частиц, характерная для структуры корунда [4, 5].

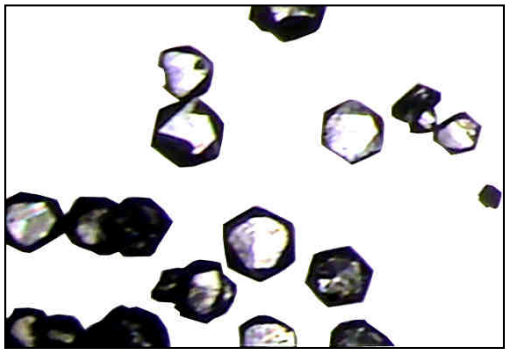


Рис. 4. Микрофотография кристаллов корунда, полученного термообработкой образца фракции гиббсита 100–140 мкм. Масштаб: 1 см – 50 мкм

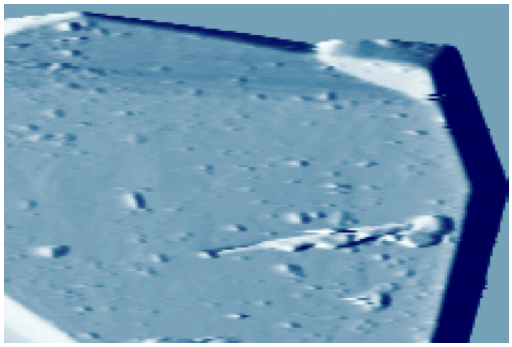


Рис. 5. Фрагмент отдельного кристаллика корунда, полученного термообработкой фракции гиббсита 100–140 мкм. Масштаб: 1 см – 5 мкм

Авторы выражают глубокую благодарность профессору Кундиковой Н.Д. за помощь при проведении исследований методом атомно-силовой микроскопии.

Литература

1. The features of crustal formation during hydrargillite dehydratation in a closed spase / A.V. Tolchev, V.I. Lopushan, D.G. Kleschov et al. // Abstracts of III Internanional conference ICSC–99. Obninsk, Russia. 1999. P. 110.

2. Особенности фазо- и кристаллообразования при дегидратации γ-$Al(OH)_3$ в замкнутом объеме / А.В. Толчев, Д.Г. Клещев, В.И. Лопушан и др. // Тез. докл. IX национальной конференции по росту кристаллов «НКРК-2000». – М., 2000. – С. 621.

3. Толчев А.В., Клещев Д.Г., Лопушан В.И. Химические превращения γ-$Al(OH)_3$ при термообработке в замкнутом объеме // Неорганические материалы. – Т. 37. – № 12. – 2001. – С. 1493–1496.

4. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. В 3 т. Т. 2: Пер. с англ. – М.: Мир. 1987. – 696 с.

5. Годовиков А.А. Минералогия. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Недра, 1983. – 647 с.

6. ASTM. Powder Diffraction File: Search manual fink method inorganic Cards. NN 7–324, 10–425, 11–517, 11–661, 21–1307 /Swarthmore, Joint. Committee on Powder Diffraction Standard, USA, Pennsylvania, 1977.

Поступила в редакцию 11 сентября 2006 г.

УДК 541.1

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГИББСИТА С РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНЬЮ ДИСПЕРСНОСТИ

А.В. Толчев, Д.Д. Ларин

Методами рентгенографии исследованы параметры элементарной кристаллической ячейки образцов γ-$Al(OH)_3$ (гиббсит) с различной степенью дисперсности. Выявлена корреляция параметра *c* элементарной кристаллической ячейки, а так же полуширины дифракционных максимумов на рентгенограммах со средним размером кристаллов гиббсита. Анализируются возможные причины этого эффекта

Природный гидроксид алюминия γ-модификации, известный в литературе как минерал гиббсит или гидраргиллит, входит в состав природных бокситов, являющихся исходным сырьем в производстве алюминия, абразивных материалов, керамики и т.д. [1–4]. Синтетический гиббсит получают гидролизом из раствора алюмосиликата натрия в щелочной среде (способ Байера) или при пропускании через него углекислого газа [2]. Гиббсит кристаллизуется в моноклинной сингонии (пространственная группа симметрии P21/*n*; *z* = 6) [1, 4, 5]. Структура его построена из алюмогидроксильных слоев, гидроксильные группы которых образуют искаженную плотную упаковку. Каждый ион алюминия внутри слоя окружен шестью ОН-группами, образующими искаженный октаэдр. Октаэдры сочленены между собой общими ребрами, образуя гексагональную сетку. Алюмогидроксильные слои связаны между собой водородными связями.

