
Сборник статей
научно-практической конференции
Обратные задачи в приложениях
19-21 июня 2008 г, БирГСПА, г.Бирск

Бирск 2008

УДК 54.142.2
ББК 24.186

Печатается по решению
Редакционно-издательского совета
Бирской государственной
социально-педагогической академии

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, профессор Шагапов В.Ш.

Обратные задачи в приложениях. Сборник статей научно-практической конференции. – Бирск: БирГСПА, 2008.– 328 с.
ISBN 978-5-86607-373-3

Редакционная коллегия:

Усманов С.М., доктор физико-математических наук, профессор (г.Бирск);
Ягола А.Г., доктор физико-математических наук, профессор (г.Москва);
Спивак С.И., доктор физико-математических наук, профессор (г.Уфа);

ISBN 978-5-86607-373-3

© Коллектив авторов, 2008
© Проблемная лаборатория математического моделирования и механики сплошных сред БирГСПА при АН РБ, 2008

Научное издание

**Сборник статей
научно-практической конференции
Обратные задачи в приложениях**
19-21 июня 2008 г, БирГСПА, г.Бирск

Под общей редакцией
доктора физико-математических наук, профессора,
ректора Бирской государственной социально-педагогической академии
Салавата Мударисовича Усманова

Технический редактор
Компьютерная верстка и оригинал макет
Э.Д. Шакирьянов

Авторы несут ответственность за достоверность
изложенного в своих работах

Лицензия на издательскую деятельность № 002037 от 8 ноября 2001 г.,
выданная Поволжским межрегиональным территориальным
управлением Министерства Российской Федерации по делам печати,
телерадиовещания и средств массовой информации

Сдано в набор 17.06.2008. Подписано к печати 17.06.2008.
Формат 60x84. Бумага ксероксная.
Гарнитура "Times". Уч.-изд.л. 10,5. Усл.-печ.л. 14,5.
Печать на ризографе с оригинала. Тираж 300.
Заказ № 59. Цена договорная.

452450, Республика Башкортостан, г. Бирск, ул. Интернациональная, 10
Бирская государственная социально-педагогическая академия

$$\chi^2 = \frac{1}{n_1 \cdot n_2} \cdot \sum_{j=1}^4 \frac{(n_1 O_{2j} - n_2 O_{1j})^2}{O_{1j} + O_{2j}}$$

позволяет разрабатывать алгоритм решения экспериментальной педагогической задачи, исполняемой с помощью системы электронных таблиц Excel [4].

Экспериментальные значения статистики хи-квадрат до и после педагогического эксперимента $\chi^2_{\text{до}} = 0,913$ и $\chi^2_{\text{после}} = 8,327$ и её теоретическая критическая граница $\chi^2_{\alpha} = 7,815$, отвечающая уровню значимости критерия $\alpha = 0,05$ и числу степеней свободы 3, служат основанием для утверждения о том, что до педагогического эксперимента расхождение между эмпирическими и теоретическими частотами несущественно и расхождение между эмпирическим и теоретическим распределениями после педагогического эксперимента нельзя объяснить только случайными колебаниями выборочных данных.

Дидактический опыт свидетельствует о том, что студенты, активно участвующие в организации и проведении школьных и вузовских педагогических экспериментов с последующей статистической обработкой их числовых данных с помощью функциональных возможностей системы электронных таблиц Excel отличаются от своих однокурсников, проходящих педагогическую практику без систематического эмпирического научного познания действительности, высоким уровнем теоретической, методической и практической подготовки.

Вывод, следующий из анализа и обобщения приведенного выше краткого материала относительно системы электронных таблиц Excel как средства математической обработки данных педагогического эксперимента, состоит в том, что данной новой информационной технологии следует отводить приоритетное место в содержании естественно-математической подготовки будущих учителей-исследователей.

Список литературы

1. Каримов М.Ф. Химический эксперимент и его роль в развитии дидактики высшей школы // Башкирский химический журнал. – 2008. – Т. 15. - № 1. – С. 94 – 97.
2. Каримов М.Ф. Подготовка будущих учителей-исследователей в информационном обществе: Монография. – Челябинск: Изд-во ЧГПУ «Факел», 2002. – 612 с.
3. Pearson K. On a criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can reasonably be supported to have arisen from random sampling // Philosophical Magazine. – 1900. – Vol. 50. – P. 157 – 175.
4. Каримов М.Ф. Электронные таблицы Excel в интегрировании математических, физических и гуманитарных дисциплин // Сборник трудов участников XV Международной конференции-выставки «Информационные технологии в образовании». – М.: Изд-во МИФИ, 2005. – Часть III. – С. 110 – 112.

Содержание

Секция 1. Обратные задачи в химии..... 8

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ: БАЗА ДАННЫХ ПО СИЛОВЫМ ПОЛЯМ АЗОСОЕДИНЕНИЙ

Курамшина Г.М., Ягола А.Г. 9

ЭМПИРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА С ПОМОЩЬЮ ФИЛЬТРАЦИИ

Житников В.П., Шерыхалина Н.М. 23

ОБ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ НЕРАВНОВЕСНОГО МАССОПЕРЕНОСА

Булгакова Г.Т. 31

О ЦЕЛЕВОЙ ФУНКЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ММР

Янборисов В.М., Янборисов Э.В., Спивак С.И. 38

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В КУСОЧНО-ОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

Кризский В.Н. 45

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ МОЛЕКУЛЯРНО-МАСОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Усманов Т.С. 54

НЕКОРРЕКТНАЯ ЗАДАЧА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СПЕКТРА ЭНЕРГИЙ ОБРАЗОВАНИЯ ФЛУКТУАЦИОННЫХ МИКРОПУСТОТ

Шакирьянов Э.Д., Усманов С.М. 66

МНОГОКОМПОНЕНТНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ХЕЛЕ-ШОУ

Шерыхалина Н.М., Зиннатуллина О.Р., Поречный С.С. 77

ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ОБОБЩЕННОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЦИРКОНИЕВОГО КАТАЛИЗА

Губайдуллин И.М., Спивак С.И. 84

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ГЕТЕРОГЕННОГО ВЫСВЕЧИВАНИЯ ТВ³⁺ ПО ИЗОТОПНОМУ ЭФФЕКТУ ПРИ СОНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ТВС₃

Шарипов Г. Л., Абдрахманов А.М., Мигранов Н.Г. 90

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ В КИНЕТИЧЕСКИХ КОНСТАНТАХ НА РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ В РАВНОВЕСНОМ СЛУЧАЕ

Антонова О. А., Мустафина С. А. 99

РАСЧЕТ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССА ДИМЕРИЗАЦИИ А-МЕТИЛСТИРОЛА В КАСКАДЕ РЕАКТОРОВ

Байтимерова А.И., Мустафина С.А., Спивак С.И. 105

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ МОЛЕКУЛЯРНО-МАССОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛИМЕРИЗАТОВ ДИАЛЛИЛИЗОФТАЛАТА

Исмаилов Р.Р., Сивергин Ю.М., Усманов С.М. 113

СТОХАСТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ПРИ ПОСТРОЕНИИ КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Файзуллин М.Р., Балаев А.В. 119

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ДЛЯ РЕАКЦИИ ЦИКЛОАЛЮМИНИРОВАНИЯ ОЛЕФИНОВ

Ахматсафина Э. Р., Спивак С. И., Губайдуллин И. М. 125

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ММР И РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ИОННО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Бигаева Л.А., Усманов Т.С. 129

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ИОННО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ТЕТРАХЛОРИДА ТИТАНА С ТРИМЕТИЛАЛЮМИНИЕМ

Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М. 136

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ПОИСКА ОБЛАСТЕЙ ПРОСТРАНСТВА КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ РЕАКЦИИ ГИДРОАЛЮМИНИРОВАНИЯ ОЛЕФИНОВ

Аристархов А.В., Спивак С.И., Губайдуллин И.М. 141

ИНДУКЦИОННЫЙ ПЕРИОД В РЕАКЦИИ ГИДРОАЛЮМИНИРОВАНИЯ ДИИЗБУТИЛАЛЮМИНИЙХЛОРИДА

Губайдуллин И.М., Хилько А.В., Спивак С.И., Парфенова Л.В. 145

СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТАДИИ АЛКИЛИРОВАНИЯ TI (IV) В КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ $TiCl_4/Al(CH_3)_3$

Валиева О.И., Губайдуллин И.М., Хурсан С.Л., Спивак С.И. 151

Секция 2. Обратные задачи в механике и геофизике 157

ДИАГНОСТИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ С ДВУМЯ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ ПО ДВУМ НАБОРАМ СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ

Ахтямов А.М., Гаринова Г.И. 158

НЕКОТОРЫЕ ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ СКВАЖИННОЙ ТЕРМОМЕТРИИ И ПОДЗЕМНОЙ ТЕРМОГИДРОМЕХАНИКИ

Рамазанов А.Ш., Валиуллин Р.А. 165

МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ ОБРАТНЫЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ.

Валеев Н.Ф. 177

ОБ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ТРАЕКТОРИИ ДВИЖЕНИЯ

Шагапов И.А., Шугаенов Д.Р. 181

интеллектуальной активности, научной компетентности, профессиональной дисциплинированности и педагогической коммуникативности, диагностической, проективной, конструктивной, реализующей и оценочной функций [2].

Компьютерная статистическая обработка студентами вуза данных школьного педагогического эксперимента

После проведения педагогического эксперимента возникает необходимость извлечения определенной дидактической информации о всей генеральной совокупности учащихся страны по данным случайных, малого объема, выборки учащихся приводит к построению вероятностной или стохастической модели решения рассматриваемой экспериментальной педагогической задачи

Полученные во время одной из педагогических практик студентами качественные и количественные результаты выполнения контрольных работ по информатике учащимися средней общеобразовательной школы до и после педагогического эксперимента выглядят так, как это представлено в нижеследующей таблице.

Таблица

Качественные и количественные данные по выполнению учащимися контрольных работ по основам информатики, полученные в ходе педагогического эксперимента, проведенного студентами – практикантами

До эксперимента				
Успеваемость	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Класс				
Экспериментальный	4	8	7	4
Контрольный	2	9	8	3
После эксперимента				
Успеваемость	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Класс				
Экспериментальный	1	3	15	4
Контрольный	3	10	7	2

Математическая модель статистики критерия хи-квадрат [3] для двух независимых экспериментальной и контрольной выборок с объемами n_1 и n_2 с четырьмя группами в виде

Система Excel как средство статистической обработки данных педагогического эксперимента

Каримов М.Ф., Фаязова Ф.Б.

Бирская государственная социально-педагогическая академия

Аннотация

Рассмотрена методика обработки данных педагогического эксперимента с помощью системы электронных таблиц Excel. Выделен дидактический эффект от систематического и регулярного применения компьютерной обработки данных эксперимента в повышении уровня теоретической, методической и практической подготовки студентов педагогического вуза.

Введение

При постановке и проведении педагогических экспериментов, организуемых в системе непрерывного образования, в настоящее время все чаще используются компьютерные технологии.

Данная работа посвящена рассмотрению возможностей применения системы электронных таблиц Excel при математической статистической обработке данных педагогических экспериментов.

Эксперимент как метод познания действительности и его роль в подготовке будущих учителей - исследователей

Среди эмпирических методов познания действительности эксперимент [1], представляющий собой описание и оценку состояния исследуемого педагогического объекта при определенных дидактических или воспитательных условиях и планомерном воздействии на него со стороны субъекта познания с целью выявления искомой причинно – следственной связи в педагогическом явлении, выделяется своим огромным научным и дидактическим значением.

Дидактический опыт свидетельствует о том, систематическое и регулярное использование системы электронных таблиц Excel при обработке данных педагогических экспериментов приводит к развитию у будущих учителей – исследователей творческой целеустремленности,

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ЗАДАЧАХ ГЕОЭЛЕКТРИКИ Беляева М.Б.	185
ДИФфуЗИОННЫЙ ПОДХОД ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПОВЕДЕНИЯ ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЙ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ Закирьянова Г.Т., Насыров Н.М., Мусин А.А.	193
АВТОМОДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА ОБ ОБРАЗОВАНИИ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ Хасанов М.К., Столповский М.В.	200
ПРИМЕНЕНИЕ АКУСТИЧЕСКОГО ЗОНДИРОВАНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ ПЕРФОРИРОВАННОЙ СКВАЖИНЫ И. Г. Хусанов, А. А. Ишмухаметова.....	206
О ДИНАМИКЕ ЛИНЕЙНЫХ ВОЛН ВО ВЛАЖНЫХ НАСЫЩЕННЫХ ГАЗОМ ПОРИСТЫХ СРЕДАХ С УЧЕТОМ МЕЖФАЗНОГО ТЕПЛООБМЕНА Володин С.В., Дмитриев В.Л., Хусанов И.Г., Хусанова Г.Я.	211
ВОЗДЕЙСТВИЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕССЫ СОРБЦИИ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕДАХ Ковалева Л.А., Галиева Л.Н.	218
ОПТИМИЗАЦИЯ КОМБИНИРОВАННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ЗАЛЕЖЬ ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ СО СМЕШИВАЮЩИМСЯ ВЫТЭСНЕНИЕМ Ковалева Л.А., Давлетбаев А.Я.	220
ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕРМОЗОНДИРОВАНИЯ ПЛАСТА Бодулев А.В., Усманов А.С., Рамазанов А.Ш., Валиуллин Р.А.	226
РАСЧЕТ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ СКВАЖИНЫ Бодулев А.В., Усманов А.С., Рамазанов А.Ш., Валиуллин Р.А.	230
К ЗАДАЧЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ТЯЖЕЛЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ Ковалева Л. А., Мусин А. А.	234
ВЛИЯНИЕ ОСАДОЧНЫХ ПОРОД ПРИ РАЗРАБОТКЕ ГАЗОГИДРАТНЫХ МАССИВОВ Гильмиярова Л. Ф., Чиглицева А.С., Шагапов В.Ш.	241
УПРАВЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРОЙ ИНЖЕКТИРУЕМОГО ГАЗА ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ НАИБОЛЕЕ ПОЛНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ГИДРАТА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ Запивахина М. Н., Шагапов В.Ш.	245
УПРАВЛЕНИЕ НАГРЕВОМ ВЛАЖНОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЫ ПРИ НАГНЕТЕНИИ ГАЗА Нурисламов О.Р., Шагапов В.Ш.	248

ЗАВИСИМОСТЬ РАЗРУШИТЕЛЬНОЙ СИЛЫ ВЗРЫВА ПРОПАНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ ОТ ВРЕМЕНИ ЗАЖИГАНИЯ
Баянов И.М., Хамидуллин И.Р.253

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДВИЖЕНИЯ ПАРА В ТРУБЧАТОМ РЕАКТОРЕ
Шагиева Ф.И., Шагапов В.Ш.257

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РЕЖИМОВ ЭКСПЛУАТАЦИИ СИСТЕМ ДОБЫЧИ ГАЗА ИЗ ГАЗОГИДРАТНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ
Чиглинцева А.С., Шагапов В.Ш.260

Секция 3. Обратные задачи математической физики и спектральной теории дифференциальных уравнений..... 265

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАБОЛЕВАНИЯ ТУБЕРКУЛЕЗОМ
Спивак С.И., Райманова Г.К.266

ПРОБЛЕМА РАЦИОНАЛЬНОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ: ОПТИМИЗАЦИЯ ОБРАТНОГО ХОДА РАСКРОЯ
Мухачева Э.А., Панюкова Т.А.273

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАРКОВСКИХ ПРОЦЕССОВ
Нуриахметов И.А., Спивак С.И.280

О МЕТОДЕ ИНВОЛЮЦИЙ В ТЕОРИИ ЛИНЕЙНЫХ ГРУПП
Исмагилова А.С., Сатышев И.С.284

ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧИ ПО АСИММЕТРИЧНЫМ КОЛЕБАНИЯМ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ОБОЛОЧКИ
Сафина Г.Ф., Зарипова Л.И.287

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ БИОФИЗИКИ
Латыпов И.И., Чудинов В.В.293

ИНТЕГРИРУЕМОЕ КРАЕВОЕ УСЛОВИЕ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ТОДЫ
Вильданов А.Н.303

РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ ГИББСА, КОНСТАНТЫ РАВНОВЕСИЯ И КОНВЕРСИИ АММИАКА
Спивак С.И., Балаев А.В., Галин Д.З.306

АНАЛИЗ КРИВОЙ ЭФФЕКТИВНОГО ВЫХОДА ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА NO₂ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ТИХОНОВА
¹Яныбин В.М., Пихтовников С.В., Усманов С.М., Мазунов В.А.311

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДЕФЕКТОВ В ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДЕ
Лачинов А.Н., Мошелёв А.В., Пономарёв А.Ф.315

Марков А.А. Распространение закона больших чисел на величины, зависящие друг от друга // Известия Физико-математического общества при Казанском университете. – 1906. – Т. 15. - № 2. – С. 135 – 156.

Колмогоров А.Н. К вопросу о дифференцируемости переходных вероятностей в однородных по времени процессах Маркова со счетным числом состояний // Ученые записки МГУ. Серия математическая. – 1951. – Т. 4. – Вып. 148. – С. 53 – 59.

Legendre A.M. Memoires sur la methode de moindres quarrs et sur l'attraction des ellipsoïds homogenes. – Paris: Imprimerie de la Republique, 1810. – 35 p.

Марков А.А. Избранные труды. Теория чисел. Теория вероятностей. Закон больших чисел и способ наименьших квадратов. – М.: Изд-во АН СССР, 1951. – С. 233 – 251.

Снедекор Дж.У. Статистические методы в применении к исследованиям в сельском хозяйстве и биологии. – М.: Сельхозиздат, 1961. – 503 с.

Боровков А.А. Математическая статистика: В 2-х частях. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 1979.

Bartlett M.S. An introduction to stochastic processes, with special reference to method and applications. – Cambridge: Cambridge University Press, 1955. – 312 p.

Cochran W.G. An extension of Gold's method of examining the apparent persistence of one type of weather // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. – 1938. – Vol. 64. - № 277. – P. 631 – 634.

Романовский В.И. Применения математической статистики в опытном деле. – М.-Л.: Гостехтеориздат, 1947. – 247 с.

Mann H.B. Availability of manganese and of iron as affected by applications of calcium and magnesium carbonates. – Baltimore, 1930. – 141 p.

Whitney D.R. Elements of mathematical statistics. – New York: Dryden Press, 1958. – 136p.

Ястремский Б.С. Избранные труды по статистике. – М.: Статистика, 1964. – 391 с.

Романовский В.И. Новые критерии случайности ряда испытаний // Труды Средне-Азиатского государственного университета. Серия V-A. Математика. – 1933. – Вып.8.-С.3-7.

Колмогоров А.Н. Логарифмически – нормальный закон распределения размеров частиц при дроблении // Доклады АН СССР. – 1941. – Т. 31. – С.99 – 101.

Марков А.А. Об эллипсоидах (эллипсах) рассеяния и корреляции // Известия Академии наук. Серия 6. – 1924. – Т. 18. – С. 117 – 126.

Spearman C.E. General intelligence objectively determined and measured // American Journal of Psychology. – 1904. - № 15. – P.201 – 293.

Кендалл М.Дж. Ранговые корреляции. – М.: Статистика, 1975. – 216 с.

Колмогоров А.Н. Несмещенные оценки // Известия АН СССР. Серия математическая.– 1950. – Т. 14. – С. 303 – 326.

А.Н.Колмогорова (1903-1987) [29], положительно и отрицательно коррелированные случайные величины по А.А.Маркову (1856-1922) [30], формулы корреляционных связей между случайными величинами: коэффициент корреляции К.Пирсона (1857-1936) [12], коэффициент ранговой корреляции К.Э.Спирмена [31], коэффициент корреляции рангов М.Дж.Кендалла [32], приложения метода наименьших квадратов в науке и технике, асимптотическая нормальность оценок максимального правдоподобия, внедрение достижений математической статистики в науку, технику и производство согласно методическим рекомендациям А.Н.Колмогорова (1903-1987) [33], алгоритмы компьютерного моделирования случайных величин и процессов.

Литература

- Каримов М.Ф. Подготовка будущих учителей-исследователей в информационном обществе: Монография. – Челябинск: Изд-во ЧГПУ «Факел», 2002. – 612 с.
- Каримов М.Ф. Вероятностные характеристики распределения намагниченности в блоховской доменной границе магнетика // Тезисы докладов XVII Всесоюзной конференции по физике магнитных явлений. – Донецк: ДонФТИ АН УССР, 1985. – С. 27 – 28.
- Каримов М.Ф. Температурная зависимость намагниченности насыщения аморфного магнетика с неоднородностью состава в модели кластеров // Физика магнитных пленок. – Иркутск: Изд-во ИрГПИ, 1986. – С. 8 – 11.
- Колмогоров А.Н. Математика в её историческом развитии. – М.: Наука, 1991. – 223 с.
- Bayes Th. Versuch zur Lesung eines Problems der Wahrscheinlich-Keitsrechnung. – Leipzig: W.Engelmann, 1908. – 59 p.
- Bernoulli J. Wahrscheinlichkeitsrechnung (Ars coniectandi): Bd. 1 – 4. – Leipzig: Verlag von Wilhelm Engelmann, 1899.
- Moivre A. The doctrine of chances; or, A method of calculating the probability of events in play. – London: A.Millar, 1756. – 348 p.
- Laplace P.S. Theorie analytique des probabilités. – Paris: Ve Courcier, 1812.– 464 p.
- Gauss C.F. Methode des moindres carres. Memoires sur la combinaison des observations. – Paris: Mallet-Bachelier, 1855. – 167 p.
- Molina E. Poisson's exponential binomial limit. – Amsterdam, 1947. – 151 p.
- Student. The probable error of a mean // Biometrika.– 1908.– Vol.6.– P.1–23.
- Pearson K. On a criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can reasonably be supported to have arisen from random sampling // Philosophical Magazine. – 1900. – Vol. 50. – P. 157 – 175.
- Fisher R.A. On the probable error of a coefficient of correlation deduced from a small sample // Metron. – 1921. – Vol. 1. – Part. 4. – P. 3 – 32.
- Чебышев П.Л. О двух теоремах относительно вероятностей // Записки Академии наук.– 1887. – Т.55. - № 6. – 16 с.
- Ляпунов А.М. Собрание сочинений: В 5-ти тт. Об одной теореме теории вероятностей; Новая теорема о пределе вероятности. Т. 1. – М.: Изд-во АН СССР, 1954 – 1965.