Целью данной работы являлось исследование влияния дисперсности на структуру гиббсита и его последующие химические превращения при термообработке в замкнутом объеме при фиксированных температурах.

Объектами исследования являлись образцы гидроксида алюминия различной степени дисперсности. В качестве исходного (далее образец *А*) использовали технический гидроксид алюминия, который по данным [1-5] характеризуется составом (мас.%): Al_2O_3 – 64,2±0,5; H_2O–35,5±0,5; Me_2O – 0,4±0,1. Исходный образец гиббсита (образец *А*) характеризуется высокой степенью полдисперсности. Кристаллы имеют ярко выраженную таблитчатую (пластинчатую) форму размером от нескольких единиц или десятков до сотен микрометров в поперечнике. Согласно данным лазерного седиментационного анализа, средний размер частиц образцов составляет ~100 мкм.

Образец *А* подвергали классификации на ситах с диаметром ячеек 160, 100 и 50 мкм. Это позволило выделить четыре фракции гиббсита с размером частиц менее 50 мкм (образец *Б*), от 50 до 100 мкм (образец *В*), от 100 до 160 мкм (образец *Г*), более 160 мкм (образец *Д*).

При выполнении работы использовали методы рентгенографии, оптической и атомно-силовой микроскопии. Рентгенографический анализ образцов проводили на дифрактометре ДРОН-3 с использованием фильтрованного CoK_α-излучения. Съемку рентгенограмм проводили методом непрерывного сканирования в диапазоне углов дифракции θ от 10° до 70°, скорость вращения образца варьировали от 0,25 до 1,0 град/мин. Для определения профиля дифракционных максимумов их сканировали по точкам: шаг сканирования по углу 2θ – от 0,02 до 0,1°; время счета – 40 и 100 с.

Фазовый состав исследуемых образцов определяли путем анализа углового местоположения дифракционных максимумов и их относительных интенсивностей. По формуле Вульфа–Брэгга вычисляли экспериментальные значения межплоскостных расстояний $d_{hkl}^{эксп}$. Погрешности в определении $d_{hkl}^{эксп}$ и относительных интенсивностей $\beta = \frac{I_{hkl}^{эксп}}{I_0}$, где $I_{hkl}^{эксп}$ – интегральная интенсивность рефлекса с индексами Миллера (hkl); а I_0 – интенсивность самого интенсивного максимума, присутствующего на рентгенограмме дифракционных максимумов, не превышали 1 и 10 %, соответственно. Идентификацию фазового состава образцов проводили исходя из сопоставления

набора $d_{hkl}^{эксп}$ и $I_{(hkl)_{отн}}^{эксп}$ с данными картотеки ASTM [6]. Параметры элементарной кристаллической ячейки определяли методом независимого эталона (в качестве эталонного вещества использовали поликристаллический MgO квалификации «осч»). Погрешность в определении параметров элементарной ячейки не превышала от 0,005 Å до 0,007 Å, в зависимости от величины параметра.

Рассмотрим полученные экспериментальные данные. На рентгенограммах всех исследуемых образцов присутствует набор дифракционных максимумов, удовлетворительно идентифицирующихся в рамках моноклинной сингонии, к которой, согласно данным [6, 7], относится гиббсит.

Параметры элементарной ячейки *a, b, c* и угол β остальных образцов определяли по дифракционным максимумам с индексами Миллера $(41\bar{1})$, (314), (024), $(31\bar{4})$ и соответствующим им экспериментальным значениям межплоскостных расстояний d_1, d_2, d_3, d_4. Для этого составляли систему из четырёх уравнений и решали её относительно неизвестных *a, b, c* и β с помощью специализированной программы на персональном компьютере. Полученные результаты приведены в таблице.