Секция 4. Использование статистических методов в педагогических исследованиях 319

ПОСТАНОВКА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ФОРМИРОВАНИЯ ОСТАТОЧНЫХ ЗНАНИЙ СТУДЕНТОВ

Усманов С.М., Бадртдинова Ф.Т., Волкова Т.И.320

СОДЕРЖАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ПОДГОТОВКИ СТУДЕНТОВ ПЕДАГОГИЧЕСКОГО ВУЗА

Каримов М.Ф.323

СИСТЕМА EXCEL КАК СРЕДСТВО СТАТИСТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ПЕДАГОГИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Каримов М.Ф., Фаязова Ф.Б.328

Секция 1. Обратные задачи в химии

величины, числовые характеристики случайных величин, вычисление математических ожиданий и дисперсий случайных величин, алгоритм или метод Монте-Карло в изучении случайных величин, функции от случайных величин, распределения вероятностей суммы, произведения и частного независимых случайных величин, распределения вероятностей Стьюдента – У.С.Госсета (1876-1937) [11], «хи-квадрат» К.Пирсона (1857-1936) [12] и Р.Э.Фишера (1890-1962) [13] для составных случайных величин, теорема П.Л.Чебышева (1821-1894) [14] о законе больших чисел, центральная предельная теорема теории вероятностей, доказанная А.М.Ляпуновым (1857-1918) [15], стационарные и эргодические случайные процессы, классы случайных процессов, теория случайных процессов А.А.Маркова (1856-1922) [16], гауссовские и пуассоновские случайные процессы, стохастический интеграл и его свойства, представление о спектральном разложении стационарного процесса, прямое и обратное уравнения А.Н.Колмогорова (1903-1987) [17] для вероятностного описания случайных процессов;

- **в области математической статистики** – случайная выборка и генеральная совокупность, выборочные средние и дисперсии, точечная статистическая оценка неизвестных параметров генеральных совокупностей, свойства состоятельности, несмещенности и эффективности выборочных характеристик, алгоритм или метод максимального правдоподобия, метод наименьших квадратов, созданный К.Ф.Гауссом (1777-1855) [9], А.М.Лежандром (1752-1833) [18] и А.А.Марковым (1856-1922) [19], интервальная оценка числовой характеристики случайной величины, доверительный интервал и доверительная вероятность, оценка вероятности случайного события по эмпирической частоте, параметрическая оценка неизвестного закона распределения случайной величины, статистическая гипотеза и алгоритм её проверки, вероятности ошибок первого и второго родов, параметрические методы индуктивной статистики: критерий Стьюдента – У.С.Госсета (1876-1937) [11] для независимых и зависимых выборок, критерий Р.Э.Фишера (1890-1962) [13] – Дж.У.Снедекора (1881-1967) [20], критерий Уилсона – Гилферти [21], критерий М.С.Бартлетта [22] и У.Дж.Кочрена [23] для проверки статистических гипотез, непараметрические алгоритмы или методы индуктивной статистики: критерий согласия «хи-квадрат», биномиальный критерий, критерий Ф.Вилкоксона [24], критерий Х.Б.Манна (1898-1979) [25] – Д.Р.Уитни [26], критерий Б.С.Ястремского (1877-1962) [27], критерий серий в установлении статистически значимых различий в сравниваемых выборках, проверка эмпирических законов распределения вероятностей случайных величин: критерий К.Пирсона (1857-1936) [12], критерий В.И.Романовского (1879-1954) [28], критерий

Подробное изучение на лекционных, практических и лабораторных занятиях статистических моделей объектов природы, например, по физике магнитных явлений [2,3], приводит, как показывает педагогический опыт, к положительному дидактическому эффекту в формировании и развитии у студентов педагогических вузов статистического подхода к исследованию природных, технических и социальных объектов, процессов и явлений.

Статистические данные, полученные студентами педвуза в ходе учебных и научных опросов, анкетирований, диагностирований, наблюдений и экспериментов, несут в себе информацию о случайных событиях, процессах и явлениях, происходящих в природе, технологиях, обществе и мышлении.

Первая статистическая задача, решаемая студентами педвуза, состоит в том, чтобы по ограниченному выборочным данным восстановить с определенной степенью достоверности статистическую информацию или количественные характеристики, присущие генеральной совокупности, представляющей изучаемое явление.

Вторая научная задача связана со статистической информацией, возникающей при исследовании случайных процессов, описывающих явления природы, технологий, общества и мышления, протекающих во времени и реализующихся в пространстве.

Структурные элементы содержания статистической подготовки студентов высшего педагогического учебного заведения

Теория вероятностей и математическая статистика как учебная дисциплина, изучаемая будущими учителями – исследователями обязательно, факультативно или самостоятельно, включает в свое содержание следующие темы:

- **в области теории вероятностей и случайных процессов** – математические модели алгебры случайных событий, аксиоматическое построение теории вероятностей А.Н.Колмогоровым (1903-1987) [4], основные теоремы о вероятностях случайных событий, формулы полной вероятности и Х.Байеса (1702-1761) [5], испытания и формула Я.Бернулли (1654-1705) [6], локальная и интегральная предельные теоремы А.Муавра (1667-1754) [7] – П.С.Лапласа (1749-1827) [8], случайные величины, одномерные и многомерные распределения вероятностей случайных величин, биномиальное распределение вероятностей случайной величины, нормальное распределение К.Ф.Гаусса (1777-1855) [9] для вероятностей непрерывной случайной величины, распределение С.Д.Пуассона (1781-1840) [10] для вероятностей дискретной случайной

Обратные задачи молекулярной спектроскопии: база данных по силовым полям азосоединений

Курамшина Г.М., Ягола А.Г.

*Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, kuramshi@phys.chem.msu.ru
Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, yagola@inverse.phys.msu.ru*

Аннотация

Разработаны подходы для создания базы данных по молекулярным постоянным биологически важных азосоединений. Рассчитаны регуляризованные квантовохимические силовые поля для ключевых соединений ряда азотистых оснований, на основании которых создана база данных по регуляризованным силовым постоянным фрагментов нуклеиновых кислот.

Введение

Вопросы обработки и корректной интерпретации данных спектрального эксперимента являются наиболее важными при автоматизации физико-химических исследований. Наиболее распространенными методами идентификации веществ являются методы молекулярной, в частности колебательной (инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния) спектроскопии. Автоматизация исследований, использующих инструментальную базу колебательной спектроскопии, выдвигает на первый план вопросы обработки и корректной интерпретации данных эксперимента. В свою очередь использование ЭВМ требует существенного усовершенствования скорости поиска и обработки библиографических данных и, соответственно, более рациональной организации структур данных по молекулярным структурам, колебательным спектрам, термодинамическим данным, увеличения объемов доступной информации, а также более активного привлечения данных вычислительного эксперимента, в том числе и данных квантовохимических расчетов, в интерпретационные схемы для оперативной оценки физико-химических параметров.

Содержание статистической подготовки студентов педагогического вуза

Каримов М.Ф.

Бирская государственная социально-педагогическая академия

Аннотация

Определен минимальный объем знаний, умений и навыков всех студентов педагогического вуза по математической статистике. Выделены особенности освоения статистических методов познания действительности будущими учителями – исследователями в среде компьютерных технологий.

Введение

Общеметодологический статистический подход к изучению действительности, используемый в проектировании и реализации профессионально – педагогической подготовки будущих учителей – исследователей [1] позволяет выделить структурные элементы системы статистической подготовки студентов высших педагогических учебных заведений.

Данная работа посвящена рассмотрению инвариантной составляющей содержания статистической подготовки студентов педвуза, необходимой для успешной постановки и решения научных задач курсовых и дипломных работ.

Статистическая информация о действительности и её роль в подготовке будущих учителей - исследователей

Статистическая информация об объектах, процессах и явлениях природной, технической и социальной действительности, являющаяся частью методологической, теоретической и методической подготовки будущих учителей - исследователей в условиях информатизации общества, представляет собой сведения о состоянии и закономерностях поведения микро-, макро- и мегасистем различной природы, подвергаемых случайным внутренним и внешним воздействиям.

Колебательные спектры (ИК поглощения и комбинационного рассеяния), обладающие очень высокой специфичностью и являющиеся уникальной физической характеристикой вещества, широко используются для идентификации индивидуальных химических соединений и анализа сложных смесей веществ. Для идентификации соединения по ИК спектру, необходима обширная картотека эталонных спектров, полученных в условиях регистрации, приближенных к реальным условиям существования данного вещества. Поэтому актуальной проблемой является создание развитых баз данных по ИК-спектрам поглощения, для отдельных классов соединений. Такие базы данных, содержащие информацию по физико-химическим характеристикам веществ и по молекулярным постоянным (силовым полям, структурным параметрам), позволяют проводить массовые расчеты частот и других характеристик колебаний сложных молекулярных систем, необходимых для решения многих вопросов химической термодинамики, теплообмена, физики горения, моделирования технологических процессов и мониторинга окружающей среды.

Возникающая при рассмотрении данных колебательной спектроскопии обратная задача нахождения по экспериментальным данным параметров силового поля молекулы относится к важнейшим задачам структурной химии.

Задачи восстановления силового поля молекулы по экспериментальным данным

Математически формализованные задачи восстановления силовых полей молекул по экспериментальным данным представляются в виде нелинейного операторного уравнения

$$AF = \Lambda \quad (1)$$

где $F \in \mathbb{R}^{n(n+1)/2}$ (n - число обобщенных координат) - матрица силовых постоянных, образованная вторыми производными потенциальной энергии по обобщенным координатам в точке равновесия, $\Lambda \in \mathbb{R}^l$ - набор всех доступных экспериментальных данных (вектор, составленный из квадратов экспериментальных частот колебаний молекулы и ее изотопомеров, а также известных молекулярных постоянных – кориолисовы постоянные, постоянные центробежного искажения, средние амплитуды колебаний и др.), число которых равно l .

Оператор A , определяемый массами ядер и равновесной конфигурацией молекулы, сопоставляет каждой симметричной положительно определенной матрице F набор вычисляемых величин, отвечающих этим

приближенного решения используется регуляризованные решения $\varphi_\alpha = R(\alpha, y_\alpha(\lambda))$, то есть функция $\varphi_\alpha(\lambda)$, на которой достигается минимум сглаживающего функционала:

$$M_\alpha[\varphi] = \int_c^d \left[\int_a^b K(\lambda, t) \varphi(\lambda) d\lambda - u_\delta(t) \right]^2 dt + \alpha \int_a^b \left\{ \varphi^2 + \left[\frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} \right]^2 \right\} d\lambda \quad (6)$$

Выбор параметра регуляризации α осуществляется по принципу обобщенной невязки [4,5], то есть выбирается такое значение α , при котором невязка η выходит на уровень суммы всевозможных погрешностей метода регуляризации:

$$\eta \equiv \left\| \hat{A} \varphi_\alpha - y_\delta \right\| = \delta^2. \quad (7)$$

Алгоритмы численного решения представлены в работах [6, 7]. Полученные в результате значения функции распределения вероятностей «забывания» знаний студентов позволяют с новых позиций подойти к системе мониторинга качества образовательного процесса.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ №08-01-97028-р_поволжье_a.

Литература

- Бондаревская Е.В. Педагогика: личность в гуманистических теориях и системах воспитания: учеб. пособие. – Ростов-н/Д: Творческий центр «Учитель», 1999. – 560 с.
- Гласс Дж. Статистические методы в педагогике и психологии. – М.: Прогресс, 1976. – 495 с.
- Усманов С.М., Латыпов И.И., Шакирьянов Э.Д. Дискретные модели преобразования релаксационных сигналов и обратные задачи диэлектрической спектроскопии. //Обратные задачи химии: Материалы Третьей Всероссийской научно-практической Школы-семинара. – Бирск: Бирск. Гос. Пед ин-т, 2003. – С. 83-95.
- Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1990. – 232 с.
- Тихонов А.Н. Арсенин В. Методы решения некорректно поставленных задач. – М.: Наука, 1986. – 287 с.
- Усманов С.М., Латыпов И.И., Гималтдинов И.К. Численное решение некорректно поставленных задач. //Обратные задачи химии. Бирск: БирГПИ – 1999. – С.126-145.
- Усманов С.М., Шакирьянов Э.Д., Набиуллин А.Р. Численный расчет дискретных спектров коэффициентов самодиффузии. //Сб. статей «Структура и динамика молекулярных систем». Вып. VII. М.: Изд. Институт физ. Химии РАН. – 2000. – С. 57 – 59.

экспериментальным данным. Зависимости частот колебаний, а также кориолисовых постоянных, постоянных центробежного искажения и др., составляющих правую часть уравнения (1) от элементов матрицы \mathbf{F} , разнородны, нелинейны, не независимы, а также при использовании данных, полученных с погрешностью, могут быть и несовместны. Несовместность может присутствовать и, как следствие, недостаточности имеющейся информации при построении более сложной модели (учитывающей, например, ангармоничность колебаний). Эта недостаточность приводит в большинстве случаев и к невозможности выделения единственного решения уравнения (1). Наконец, полученное решение может быть неустойчиво относительно малых возмущений входных данных. Таким образом, рассматриваемая задача относится к классу так называемых *некорректно поставленных обратных задач*, т.е. для нее не выполняются все три условия корректности Адамара (разрешимость задачи, единственность решения, устойчивость решения по отношению к ошибкам входных данных). Эти трудности хорошо известны спектроскопистам, поскольку задача определения матрицы силовых постоянных \mathbf{F} из уравнения (1) практически всегда оказывается либо недоопределенной, либо несовместной, либо недоопределенной и несовместной одновременно.