Рентгенографические данные гиббсита с различной степенью дисперсности

Фракции, мкм	*a*, Å	*b*, Å	*c*, Å	β, град	$\Delta 2\theta$ $(41\bar{1})$, град	$\Delta 2\theta$ (314), град	$\Delta 2\theta$ (024), град	$\Delta 2\theta$ $(31\bar{4})$, град
< 50 (образец *Б*)	8,655± 0,006	5,061± 0,005	9,742± 0,007	85,47± 0,04	0,28	0,30	0,30	0,35
50–100 (образец *В*)	8,651± 0,006	5,059± 0,005	9,735± 0,007	85,46± 0,04	0,30	0,30	0,33	0,35
100–160 (образец *Г*)	8,652± 0,006	5,064± 0,005	9,734± 0,007	85,47± 0,04	0,33	0,31	0,33	0,40
> 160 (образец *Д*)	8,656± 0,006	5,067± 0,005	9,729± 0,007	85,43± 0,04	0,33	0,35	0,35	0,40

Из экспериментальных данных, приведенных в таблице, следует, что параметры *a, b,* β элементарной кристаллической ячейки во всех исследованных образцах, в пределах ошибки измерений не меняются, а параметр *c* изменяется в образцах γ-$Al(OH)_3$ с различной степенью дисперсности. Так, например, у образца *Б* (фракция < 50 мкм) параметр элементарной ячейки $c = 9{,}742 \pm \pm 0{,}007$ Å, у образца *В* (фракция 50 ÷ 100 мкм) $c = 9{,}735 \pm 0{,}007$ Å, у образца *Г* (фракция 100 ÷ 160 мкм) $c = 9{,}734 \pm 0{,}007$ Å, а у образца *Д* (фракция > 160 мкм) значение *c* уменьшается до величины $9{,}729 \pm 0{,}007$ Å.

Анализ профиля дифракционных максимумов показал, что их полуширина также зависит от степени дисперсности γ-$Al(OH)_3$. Это проявляется в увеличении полуширины максимумов ($\Delta 2\theta$) с ростом среднего размера кристалла. Так, например, для максимума $(41\bar{1})$ величина $\Delta 2\theta$ увеличивается от 0,28 град (образец *Б*, фракция < 50 мкм) до 0,33 град (образец *Д*, фракция > 160 мкм), а для максимума (024) величина $\Delta 2\theta$ увеличивается от 0,30 град (образец *Б*, фракция < 50 мкм) до 0,35 град. (образец *Д*, фракция > 160 мкм). Экспериментальные данные об изменении полуширины дифракционных максимумов так же приведены в таблице.

Обратимся к анализу экспериментальных данных. Из таблицы следует, что изменение параметра *c* элементарной кристаллической ячейки гидроксида алюминия γ-модификации коррелирует с полушириной дифракционных максимумов на рентгенограммах образцов: с увеличением среднего размера кристаллов γ-$A1(OH)_3$ в поперечнике наблюдается увеличение полуширины дифракционных максимумов. Из литературы [8] известно, что уширение дифракционных максимумов на рентгенограммах может быть обусловлено двумя основными причинами: во-первых, малостью размера областей когерентного рассеивания (менее 1000 Å), во-вторых, микронапряжениями, возникающими в кристаллической решетке каждого отдельного кристаллика. В нашем

случае размеры кристаллов исследуемых образцов существенно больше 1000 Å, поэтому первый фактор не может являться причиной уширения дифракционных максимумов.

Из изложенного выше следует, что наиболее вероятной причиной уширения максимумов является наличие микронапряжений в кристаллической решетке γ-$A1(OH)_3$, ориентированных вдоль оси *c*. Данное предположение подтверждается неизменностью параметров *a* и *b* элементарной кристаллической ячейки и уменьшением параметра *c* по мере увеличения среднего размера кристаллов гиббсита в поперечнике.

Заключение

Таким образом, экспериментально установлена корреляция параметра *c* элементарной кристаллической ячейки, а так же полуширины дифракционных максимумов на рентгенограммах со средним размером кристаллов гиббсита в поперечнике. Сделано предположение, что эта корреляция обусловлена увеличением форм-фактора пластинчатых кристалликов гиббсита по мере возрастания их среднего размера. Причиной уширения максимумов на рентгенограммах крупнокристаллических образцов гиббсита является, по-видимому, наличие микронапряжений в кристаллической решетке γ -$A1(OH)_3$, ориентированных вдоль кристаллографической оси *c*.

Литература

1. Годовиков А.А. Минералогия 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Недра, 1983. – 647 с.

2. Гаршин А.П., Гропянов В.М., Лагунов Ю.В. Абразивные материалы. – Л.: Машиностроение, 1983. – 231 с.

3. Химическая энциклопедия. В 5т.: Т. 1. / Ред.кол.: И.Л. Кнуняц (гл. ред.) и др. – М.: Сов. энцикл. 1988. – 623 с.

4. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. В 3 т. Т. 2: Пер. с англ. – М.: Мир. 1987. – 696 с.

5. Калинина А.М. // Химия и технология глинозема. Труды IV Всесоюзного совещания. – Новосибирск, Сиб. отд. изд. Наука, 1971. – С. 360–369.

6. ASTM. Powder Diffraction File: Search manual fink method inorganic Cards. NN 7–324, 10–425, 11–517, 11–661, 21–1307 /Swarthmore, Joint. Committee on Powder Diffraction Standard, USA, Pennsylvania, 1977.

7. Толчев А.В., Клещев Д.Г., Лопушан В.И. Влияние механохимической активации и добавки α-Fe_2O_3 на формирование корунда при термических превращениях γ-$Al(OH)_3$ // Журнал прикладной химии. – Т. 75. – № 9. – 2002. – С. 1417–1421.

8. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев. – М.: Металлургия, 1982. – 632 с.

Поступила в редакцию 11 сентября 2006 г.

УДК 504.064

НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИЗМЕНЕНИЯ УРОВНЯ ВОДЫ В ВОДОЕМЕ-ХРАНИЛИЩЕ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ

Коробицын Б.А., Якшина Н.В.

В настоящее время одним из решающих условий оптимизации стратегий по планированию природоохранных мероприятий является возможность получения точного прогноза динамики изменения качества окружающей среды. Однако применяемые методики имеют ряд проблем. При использовании одних методов для прогноза требуются большие материальные и временные усилия, связанные с необходимостью значительного объема входных данных, калибровки и верификации. Применение же более простых в практическом использовании методов дает загрубленную консервативную оценку, которая не предназначена для детального прогнозирования.

В связи с этим в последнее время в качестве альтернативного метода при экологическом прогнозировании предлагается использование искусственных нейронных сетей. К их неоспоримым преимуществам относится способность моделировать сложные нелинейные взаимоотношения между переменными, и, кроме того, высокая скорость при решении задач.

В данной работе искусственные нейронные сети использованы для моделирования динамики изменения уровня воды в водоеме-хранилище радиоактивных отходов. В качестве исходных данных использованы результаты мониторинга ФГУП «ПО «Маяк» в одном из каскадов водоемов, устроенных на реке Теча, а именно, водоеме В-11.

Водоем В-11 сооружен в верховье реки Теча в 1964 г. путем возведения грунтовой плотины и эксплуатируется в бессточном режиме с момента его создания. За весь период эксплуатации водоемов Теченского каскада, на фоне сезонных колебаний наблюдается устойчивая тенденция повышения уровня воды в водоеме В-11 (рис. 1) [1, 2].

Создание бессточной системы промышленных водоемов в верхней части долины реки Теча нарушило природный водный сток и привело к быстрому заполнению конечного водоема В-11. За 1980–1990 гг. уровень воды в конечном водоеме В-11 вырос на 2,87 метра. Несмотря на реализованные мероприятия по поднятию на 1 м плотины водоема В-11, его свободная емкость практически исчерпана. Уже в ближайшие несколько лет уровень воды в водоеме В-11 может достигнуть максимального проектного уровня (МПУ), принятого равным 216,82 м. По состоянию на 1993–1994 гг. разница между фактическим уровнем (216,40–216,50 м) и МПУ (216,82 м) составляла 0,3–0,4 м, то есть «запас прочности» крайне мал.