Для преодоления произвола в расчете силовых постоянных очень важно использовать устойчивые методы решения обратной колебательной задачи, приводящие к получению устойчивых решений с некоторыми заданными свойствами. Такие решения могут быть получены с использованием подходов, развиваемых в теории некорректно поставленных задач [1]. Именно этот аппарат был использован в наших работах для решения обратных задач колебательной спектроскопии в различных постановках, учитывающих специфику широко используемых моделей силовых полей.

Таким образом, обратная колебательная задача является примером некорректно поставленной задачи, для которой в общем случае не выполняются все три условия корректности. Для преодоления произвола в расчете силовых постоянных очень важно использовать устойчивые методы решения обратной колебательной задачи, приводящие к получению устойчивых решений с некоторыми заданными свойствами.

Несмотря на неблагоприятные математические свойства, данная задача привлекала внимание многих исследователей, так как знание силовых постоянных позволяет достаточно просто оценить колебательный спектр молекулы и рассчитать термодинамические свойства вещества. Особенно это оказывается удобным при необходимости оценок термо-

динамических свойств неустойчивых и лабильных соединений. Для проведения таких расчетов и создаются базы по силовым постоянным.

В подобных базах данных по молекулярным силовым постоянным лежит эмпирическое правило переносимости силовых постоянных. В свою очередь это правило основывается на известных постулатах классической теории строения молекул.

Первые молекулярные силовые поля были получены из чисто эмпирических расчетов, которые выполнялись с использованием независимых систем внутренних координат, что в свою очередь затрудняло перенос силовых постоянных в рядах родственных молекул. Как правило, при формулировании модели силового поля и формировании списка силовых постоянных для переноса в ряду соединений близкого строения был необходим ряд ограничений – число силовых постоянных должно было быть не очень большим (в общем случае это верхний или нижний треугольник симметрической матрицы, включающий в себя $n(n+1)/2$ величин). Поэтому вводились разного рода предположения, например, о малости постоянных взаимодействия между удаленными фрагментами, критерием удаленности обычно выступало число атомов между рассматриваемыми фрагментами (т.н. порядок окружения), о равенстве силовых постоянных отвечающих фрагментам, имеющим одинаковое первое окружение и т.д.. Использование независимых систем обобщенных координат означает, что для тех блоков матрицы силовых постоянных, которые относятся к молекулярному фрагменту групп $=XU_2$, $-XU_3$, циклов и т.п., формально необходимо в матрице силовых постоянных поддерживать не локальную симметрию данной функциональной группы, а учитывать наличие линейных зависимостей между силовыми постоянными. На практике это достаточно сложно реализуемая задача, поэтому, как правило, в моделях силовых полей при эмпирических расчетах ограничивались учетом локальной симметрии без учета линейных зависимостей.

В подходе, развитом в наших работах [2,3], реализованы модели, в которых сформулированы и формализованы ряд как явных, так и неявных модельных соображений относительно характера силовых полей, которые широко используются в т.н. анализе нормальных колебаний спектроскопии (например, свойство переносимости силовых постоянных в рядах родственных соединений.). Нами предложено все необходимые модельные предположения принимать во внимание с помощью априорного выбора некоторой матрицы F^0 , полученной либо из расчетов для родственных или модельных молекул, или каким-либо иным путем (например, из квантовомеханических расчетов) и заданным мно-

Релаксирующая функция $u(t)$, соответствующая для всего потока студентов, аппроксимируется линейной суперпозицией [2]:

$$u(t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N p_j \exp(-\lambda_j t), \quad (2)$$

где p_j - статистический множитель; λ_j - параметр, характеризующий вероятность «забывания» отдельного j -того студента. Величина λ_j - зависит от многих факторов, однако, в первую очередь от физиологических особенностей коры головного мозга данного субъекта.

Выражение (2) можно записать в интегральной форме:

$$u_\delta(t) = \int_c^d \varphi(\lambda) \exp(-\lambda t) d\lambda, \quad (3)$$

где $\varphi(\lambda)$ - некоторая искомая функция распределения студентов по параметру «забываемости», $u_\delta(t)$ - временная зависимость средней оценки уровня промежуточных знаний (в 100 балльной системе) студента, определенная в среднеквадратичной ошибки δ . Причем

$$\int_a^b \varphi(\lambda) d\lambda = 0. \quad (4)$$

Обратная задача (3) – относится к интегральным уравнениям Фредгольма первого рода с ядром аperiодического типа [3]. Перепишем выражение (3) в виде:

$$\int_0^\infty K(\lambda, t) \varphi(\lambda) d\lambda = u_\delta(t), \quad (5)$$

где ядро $K(\lambda, t) = \exp(-\lambda t)$ - аperiодическая экспоненциальная функция, $\varphi(\lambda)$ - искомая функция распределения; $u_\delta(t)$ - экспериментальные данные, определенные с погрешностью δ , причем $\lambda \in [c, d]$. Допустим функция $\varphi(\lambda)$ - является гладкой, непрерывной на отрезке $[a, b]$, и имеет производную, интегрируемую на $[a, b]$ с квадратом.

Решение интегрального уравнения (4) приводит к обратной задаче восстановления $\varphi(\lambda)$ по приближенным значениям правой части $u_\delta(t)$, что и является признаком некорректно поставленной задачи [4]. Для решения этой задачи использовался алгоритм численного решения интегральных уравнений Фредгольма первого рода на ЭВМ, разработана на основе метода регуляризации А.Н. Тихонова [5]. При этом в качестве

Постановка обратной задачи формирования остаточных знаний студентов

Усманов С.М., Бадрtdинова Ф.Т., Волкова Т.И.

БирГСПА, Бирск, e-mail: Fairusa85@mail.ru

Аннотация

В работе проведены математическая формализация и постановка обратной задачи формирования остаточных знаний студентов.

Обозначим через x_{j0} уровень первоначальных знаний (по сто балльной шкале) отдельного j -го студента по конкретному предмету. Предположим в изучаемом курсе всего обучается 120 студентов ($N = 120$).

Естественно, студент с течением времени (t) «забывает» часть полученной информации. Как отмечено в учебниках педагогики [1], «образованность» молодого человека составляют те знания, умения и навыки, которые у него остались по истечению нескольких лет ($t_k = 1 - 2$ года). Остаточные его знания обозначим через u_j , а промежуточные знания через $x_j(t)$.

Допустим, что «забывание» полученное j -ым студентом первоначальные знания убывают по экспоненциальной зависимости [2]:

$$x_j(t) = x_{j0} \exp(-\lambda_j t), \quad (1)$$

где λ_j - параметр, характеризующий вероятность «забывания» информации за единицу времени.

Набор первоначальной системы оценок N студентов составляют $x_{01}, x_{02}, x_{03}, \dots, x_{0N}$; тогда остаточные знания данного курса опишется совокупностью: $u_1, u_2, u_3, \dots, u_N$.

жеством априорных ограничений \mathbf{D} на искомую матрицу \mathbf{F} . Множество \mathbf{D} определяет вид искомой матрицы в рамках выбранной модели (т.е. определяет положение нулей и соотношения величин диагональных и недиагональных элементов в матрице \mathbf{F} , равенство ряда постоянных и т.п.). Если мы не имеем никаких априорных сведений о виде решения, то полагаем $\mathbf{D} = \mathbf{R}^{n(n+1)/2}$.

На основе этой формализации был предложен принцип отбора единственного решения из множества решений в рамках теории регуляризации А.Н.Тихонова, сформулированный в смысле близости решения к некоторому данному элементу (матрице силовых постоянных) $\mathbf{F}^0 \in \mathbf{R}^{n(n+1)/2}$, удовлетворяющему всем априорным предположениям о модельных характеристиках решения. В случае несовместности обратной задачи (это может быть в случае использования частот изотопомеров или другой дополнительной информации, ведущей к несовместности в рамках гармонической модели) можно ставить задачу поиска матрицы \mathbf{F} , для которой расстояние от $\mathbf{A}\mathbf{F}$ до \mathbf{A} (в произвольных единицах) является минимальным, т.е. поиска так называемого псевдорешения задачи (если $\mathbf{D} \neq \mathbf{R}^{n(n+1)/2}$, т.н. квазирешения). В случае неединственности и псевдо(квази)решения необходимо поступать так же, как и в случае неединственности решения – т.е. выбирать из всех возможных псевдо(квази)решений то, которое является ближайшим к заданной матрице \mathbf{F}^0 (нормальное псевдо(квази)решение).

Приходим к следующей формулировке обратной задачи, приняв во внимание сформулированный выше принцип отбора решения.

Предположим, что имеем уравнение (1) и оператор \mathbf{A} , который сопоставляет некоторой симметричной и положительно определенной матрице \mathbf{F} набор квадратов колебательных частот молекулы (возможно включая частоты изотопомеров), а также средние амплитуды колебаний, кориолисовы постоянные и т.п. величины, получаемые из эксперимента. Размерность вектора определяется числом известных экспериментальных данных. Так как симметричная матрица \mathbf{F} определяется $n(n+1)/2$ элементами, можно рассматривать неизвестные силовые постоянные как вектор из пространства размерности $n(n+1)/2$. Тогда оператор \mathbf{A} действует из евклидова пространства $\mathbf{R}^{n(n+1)/2}$ в евклидово пространство \mathbf{R}^l . В обоих пространствах введем следующие нормы:

$$\|\mathbf{F}\| = \left(\sum_{k=1}^1 f_k^2 \right)^{1/2}; \quad \|\mathbf{A}\| = \left(\sum_{k=1}^1 \lambda_k^2 \rho_k \right)^{1/2},$$

Секция 4. Использование статистических методов в педагогических исследованиях

где $k > 0$ – веса; f_k и λ_k элементы F и Λ .

Оператор A является непрерывным для всех рассматриваемых задач. Уравнение (1) может иметь неединственное решение, либо вообще никакого решения, из-за ангармоничности частот колебаний.

Предположим, что известна некоторая матрица F^0 (вектор размерности $n(n+1)/2$). Необходимо найти нормальное псевдо(квази)решение уравнения (1), т.е. решить задачу: требуется найти

$$F_n = \operatorname{argmin} \|F - F^0\|, F \in \{F : F \in D, \|AF - \Lambda\| = \mu\},$$

$$\text{где } \mu = \inf \|AF - \Lambda\|, F \in D.$$

Элемент $F^0 \in D$ может быть определен из априорных соображений о виде решения (как указывалось выше, с привлечением данных квантовомеханического расчета и других идей, например, о переносимости силовых постоянных в ряду сходных фрагментов разных молекул), а D является замкнутым множеством априорных ограничений на силовые постоянные. Если ограничений нет, то $D = R^{n(n+1)/2}$.

Нам неизвестны точный вид ни вектора, ни оператора A . Имеется только вектор Λ_δ , определенный из экспериментальных данных как $\|\Lambda - \Lambda_\delta\|$, ($\delta > 0$ – экспериментальная ошибка: $\|\Lambda - \Lambda_\delta\| \leq \delta$) и оператор A_h , приближающий оператор A ; $h \geq 0$ – параметр, характеризующий близость A_h к A . Погрешность оператора A связана с ошибками в экспериментальных данных о геометрических параметрах в равновесной конфигурации. Следовательно, возникает задача решения уравнения (1), когда неизвестны точный вид A и, а известны лишь их приближения A_h и δ и их ошибки $\eta = (h, \delta)$. Необходимо найти вектор F_η , приближающий точное нормальное псевдо(квази)решение F_n .

Принимая вышесказанное во внимание, можно сформулировать следующую задачу.

Пусть дано уравнение (1): требуется найти по приближенным данным $\{A_h, \delta, h\}$ приближение $F_\eta \in D$ к решению F_n такое, что

$$F_\eta \rightarrow F_n$$

при $\eta \rightarrow 0$, т.е. алгоритм поиска F_n должен быть регуляризирующим по Тихонову.