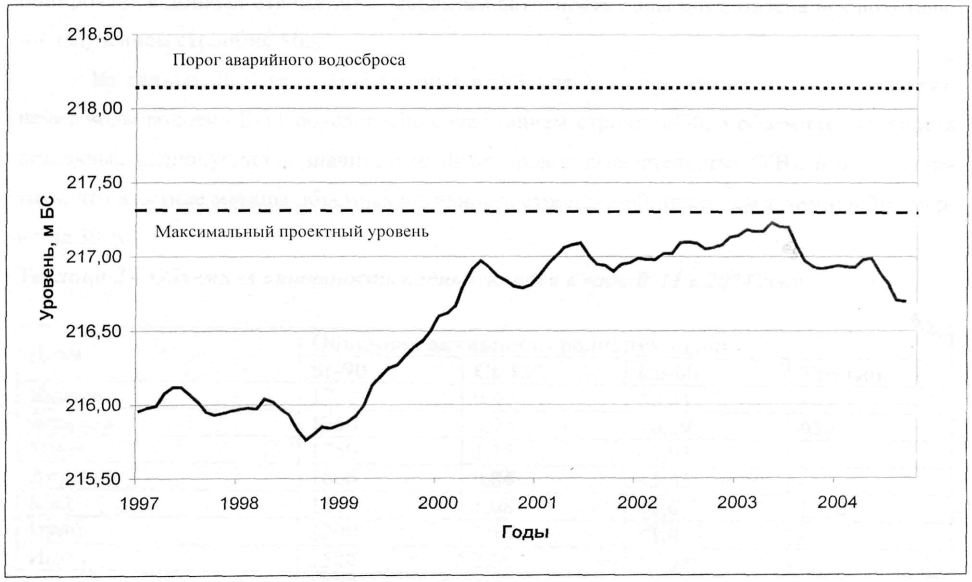


Рис. 1. Изменение уровня водоема В-11

Основной причиной роста уровня водоема В-11 в период 1980–2003 гг. считается изменение метеорологических условий региона [2, 3]. Если для периода 1950–1970 гг. в районе ПО «Маяк» средний уровень испарения превышал осадки на 100 мм/год, то для периода 1980–2003 гг. осадки превышали испарение в среднем на 90 мм/год, а в отдельные годы – на 200–250 мм/год.

В ближайшие годы динамика уровня воды в водоеме В-11 также будет зависеть от метеорологических условий, а именно от разности атмосферных осадков и испарения. Если установятся условия нормальной водности, то можно прогнозировать снижение уровня водоема В-11. При условии повторения серии многоводных лет и сохранении существующих сбросов, в течение ближайших 2–5 лет возможно превышение максимальной проектной отметки уровня воды. При повышении уровня воды в водоеме 218,14 м начнется автоматический переток воды из водоема в реку Теча по аварийному водосбросу.

В связи с этим существует опасность перелива воды через плотину и ее размыва. В результате прорыва образуется водяная волна значительной высоты, которая создаст критическую ситуацию в ряде населенных пунктов. При этом в долину р. Теча будет сброшено более 200 млн. $м^3$ загрязненных радионуклидами вод, что приведет к дополнительному загрязнению значительных территорий.

Кроме того, эксплуатация водоема В-11 на высоких отметках привела к росту гидростатического напора на плотину, ложе и борта водоема, что обусловило увеличение фильтрационного выноса радионуклидов в пойму реки Теча. Помимо фильтрации под плотину и в обход ее существует опасность неконтролируемой разгрузки загрязненных вод в бассейн реки Зюзелга – правого притока реки Теча.

В связи с представленными трудностями для временного решения проблемы переполнения водоема В-11 ПО «Маяк» осуществлено наращивание плотины 11 на 1 метр, что позволило увеличить объем водохранилища на 48,5 млн. $м^3$. Кроме этого для уменьшения риска чрезвычайных ситуаций в качестве переходных (временных) мероприятий, позволяющих стабилизировать уровень воды в водоеме № 11, предлагаются следующие решения:

– строительство очистных сооружений для сточных вод промплощадки ПО “Маяк”, которое позволит сократить поступление загрязненных вод в водоем № 11;

– пуск “северного куста” скважин для откачки и перехвата части потока подземных вод, подпитывающего водоем № 11.

Предполагается, что реализация этих мероприятий даст возможность уменьшить дебалансное поступление чистых вод в объеме до 5 млн. $м^3$ в год, что позволит временно уменьшить риск аварийных ситуаций, связанных с этим водоемом.

Эти меры, являющиеся неотложными, позволяют на какое-то время застабилизировать ситуацию, и обеспечить запас времени для кардинального решения проблемы стабилизации уровня воды в каскаде водоемов.

В качестве возможных вариантов стабилизации уровня водоемов рассматриваются следующие:

– строительство водоема В-12;
– упаривание и переработка дебалансного количества воды;
– очистка дебалансового количества воды;
– очистка и отвод хозбытовых стоков промплощадки в ЛБК.

Кардинального же решения проблемы в настоящее время еще не найдено. Это связано, в первую очередь, с большими допущениями при определении ожидаемого наполнения водоема В-11.

В [4] приведена структура водного баланса водоема В-11, имеющая следующий вид:

$$\Delta V = V_{ос} - V_{исп} + V_{ст} + V_{пер} + V_{гр.пр} - V_{гр.от} + V_{фп10} - V_{фп11}, \quad (1)$$

где ΔV – изменение объема водохранилища; $V_{ос}$ – осадки, выпадающие на зеркало водоема; $V_{исп}$ – испарение с зеркала водной поверхности; $V_{ст}$ – поверхностный сток с частной водосборной площади; $V_{пер}$ – переток из водоема 10 в водоем 11; $V_{гр.пр}$ – грунтовый приток; $V_{гр.от}$ – грунтовый отток; $V_{фп10}$ – фильтрационные поступления через тело плотины В-10; $V_{фп11}$ – фильтрационные потери через тело плотины В-11.

Несмотря на кажущуюся простоту, использовать эту формулу для прогнозных расчетов практически невозможно, т.к. составляющие водного баланса, связанные с фильтрацией (в том числе и с фильтрацией в/из ЛБК и ПБК, не включенной в баланс), определить практически невозможно. Кроме того, эти величины существенно изменяются в зависимости от водности года и, главное, уровня воды в водоеме В-11.

В данной работе для прогнозирования динамики изменения уровня воды в водоеме В-11 использованы искусственных нейронных сетей, созданные с помощью нейропакета НейроПро 0,25 (разработчик – В.Г. Царегородцев, Институт вычислительного моделирования СО РАН).

Входящими переменными являются: среднемесячный уровень осадков, среднемесячный уровень испарений, уровень воды в водохранилище В-10. Выходящая переменная – уровень воды в водохранилище В-11.

Оптимальные результаты выполнения работы показала нейронная сеть с архитектурой 3–10–10–1. Для подтверждения качества выполненного прогноза построены две нейронные сети с данной архитектурой на различных временных сериях (рис. 2).

Объем обучающей выборки составил 60 образцов (данные по водоему В-11 с 1992 по 2002 гг.). Объем тестовой выборки, которую нейронная сеть прогнозирует с надлежащей степенью точности – 5 образцов.

Результаты работы нейронной сети сравнивались с показателями статистических расчетов (см. таблицу).

Для оценки качества выполнения работы нейронной сетью, использованы следующие показатели: среднеквадратическая ошибка сети, уровень «d» и коэффициент корреляции.

Результаты работы нейронной сети и статистических расчетов

	Показатели работы нейронных сетей			Показатели работы статистических расчетов	
	Среднеквадратическая ошибка	Коэффициент корреляции	Уровень «d»	Среднеквадратическая ошибка	Уровень «d»
Сеть 1	0,00013	0,89	0,85	0,002	0,44
Сеть 2	0,00017	0,86	0,62	0,01	0,13