Ряд других формулировок рассмотрен в [2,3]. Обсуждены особенности решения нелинейных некорректных задач в конечномерном случае,

симум просто отсутствует [10]. Параметр W в (5) – энергия активации, значение которого для расчета ω_s принималась из оценок по способу Гарлика-Гибсона.

Результаты расчетов представлены в таблице.

таблица

Параметры электрически активных дефектов

Способ расчета.	W , эВ	ω_s , с ⁻¹
Температурное положение максимума пика	0,51	5,16 · 10 ⁸
Гарлика - Гибсона	0,53	
Парциальной полуширины пика	0,53	

Выводы

Таким образом, исследуя спектр ТСТ, удалось оценить глубину залегания ловушечных состояний, а так же эффективный частотный фактор, по значению которого можно сделать вывод, что в исследуемом материале термостимулированные процессы сопровождаются сильным перезахватом. Следует отметить, что все три использованных способа расчета дали фактически одинаковый результат, что говорит о достоверности полученных результатов.

Литература

- Friend R.H., Gymer R.W., Holmes A.B., Burroughes J. H., Marks R.N., Taliani C., Bradley D.D.C., Dos Santos D.A., Bredas J.L., Lögdlund M., Salaneck W.R. // Nature. – 1999. – 397. – p. 121.
- Hadziioannou G., van Hutten (Eds.) P.F. Semiconducting Polymers: Chemistry, Physics and Engineering, Wiley-VCH, Weinheim, 2000.
- Салазкин С.Н. // Высокомол. Соед. – 2004. - Б 46. – с. 1244.
- Rasmusson J.R., Kugler Th., Erlandsson R., Lachinov A., Salaneck W.R. // Synth.Met. – 1996. - 76. – с. 195.
- Пономарев А.Ф., Красильников В.А., Васильев М., Лачинов А.Н. // ЖТФ. – 2003. - 73. – с. 137.
- Милнс А. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. М.: Мир, 1977. - 562 с.
- Garlick G.F.J., Gibson A.F. // Proc. Phys. Soc. – London, 1948. – N 60. – P. 574 – 590.
- Grossweiner L. J. // J. Appl. Phys. – 1953. – V.24. – N 10. – P. 1306-1307.
- Pickard P.S., Davis M.V. // J. Appl. Phys. – 1970. – V.41. – N 6. – P. 2636-2643.
- Гороховатский Ю.А., Бордовский Г. А. Термоактивационная токовая спектроскопия высокоомных полупроводников и диэлектриков. – М.: Наука, 1991. – 248 с.

к которым относится и обратная колебательная задача, дана общая формулировка тихоновской схемы построения регуляризующего алгоритма для решения основной задачи, т.е. построения по приближенным данным элемента, сходящегося к множеству нормальных решений при стремлении погрешностей оператора и входных данных к нулю.

Один из предложенных регуляризующих алгоритмов [2, 3] расчета силового поля молекулы основан, например, на минимизации функционала Тихонова:

$$M^{\alpha}[F]=\|A_{\delta}F-\Lambda_{\delta}\|^2 + \alpha\|F-F^0\|^2, \quad (4)$$

где α - параметр регуляризации, выбираемый в процессе минимизации по обобщенному принципу невязки [1]. Второй член в (4) называется стабилизатором функционала.

Минимизация $M^{\alpha}[F]$ осуществляется на заданном множестве априорных ограничений D и находится так называемое нормальное решение (или нормальное псевдорешение, если задача несовместна), которое воспроизводит экспериментальные данные в пределах заданной погрешности δ с учетом возможной несовместности и является ближайшей (в смысле выбранной метрики) к матрице F^0 . Множество априорных ограничений D может быть сформулировано в виде различных ограничений на величины силовых постоянных (некоторые силовые постоянные $f_{ij}=0$, $n_{ij} \leq f_{ij} \leq m_{ij}$; $f_{ij}=f_{ki}$, и т.д.). Также возможен и полезен в ряде случаев совместный расчет силового поля для ряда родственных молекул [2, 3].

Бурное развитие эффективных численных методов для квантовохимических расчетов достаточно сложных молекулярных структур (в том числе с учетом корреляции электронов) позволило перейти к массовым расчетам разнообразных молекулярных систем и к появлению т.н. модельной химии. То есть появилась возможность проведения на одном уровне теории расчетов для большого числа молекул и, таким образом, возможность для сопоставления данных не только с экспериментальными данными, но и между собой. В области расчетов колебательных спектров это означало, что можно анализировать теоретические молекулярные силовые постоянные и на основе этого анализа вырабатывать модели силовых полей, которые могли бы эффективно использоваться для предсказаний неизученных соединений, что и было предложено в наших работах. Кроме того теоретические данные позволили не только обнаружить какие-либо внешние признаки, характерные для матриц силовых постоянных тех или иных соединений или классов соединений, но также и понять природу различий между ними. Особенно удобно это оказалось при использовании полной системы естественных координат

[2,3]. Нами было предложено также использовать квантовохимические данные для расчета т.н. регуляризованных силовых полей (РКМСП). В качестве принципа отбора в этом подходе предлагается использовать близость по норме к заданной квантовомеханической матрице силовых постоянных.

На основе этих и ряда других регуляризирующих алгоритмов решения задач колебательной спектроскопии и структурной химии создан комплекс программ СПЕКТР [2,3]. В комплексе используются современные высокоэффективные и быстродействующие алгоритмы на основе теории регуляризации, позволяющие одновременно минимизировать до десятков тысяч параметров. Наряду с реализацией общего подхода в соответствии с идеями теории регуляризации, в программном комплексе сохранена возможность сужения множества определяемых параметров путем наложения жестких ограничений, часто применяемых в практике спектральных и структурных расчетов.

В данный комплекс программ также включен ряд сервисных программ (для анализа симметрии молекулярной структуры, подготовки входного файла для решения колебательных задач, визуализации молекулярной структуры и др.), также представляющие собой оригинальные разработки авторов комплекса программ.

Главными отличительными чертами пакета являются:

- 1) Возможность применения различных систем координат (в том числе декартовых, естественных, зависимых и независимых);
- 2) Использование строгого анализа симметрии;
- 3) Широкое применение данных квантовомеханических расчетов;
- 4) Возможность обработки разнообразных комбинаций экспериментальных данных в рамках единой программы;
- 5) Поддержка разнообразных представлений решения (в том числе и параметрических);
- 6) Возможность специального моделирования решения – введение попарных равенств силовых элементов в различных молекулах, наложения нулевых ограничений на некоторые элементы, совместный расчёт родственных соединений и т.п.;
- 7) Автоматизация расчёта с элементами экспертной поддержки.

База данных по регуляризованным силовым постоянным азосоединений

Быстрый прогресс и широкое распространение квантовомеханических расчетов многоатомных молекул не могут, в силу известных ограничений, связанных с размерностями задач, полностью заменить эмпи-

$$E = 23kT_m, \quad (1)$$

где T_m – температура максимума пика, k – постоянная Больцмана. Способ температурного положения пика может быть использован лишь для грубой оценки энергии активации, поскольку числовой коэффициент в (1) зависит от значений эффективного частотного фактора, скорости нагревания и от порядка кинетики релаксационного процесса. Более точно можно произвести расчет глубины залегания ловушечных состояний, используя способ начального подъема кривой ТСТ, известный в литературе как способ Гарлика – Гибсона [7]. Наклон прямой, получающийся при построении начального участка пика термостимулированного тока в координатах Аррениуса, позволяет рассчитывать энергию активации:

$$\frac{d \ln I(T)}{d(1/kT)} \approx -W. \quad (2)$$

Так же был использован способ парциальной полуширины пика [8]. Суть этого способа заключается в следующем. По кривой термостимулированного тока наряду с температурой максимума определяются низкотемпературная (ΔT_-) и высокотемпературная (ΔT_+) полуширины пика, т.е. интервал температур, в пределах которых термостимулированный ток больше или равен половине своего максимального значения. Из условия:

$$I(T_m - \Delta T_-) = I(T_m + \Delta T_+) = \frac{1}{2} I(T_m) \quad (3)$$

можно получить выражение для расчета энергии активации по полуширине пика:

$$W = G_- \frac{kT_m(T_m - \Delta T_-)}{\Delta T_-} = G_+ \frac{kT_m(T_m + \Delta T_+)}{\Delta T_+}, \quad (4)$$

где G_- , G_+ — коэффициенты, величины которых зависят от порядка кинетики релаксационного процесса и значения эффективного частотного фактора. Согласно [9], в случае кинетики релаксации первого порядка коэффициент G в формуле (4) может принимать значения от ,42 (при $\omega_s \approx 10^{12} \text{ c}^{-1}$, т.е. слабый перезахват) до 1,5 (при $\omega_s \approx 10^8 \text{ c}^{-1}$, т.е. сильный перезахват). Поскольку коэффициент G зависит от степени перезахвата, рассчитан эффективный частотный фактор:

$$\omega_s = \frac{W^2 \beta}{2k^2 T_m^3} \exp\left(\frac{W}{kT_m}\right). \quad (5)$$

Предполагается, что имеет место сильный перезахват. Поскольку в случае слабого перезахвата эффективный частотный фактор в принципе не может быть найден подобным образом, так как на кривой ТСТ мак-

Линника МИИ-4. Типичная толщина образцов составляла 1 - 2 мкм. Качество и однородность полимерной пленки контролировались методами оптической, электронной просвечивающей и зондовой сканирующей микроскопии аналогично тому, как это было сделано в работе [4].

Экспериментальный образец представлял собой многослойную структуру типа «сэндвич» металл-полимер-металл аналогично работе [5]. Температура изменялась в диапазоне от 100 до 450 К со скоростью 3 К/мин, а напряжение подаваемое на образец в процессе фотовозбуждения и нагревания составляло 15 В. Металлические электроды изготавливались методом термодиффузионного напыления металла в вакууме. Один электрод изготавливался на поверхности стеклянной полированной пластины, а второй на поверхности полимерной пленки. В качестве материалов электрода использовался алюминий.

Результаты измерений

На рис.1 представлен типичный спектр ТСТ. На полученной зависимости термостимулированного тока можно выделить три характерных участка. Первый (I) – «низкотемпературный», расположенный в диапазоне температур от 150 К до 220 К представляет собой участок незначительного роста тока, сопровождающийся флуктуационными скачками сравнительно небольшой амплитуды. На втором участке (II) – «участке максимума» (от 220 К до 300 К) – наблюдается пик термостимулированного тока. На третьем (III) - «высокотемпературном» участке (от 300 К до 450 К) – наблюдается некоторый спад термостимулированного тока с температурой, который при температуре ≈ 350 К меняется на рост.

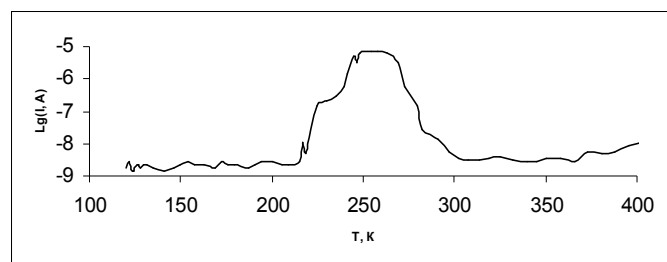


Рис.1 Спектр ТСТ, измеренные при скорости нагревания 3 К/мин и напряжении 15 В.

Из зависимости термостимулированного тока от температуры, представленной на рис. 1 можно оценить энергию активации, определяемая по способу температурного положения пика [6]:

рические расчеты, являющиеся иногда единственной возможностью оценки силовых постоянных громоздких молекулярных систем. Накопление данных о силовых постоянных необходимо как для предсказаний спектров неисследованных соединений и оценки термодинамических свойств веществ, так и для создания и развития адекватных физических моделей, проясняющих характер и распределение внутримолекулярных сил.

Поскольку число известных соединений приближается к десяти миллионам и далеко не для всех соединений имеются исследования молекулярных спектров, создание единой библиотеки данных по строению и колебательным спектрам для всех классов веществ является неосуществимой задачей. В прагматическом плане более актуальным является создание развитых баз спектральных данных по определенным классам или группам соединений, которые включают в себя не только известные экспериментальные данные, но и при необходимости дают возможность теоретического анализа рассматриваемых систем, например, анализа нормальных колебаний и/или расчета термодинамических функций. Для решения двух последних задач требуется наличие соответствующих сведений по геометрическим параметрам структуры и молекулярным силовым полям. При этом используемые силовые постоянные должны обладать гарантированными свойствами переносимости в рядах родственных соединений. Расчет силовых постоянных производится с использованием экспериментальных данных о колебательных спектрах, причем в последнее десятилетие, как правило, все больше и больше опирается на результаты квантовохимических расчетов, которые сами по себе становятся неотъемлемой частью спектрального эксперимента. При создании базы данных по регуляризованным силовым постоянным в качестве первого этапа выбраны ключевые молекулы из основных рядов азосоединений, в том числе содержащие различные группы, из которых возможен «синтез» фрагментов нуклеиновых кислот и соединений, являющихся коферментами в их метаболизме.

Основные требования, которым должна удовлетворять современная база данных по спектральным постоянным многоатомных молекул для того, чтобы представлять собой полезный и эффективный инструмент для проведения как прикладных, так и фундаментальных исследований, следующие:

- а) ограничение по кругу объектов, включаемых в БД по классам соединений и по тем или иным дополнительным критериям;
- б) наличие обширной картотеки эталонных ИК-спектров поглощения, существования данного вещества с достаточным разрешением;

в) наличие банка данных по силовым постоянным и геометрическим параметрам молекул для возможной оперативной оценки теоретических колебательных спектров молекулы и расчета термодинамических свойств вещества;

г) возможность унификации выбора систем обобщенных координат и моделей силовых полей, используемых при решении колебательных задач;

д) использование устойчивых численных методов для получения силовых постоянных, обладающих свойством переносимости в рядах родственных соединений, с целью последующего включения рассчитанных величин в БД;

е) наличие квантовохимических данных, соответствующих определенному уровню теории (или ряду таких уровней в рамках т.н. модельной химии) и обеспечивающих достаточное надежное предсказание свойств молекул рассматриваемых классов;

ж) возможность идентификации смеси веществ.

Основой описываемой системы является разработанный ранее [4-6] комплекс программ, созданный с использованием среды программирования Microsoft Developer Studio; программирование выполнено на языке C++ с помощью компилятора Microsoft Visual C++ с использованием технологии MFC (Microsoft Foundation Classes). В комплексе программ заложена возможность общения с существующими (или новыми) базами данных в стандарте SQL (структурированный язык запросов). Это дает возможность подключения практически любой стандартной реляционной базы данных, как в локальном, так и в сетевом варианте. Программная оболочка поддерживает анализ и импорт данных из стандартных выходных файлов широко используемых программ квантово-механических вычислений (в том числе GAUSSIAN, GAMESS, Природа). Поддерживаются также стандартные форматы представления спектральных данных (форматы ASP и JDX). Данный комплекс программ специально адаптирован для задач создаваемой информационной системы с учетом специфики рассматриваемых молекулярных структур.

БД имеет сложную гибридную архитектуру и состоит из статического справочного блока (экспериментальные, расчетные, модельные и справочные данные по колебательным спектрам включаемых в БД соединений) и динамического блока или информационно-вычислительной интегрированной системы. Таким образом, весь комплекс программ БД включает

- программу-оболочку
- собственно базу данных по молекулярным постоянным

Оценка параметров электрически активных дефектов в полидифениленфталиде

Лачинов А.Н.¹, Мошелёв А.В.², Пономарёв А.Ф.².

1 ИФМК УНЦ РАН, Уфа

2 БурГСПА, Бурск, Mosh_Alexey@bk.ru

Аннотация

В работе произведена оценка параметров электрически активных дефектов несопряженного полимера – полидифениленфталида по данным спектров термостимулированного тока.

Введение

Полимерные материалы представляют большой теоретический и практический интерес в связи с активным использованием их в качестве основных элементов электронных устройств, таких как тонкопленочные транзисторы, органические фотоэлементы и светодиоды [1,2]. Изготовление подобного рода устройств требует знаний об электрических свойствах данных материалов, которые сильно зависят от наличия в полимере ловушечных состояний, их концентрации и распределении. Эти параметры можно получить на основе анализа спектров термостимулированного тока (ТСТ). В связи с этим целью данной работы явилось исследование спектров ТСТ несопряженного полимера и на основе этих данных расчет параметров ловушечных состояний данного материала.

Объект и метод исследования

В качестве объекта исследования был использован несопряженный полимер из класса полиарилеифталидов - полидифениленфталид (ПДФ) [3]. Этот полимер обладает хорошими пленкообразующими свойствами. В работе [4] было показано, что при соблюдении определенных технологических условий ПДФ образует сплошные однородные пленки в интервале толщин 0.05–1 мкм. Полимерная пленка формировалась методом центрифугирования из раствора. Контроль толщины пленки осуществляли интерферометрическим методом с помощью интерферометра

Список литературы

Мухтахов М.В., Шукин П.В., Хатымов Р.В. Скрытые перегруппировочные процессы в короткоживущих отрицательных молекулярных ионах // Изв. АН, Сер. Химическая – 2006. - №2. – С.№367.

Хвостенко В.И. Масс-спектрометрия отрицательных ионов в органической химии.- М.: Наука, 1981. - 159 с. (С. 10, 113-125).

Хвостенко В.И., Мазунов В.А., Фалько В.С., Хвостенко О.Г., Чанбарисов В.Ш. Долгоживущие молекулярные анионы. Масс-спектрометрическое исследование недиссоциативного захвата электронов надтепловых энергий. // Хим. физика. - 1982. - №.7. - С.915-921.

Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач.- М.: Наука, 1986.- 288 с.

Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач.- М.: Наука, 1990.- 232 с.

Усманов С.М. Релаксационная поляризация диэлектриков. Расчет спектров времен диэлектрической релаксации.-М.: Наука, 1996. -144 с.

Usmanov S.M., Zaikov G.E Numerical methods of solving ill-posed problems of dielectric spectrometry.-New York: Nova Science Publishers, Inc, 2002.- 156 p.

Tung L.H. //J. Appl. Polym. Sci. - 1966. -v.10. P. 375-385.

Tung L.H. //Separ. Sci. -1970.-V.5 -N4. -p. 429-436.

- поисковый модуль
- программы для анализа нормальных колебаний молекулы и расчета молекулярных силовых полей
- программы для расчета термодинамических свойств веществ
- комплекс программ для распознавания образов
- ряд сервисных программ и программ визуализации
- средства подготовки и отображения отчетных материалов
- модуль экспертной поддержки.

Существенной частью базы данных является набор утилит, позволяющих преобразовать данные различных видов в единый формат и, таким образом, осуществлять импорт и (если требуется) экспорт материалов, а также соответствующие шаблоны. Структура БД позволяет при необходимости вводить новые поля, сохраняя возможность использования старых данных (без этих полей) без их модификации.

Введение описания структуры данных аналогично структуре файлов графического формата TIFF, где описание каждого изображения может содержать (помимо нескольких обязательных полей) произвольное число дополнительных полей. В базе данных предполагается доступность справочных данных по спектральным и структурным параметрам ряда

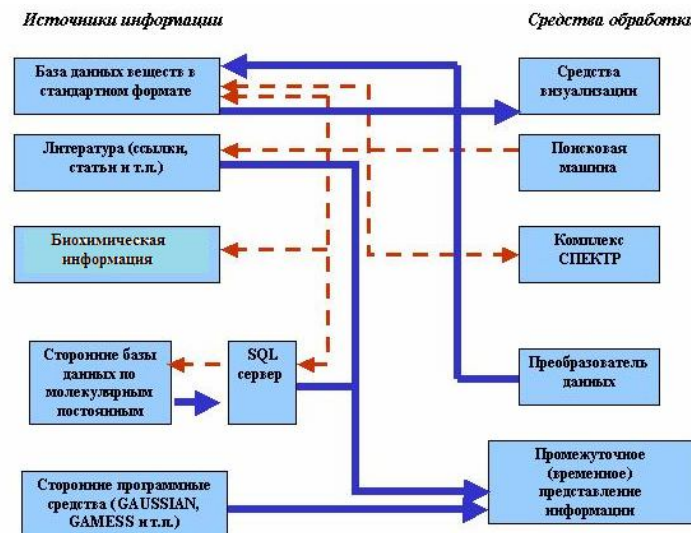


Рис. 1. Общая схема БД по молекулярным постоянным азосоединений.

производных пиридина, пиримидина, пиридоксаля и др. азосоединений и возможность их активного использования в прикладных расчетах. Информационная база структурирована по различным кластерам: экспериментальные данные, теоретические данные, литературные (справочные) данные по строению, колебательным спектрам, силовым полям и другим молекулярным постоянным, а также физико-химическим свойствам индивидуальных веществ и хранится в специально разработанных таблицах «молекула» и «вещество», помещенных в блок «Вещество».

Справочные данные общего характера (характеристика химических и физико-химических свойств различных классов соединений, включенных в БД и другая информация) хранятся в блоке «Документы». Структура базы данных представлена на рис.1.

Основой динамической части информационно-вычислительной интегрированной системы является созданный ранее комплекс программ "СПЕКТР" [2,3].

Модели силовых полей для сложных молекулярных и надмолекулярных структур

Первый шаг при создании базы данных по силовым постоянным – выбор группы молекул с заданным фрагментом, которые должны содержать необходимые связи и топологию, наиболее часто встречающуюся в подобных соединениях.

В качестве ключевых соединений выбраны молекулы из различных рядов азосоединений, такие как пиазин, пиридин, пиримидин, пурин и др.

Для этой группы молекул на ряде теоретических уровней (HF, MP2, методы DFT) с рядом базисных наборов различной полноты (6-31G*, 6-31+G**, 6-311++G**, корреляционно-ориентированные базисы и др.) проведены квантовомеханические расчеты, выполнена оптимизация структур с учетом возможной поворотной изомерии и расчет гармонических силовых полей. Теоретические данные по оптимизированным структурам, их энергиям, гармоническим силовым полям (в декартовых координатах) и гармоническим частотам колебаний и экспериментальные частоты колебаний помещаются в базу данных в виде таблиц. Имеющиеся экспериментальные спектры приводятся в виде текстовых таблиц в специальных форматах, а также в виде рисунков.

В отдельных таблицах приводятся квантовомеханические силовые поля, преобразованные во внутренние координаты. Пользователь имеет возможность, используя встроенный динамический блок, выполнить расчеты как прямой колебательной задачи (анализ нормальных координат)

Обратная задача масс-спектрометрии (1) решается с помощью метода регуляризации А.Н. Тихонова [4-7]. Методика численного решения интегрального уравнения Фредгольма первого рода приведена в [4]. Как и в работах Тунга [8,9] численное решение обратной задачи (1) сводится к корректировке экспериментальной расчетной КЭВ, то есть к замене $J_{\text{эсп}}(E) \equiv J(X)$ более информативной расчетной КЭВ отрицательных ионов $Z(S) \equiv J_{\text{расч}}(E)$.

В расчетной кривой КЭВ иона $[\text{NO}_2]^-$ наблюдаются три максимума (пиков) резонансных состояний, наблюдаемые при 1,1 эВ, 3,05 эВ и 3,8 эВ (рис.2). Максимумы 1.1 эВ проявляется и на экспериментальной КЭВ, приведенной на рис.1. Энергетические состояния, наблюдаемые в областях 3,05 эВ и 3,8 эВ, получены расчетным путем.