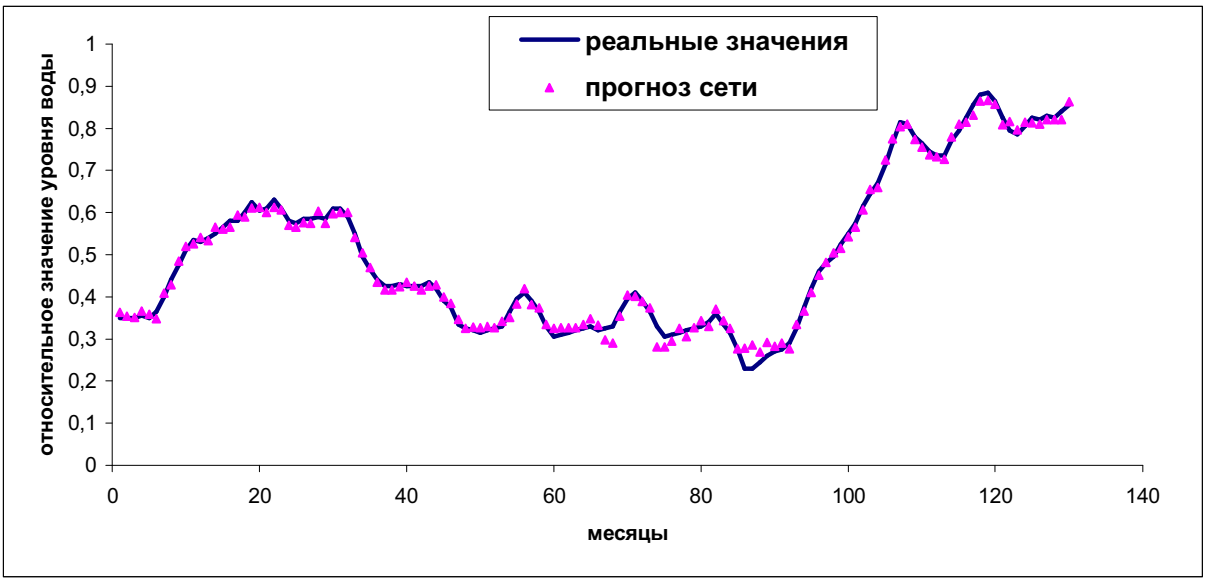


Рис. 2. Выполнение нейронной сетью процесса обучения и тестирования

Таким образом, при выполнении данной работы апробирован новый подход к моделированию динамики изменения уровня воды в водоеме-хранилище радиоактивных отходов с помощью искусственных нейронных сетей. При планировании мер по защите качества окружающей среды используя данный метод, наравне с другими, можно провести анализ эффективности проводимых

мероприятий и определить приоритетные направления, которые позволят получить максимальный эффект при минимальных затратах.

В работе выполнено прогнозирование уровня воды в водохранилище В-11 с помощью искусственных нейронных сетей. В качестве входящих переменных использованы только среднемесячный уровень осадков, среднемесячный уровень испарений и уровень воды в водохранилище В-10.

Данный прогноз сделан с надлежащей степенью точности на период равный 5 месяцам. Он может быть использован дополнительно к традиционным методам математического моделирования для выявления и предупреждения экстремальных ситуаций.

Литература

1. Современное состояние и пути решения проблем Теченского каскада водоёмов / В.И. Садовников, Ю.В. Глаголенко, Е.Г. Дрожко и др.// Вопросы радиационной безопасности. – 2002. – № 1. – С. 3–14.

2. Отчет «Режимные гидрогеологические наблюдения за распространением загрязнения в подземных водах в пределах контролируемой зоны ПО «Маяк» (в соответствии с договором № 1-10/00 от 10.01.2000 г.). – Александров: Мин-во природных ресурсов РФ, ФГУГП «Гидроспецгеология», Гидрогеологическая экспедиция № 30. – 2001.

3. Отчет «Режимные гидрогеологические наблюдения за распространением загрязнения в подземных водах в пределах контролируемой зоны ПО «Маяк» (в соответствии с договором № 1-10/04 от 05.01.2004 г.). – Александров: Министерство природных ресурсов РФ, ФГУГП «Гидроспецгеология», Гидрогеологическая экспедиция № 30. – 2005.

4. Отчет «Радиоэкологические и радиационно-медицинские характеристики района размещения производственного объединения «Маяк». – Инв. № Н-2130/1. – 1990.

ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 7 (62) 2006

Серия
«МАТЕМАТИКА, ФИЗИКА, ХИМИЯ»
Выпуск 7

Издательство Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 10.12.2006. Формат 60×84 1/8. Печать трафаретная.
Усл. печ. л. 30,69. Уч.-изд. л. 29,22. Тираж 200 экз. Заказ 72/4.

Отпечатано в типографии Издательства ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.