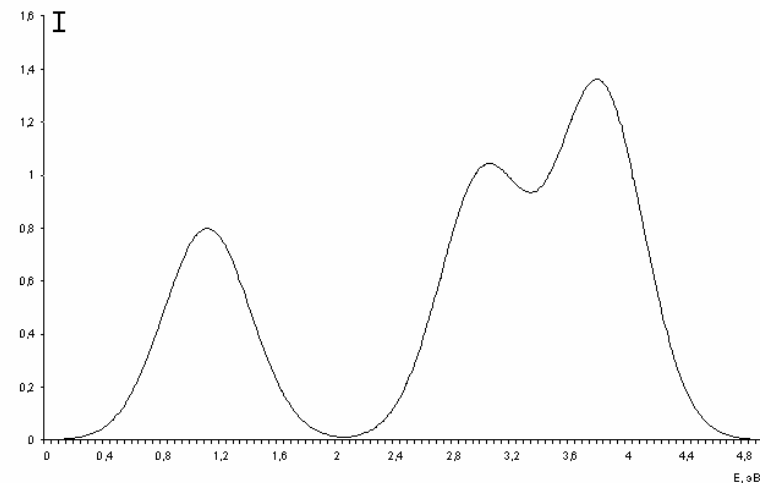


Рис.2. Корректированная КЭВ иона $[\text{NO}_2]^-$.

Выводы

Была использована методика решения обратных задачи (с численной реализацией метода регуляризации Тихонова) для корректировки кривой эффективного выхода полученной на масс-спектрометре низкого разрешения. Результаты расчетов соответствуют данным, полученным на масс-спектрометре высокого разрешения. Таким образом, решение обратной задачи методом регуляризации Тихонова может эффективно использоваться для разрешения резонансных состояний на КЭВ отрицательных ионов, полученных на масс-спектрометрах низкого разрешения.

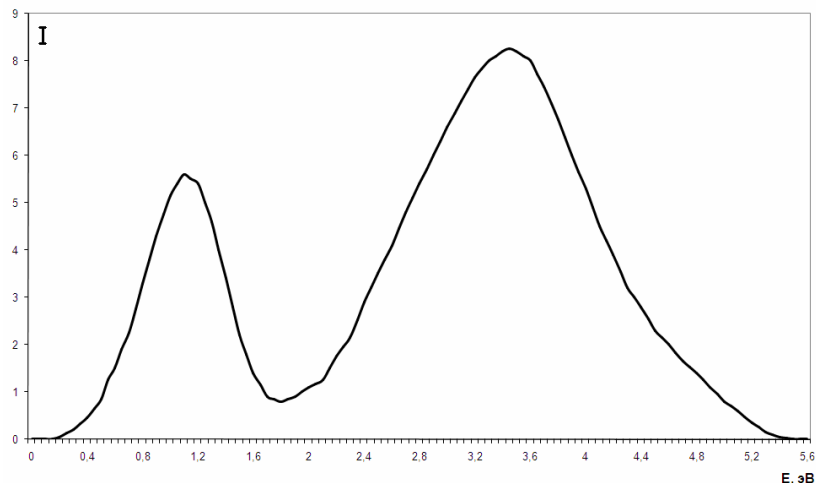


Рис. 1. Экспериментальная КЭВ иона $[\text{NO}_2]$ из нитробензола.

резонансных состояний на КЭВ. Как правило, экспериментаторов интересует количество и характеристики (местоположения) этих максимумов пиков резонансных состояний. Задача разделения сложной кривой $J_{\text{эксп}}(E)$ на ряд максимумов сводится к численному решению интегрального уравнения Фредгольма первого рода:

$$J(X) = \int_{s_1}^{s_2} Z(s) K(x-s) ds, \quad (1)$$

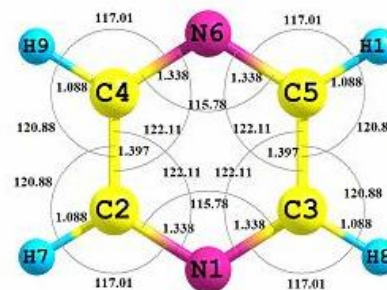
где $J(X)$ - экспериментальная кривая КЭВ иона $[\text{NO}_2]$, которая равна $J_{\text{эксп}}(E)$, представленной на рис. 1,

$$K(x-s) = 3,55 \cdot \exp[3,32 \cdot (x-s) - \exp(3,89 \cdot (x-s))], \quad (2)$$

- ядро интегрального уравнения (1). Вид ядра (2) определен путем корректировки кривой сигнала SF_6^- [1,9], которая служит репером для определения нуля на шкале энергий электронов. Кривые получены на масс-спектрометре, описанном в [10].

Действительно, когда КЭВ SF_6^- снимается без монохроматора, аппаратная кривая имеет асимметричный вид и с точностью 0,5% описывается выражением (2).

Молекула пиразина, B3LYP/6-31G*



Matrix F in internal format

6.9391	1-1
5.9110	2-2
5.5655	7-7
1.5001	1-4
1.2986	2-5
0.5989	25-25
0.5501	3-11
0.5434	3-4
0.5156	11-11
0.4623	12-12
0.4363	17-17
0.4216	1-2
0.3895	18-18
0.3862	1-17
0.3664	5-12
0.3579	4-12
-0.3333	1-12
-0.2663	2-12
0.2562	1-7

Рис. 2. Структура (B3LYP/6-31G*) молекулы пиразина и часть теоретических силовых постоянных.

нат), так и обратной колебательной задачи для выбранной молекулярной системы. Результаты расчета автоматически помещаются в соответствующий раздел базы данных. При использовании опции «вывести на печать силовые постоянные во внутренних координатах» в выходном файле появляется соответствующий блок, с силовыми постоянными во внутренних координатах. Этот блок может использоваться для дальнейших расчетов родственных систем, а также является основой для создания таблиц силовых постоянных, классифицированных в соответствии со строением соответствующего фрагмента по типам валентных связей, валентных углов и т.п.

На рис. 2 показан пример графического представления в базе данных теоретических результатов по оптимизации геометрии молекулы одного из таутомеров молекулы пиразина и часть силовых постоянных для растяжений связей. Визуализация структуры выполнена с помощью программы ChemCraft [7].

Особый интерес в последние годы вызывают сложные молекулярные и надмолекулярные структуры. Переход от модели индивидуальной молекулы к более сложной системе, учитывающей образование разного рода ассоциатов и т.п., является в общем случае крайне сложной задачей. Анализ молекулярных спектров, в частности, сложных биологических структур требует развития специальных интерпретационных схем. Задача оценки силового поля громоздких систем сталкивается с рядом трудностей, связанных с выбором систем обобщенных координат, кото-

рые могли бы сохранить преимущество общепринятых моделей силовых полей. В частности, очевидно, что наиболее удобной схемой параметризации силовых полей сложных систем является т.н. масштабирование [8], которое основано на представлении матрицы силовых постоянных в виде

$$\mathbf{F} = \mathbf{B}\mathbf{F}^0\mathbf{B} \quad (2)$$

где \mathbf{B} – диагональная матрица масштабирующих множителей, а \mathbf{F}^0 – матрица силовых постоянных, полученная их квантовохимических расчетов. Нами предложено [9] применить эту схему к декартовым координатам, что позволяет существенно сократить число определяемых параметров, а также упростить схему формирования матриц силовых постоянных для громоздких систем.

Авторы благодарят за частичную финансовую поддержку гранты РФФИ 08-03-00415а и № 08-01-97028-р_поволжье.

Литература

1. А.Н.Тихонов, А.С.Леонов, А.Г.Ягола. - Нелинейные некорректные задачи. - М.: Наука, 1995.
2. И.В.Кочиков, Г.М.Курамшина, Ю.А.Пентин, А.Г.Ягола. - Обратные задачи колебательной спектроскопии. М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1993.
3. A.G.Yagola, I.V.Kochikov, G.M.Kuramshina, Yu.A.Pentin. Inverse Problems of Vibrational Spectroscopy. - Zeist, The Netherlands: VSP, 1999.
4. И.В.Кочиков, Г.М.Курамшина, Л.М.Самков, Д.А.Шарапов, С.А.Шарапова. // Вычислительные методы и программирование. - 2005, т.6, с. 83-87.
5. И.В.Кочиков, Г.М.Курамшина, Л.М.Самков, Д.А.Шарапов, С.А.Шарапова. //Вычислительные методы и программирование. - 2006, т.7, с. 111-116.
6. И.В.Кочиков, Г.М.Курамшина, Л.М.Самков, Д.А.Шарапов, С.А.Шарапова. //Вычислительные методы и программирование. - 2007, т.8, с.70-73.
7. ChemCraft (Version 1.5), <http://www.chemcraftprog.com>
8. I.V. Kochikov, G.M. Kuramshina, A.V.Stepanova, A.G. Yagola.// Вычислительные методы и программирование. - 2004, т.5, 285-290.
9. I.V. Kochikov, G.M. Kuramshina, A.V.Stepanova. //Int. J. Quant. Chem. 2008 (in press).

Анализ кривой эффективного выхода отрицательного иона NO₂ с помощью метода регуляризации Тихонова

¹Яныбин В.М., ¹Пихтовников С.В., ¹Усманов С.М., ²Мазунов В.А.

¹Бирская Государственная социально – педагогическая академия, г.Бирск
²Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, г.Уфа

Аннотация

Решается обратная задача методом регуляризации Тихонова для анализа кривой эффективного выхода отрицательного иона [NO₂⁻] из нитробензола.

Введение

В работе [1] с помощью метода резонансного захвата электронов (РЗЭ) было изучено образование отрицательного иона NO₂ из нитробензола. Кривая эффективного выхода (КЭВ) [NO₂⁻], полученная ранее [2,3] на масс-спектрометре низкого разрешения по энергии электронов представлена двумя пиками - резонансные состояния 1.1 эВ и 3,5 эВ (рис. 1).

На масс-спектрометре высокого разрешения по энергии электронов были получены следующие резонансные состояния с энергией 1.1 эВ, 3 эВ, 3,8 эВ [1].

Однако возможно применение метода регуляризации Тихонова для анализа зашумленных, плохо разрешимых резонансных состояний для КЭВ полученных на масс-спектрометрах низкого разрешения по энергии электронов.

Постановка обратной задачи

Настоящая работа посвящена анализу КЭВ отрицательного иона [NO₂⁻] из нитробензола (рис. 1) а именно разделению сложной КЭВ на ряд максимумов интенсивностей резонансных состояний (Рис. 2).

Как видно из рисунка 1, кривая J_{экл}(E) представляет собой полимодальную кривую, состоящую из ряда максимумов интенсивностей пиков

Эмпирическое исследование результатов численного эксперимента с помощью фильтрации

Житников В.П., Шерыхалина Н.М.

УГАТУ, Уфа, zhitnik@ugatu.ac.ru

Аннотация

Целью данной работы является выработка эмпирического подхода к решению проблем, связанных с верификацией результатов численного эксперимента, оценкой их точности и достоверности. В частности, большое внимание уделяется оценке погрешности округления чисел.

Введение

Идея методов фильтрации заключается в поочередном или групповом подавлении компонент помех. Методы фильтрации численных результатов позволяют почти полностью подавить регулярные составляющие погрешности численного метода. В результате становятся видными нерегулярные составляющие, включая погрешность округления, интерполяции и другие, что дает возможность их исследования. Появляются вопросы, на которые требуется получить ответы.

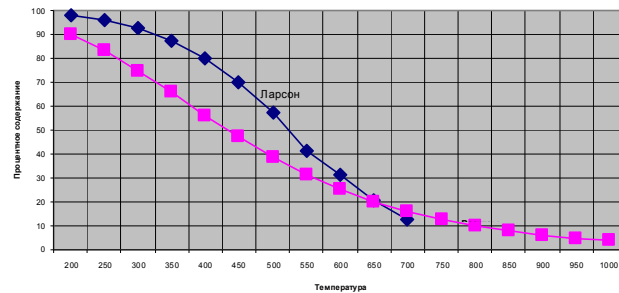
Методы фильтрации численных результатов

Рассмотрим эмпирическую модель погрешности вычисления некоторым численным методом некоторой величины z , которая допускает представление в виде суммы

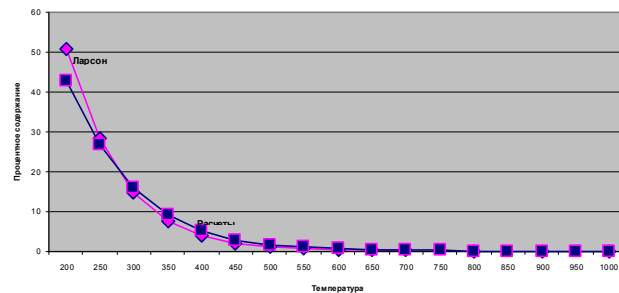
$$z_n - z = c_1 n^{-k_1} + c_2 n^{-k_2} + \dots + c_L n^{-k_L} + \Delta(n), \quad (1)$$

где z – точное значение; z_n – приближенный результат, полученный при числе узловых точек (или числе слагаемых суммы), равном n ; k_1, \dots, k_L – известные действительные числа ($k_1 < k_2 < \dots < k_L$). В $\Delta(n)$ могут входить остаточный член, погрешность округления и многие другие составляющие, обусловленные как численным методом, так и конкретной программной реализацией.

Конверсия аммиака при P 1000 атм



Конверсия аммиака при P 10 атм.



Список литературы

«Свойства газов и жидкостей» 3-е издание. Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд, Изд. Химия Ленинградское отделение, Стр. 592, 1982 г.

Пусть известно некоторое количество m численных результатов z_{n_i} при числе узлов $n = n_i, i = 1, \dots, m$.

Представим модель погрешности в более общем виде суммой различных функций $f_j(n), j = 1, \dots, L$ с неизвестными коэффициентами. Тогда доступную информацию можно представить как систему

$$\begin{aligned} z_{n_1} &= z + c_1 f_1(n_1) + c_2 f_2(n_1) + \dots + c_L f_L(n_1) + \Delta(n_1), \\ z_{n_2} &= z + c_1 f_1(n_2) + c_2 f_2(n_2) + \dots + c_L f_L(n_2) + \Delta(n_2), \\ &\dots \\ z_{n_m} &= z + c_1 f_1(n_m) + c_2 f_2(n_m) + \dots + c_L f_L(n_m) + \Delta(n_m). \end{aligned} \quad (2)$$

Это – задача идентификации математической модели по результатам численного эксперимента. Если считать $\Delta(n_j)$ неизвестными искомыми параметрами наряду с z, c_1, \dots, c_L , то неизвестных в системе (2) больше, чем уравнений и она имеет бесконечное множество решений, среди которых точное. Применяя методы регуляризации можно получить оценку \hat{z} этого точного решения z и оценку погрешности.

Решение задачи численной фильтрации заключается в устранении степенных слагаемых суммы (1) при сохранении значения константы z путем комбинации известных значений z_{n_i} .

Рассмотрим линейную комбинацию

$$\sum_{j=1}^m x_j z_{n_j} = z \sum_{j=1}^m x_j + c_1 \sum_{j=1}^m x_j f_1(n_j) + \dots + c_L \sum_{j=1}^m x_j f_L(n_j) + \sum_{j=1}^m x_j \Delta(n_j). \quad (3)$$

Наложим условия полного подавления компонент погрешности

$$\sum_{j=1}^m x_j = 1, \quad \sum_{j=1}^m x_j f_1(n_j) = 0, \dots, \sum_{j=1}^m x_j f_L(n_j) = 0. \quad (4)$$

Если $m=L+1$, и $f_j(n), j = 1, \dots, L$ – система линейно независимых функций, то система (4) имеет единственное решение. В результате из (3) получается значение $\hat{z}_{n_j} = \sum_{j=1}^m x_j z_{n_j} = z + \sum_{j=1}^m x_j \Delta(n_j)$, которое принимается в качестве оценки точного значения z .

Для случая $f_j(n) = n^{-k_j}, j = 1, \dots, L, n_j = Q^{j-1} n_1$ решение системы (4) может быть получено путем последовательного применения формулы Ричардсона, что называют методом Ромберга [1]. Фильтрацией назовем последовательное подавление компонент погрешности, т.е. опреде-

Таблица 2.

Температура Цельсий	Давление P (атм)		Энергия Гиббса
	Вычисл	Ларсон	
	1000		
200	89,77	98,29	0,571
250	83,11	96,17	2,97
300	74,9	92,55	5,44
350	65,72	87,46	7,97
400	56,27	79,82	10,56
450	47,16	69,69	13,2
500	38,82	57,47	15,88
550	31,51	41,16	18,61
600	25,29	31,43	21,39
650	20,13	20,7	24,2
700	15,93	12,87	27,5
750	12,57		29,94
800	9,908		32,85
850	7,818		35,8
900	6,18		38,79
950	4,91		41,8
1000	3,93		44,84

Таблица 3.

Вещ-во	ΔH 298	ΔS 298	ΔG 298	CPA	CPB	CPC	CPD
H2	0	0	0	6,483	0,002215	-3,30E-06	1,83E-09
N2	0	0	0	7,44	-0,0032	6,40E-06	-2,79E-09
NH3	-10,92	-0,02369	-3,86	6,524	0,005692	4,08E-06	-2,83E-09

450	2,922	2,11	7,363	5,86	10,75	9,15
500	1,72	1,21	4,606	3,49	6,992	5,56
550	1,05	0,76	2,924	2,18	5,568	3,45
600	0,664	0,49	1,897	2,25	3,024	2,25
650	0,435	0,33	1,262	1,53	2,04	1,53
700	0,293	0,23	0,861	1,05	1,405	1,05
750	0,204		0,602		0,989	
800	0,145	0,14	0,431	0,57	0,71	0,57
850	0,105		0,315		0,521	
900	0,078	0,08	0,234	0,33	0,388	0,33
950	0,059		0,178		0,295	
1000	0,045	0,05	0,137	0,21	0,227	0,21

Температура Цельсий	Давление P (атм)					
	Вычисл	Ларсон	Вычисл	Ларсон	Вычисл	Ларсон
	100		300		600	
200	72,71	81,54	82,55	95,37	87,11	95,37
250	59,18	67,24	72,4	81,38	79,06	90,66
300	45,72	52,04	61,01	70,96	69,48	84,21
350	33,82	37,35	49,58	59,12	59,2	75,62
400	24,21	25,12	39,08	47	49,08	65,2
450	16,92	16,43	30,07	35,82	39,77	53,71
500	11,66	10,61	22,71	26,44	31,64	42,15
550	7,99	6,82	16,93	19,13	24,81	31,63
600	5,489	4,52	12,52	13,77	19,26	23,1
650	3,805	3,11	9,23	9,92	14,84	16,02
700	2,673	2,18	6,81	7,28	11,4	12,6
750	1,907		5,05		8,75	
800	1,384	1,19	3,77		6,72	
850	1,021		2,85		5,19	
900	0,766	0,7	2,17		4,03	
950	0,583		1,67		3,16	
1000	0,4511	0,45	1,308		2,49	

лению отфильтрованных последовательностей $z_{n_i}^{(l)}$, $l=1, \dots, L$. Отметим, что задача фильтрации, в отличие от задачи идентификации, имеет точное, независимое от погрешностей $\Delta(n_j)$ решение.

Если $m > L + 1$, то неизвестных x_j в системе (4) больше, чем уравнений, и может быть поставлена задача на выбор оптимального (в смысле какого-то критерия) решения.

Критерий размытости оценки

Для оценки погрешности часто применяется правило Рунге: сравнение значения z_n с отфильтрованным значением $z_n^{(1)}$. Тогда результат расчета представляется в виде интервала $z = z_n^{(1)} \pm \Delta_n$. Поскольку эта оценка справедлива при допущении, что величина $z_n^{(1)}$ точнее, чем z_n , то необходима проверка справедливости этого допущения. Это можно сделать следующим образом. Повторим процесс фильтрации и получим значение $z_n^{(2)}$. Разность $\Delta_n = z_n - z_n^{(1)}$ представляет собой оценку погрешности приближенного значения z_n . Разность $\Delta_n^{(1)} = z_n^{(1)} - z_n^{(2)}$ является оценкой погрешности отфильтрованного значения $z_n^{(1)}$ или оценкой погрешности оценки погрешности. Отношение $r_n = \left| \Delta_n^{(1)} / \Delta_n \right|$ имеет смысл относительной размытости оценки погрешности. Если $r_n \ll 1$, то это означает, что относительная размытость оценки Δ_n мала, и такой оценке можно доверять. В [2] приводится обоснование порогового значения $r_n = 1/3$, в предположении, что изменения значений $\Delta_n^{(j)} = z_n^{(j)} - z_n^{(j+1)}$ при последующих гипотетических фильтрациях мажорируются суммой геометрической прогрессии. Тем самым, при $r_n \leq 1/3$ оценка принимается, иначе считается недостоверной. Ранее [3] этот вывод был получен чисто экспериментально.

Фильтрация результатов расчетов простейшими численными методами

Рассмотрим разностную производную первого порядка

$$f'(t) \approx \frac{f(t+h) - f(t)}{h} \quad (5)$$

Рассмотрим в качестве тестового примера вычисление производной функции $f(t) = \cos t$ в точке $t=0,5$ при $h=1/n$.

На рис. 1 даны зависимости $y = -\lg \delta$ (δ – относительная погрешность) от $\lg n = -\lg h$ при расчетах с двойной точностью. Линия, обозначенная цифрой 0, соответствует погрешности вычисленных непосредственно значений разностной производной, цифрами 1, 2 и т.д. – погрешности результатов первой, второй и т.д. фильтрации. Кроме того, на рисунки нанесен график линейной функции $y=19-\lg n$. На рис. 1,б даны аналогичные зависимости при расчетах с обычной точностью.

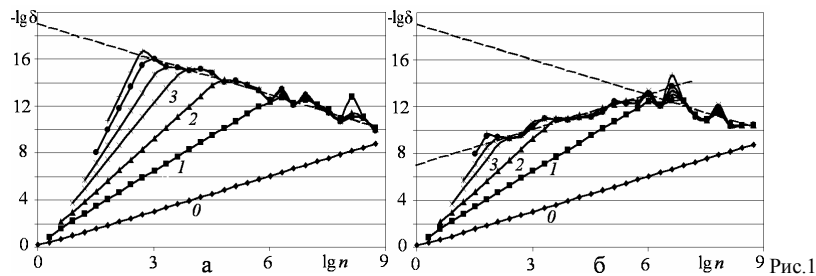


Рис.1 Фильтрация результатов численного дифференцирования (5) функции $\cos t$: а – двойная точность; б – обычная точность. Прямые $y=19-\lg n$ и $y=7+\lg n$.

Видно, что в результате повторной фильтрации погрешность уменьшается на многие порядки, причем при более грубом шаге можно получить более точные отфильтрованные значения. Это объясняется ограничением, накладываемым величиной $\Delta(n)$, обусловленной погрешностью вычисления функций. Величину $\Delta(n)$ для первой разностной производной приближенно можно представить зависимостью $|\Delta(n)| \approx \Delta_0 n$, где $\Delta_0 = 10^{-19}$. Это качественно совпадает с оценкой [1].

Фильтрация позволяет уточнять и исследовать результаты численного дифференцирования функций с особенностями. В качестве примера рассмотрим центральную симметричную разностную формулу численного дифференцирования, которая применяется для функций, имеющих непрерывную третью производную [1]

$$f'(t) = \frac{f(t+h) - f(t-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \quad \xi \in (t-h, t+h).$$

Справочные данные по веществам реакции приведены в таблице 3. Константы идеально-газовой теплоемкости выражены в кал/(моль*К), ΔH , ΔS , ΔG выражены в ккал/моль.

Таблица 1

Константы идеально-газовой теплоемкости

Температура Цельсий	Давление P (атм)
200	0,571
250	2,97
300	5,44
350	7,97
400	10,56
450	13,2
500	15,88
550	18,61
600	21,39
650	24,2
700	27,5
750	29,94
800	32,85
850	35,8
900	38,79
950	41,8
1000	44,84

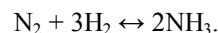
Температура Цельсий	Давление P (атм)					
	10		30		50	
	Вычисл	Ларсон	Вычисл	Ларсон	Вычисл	Ларсон
200	42,61	50,66	58,16	67,56	64,77	74,38
250	26,92	28,34	42,19	47,22	49,56	56,33
300	15,92	14,73	28,74	30,25	35,75	39,41
350	9,063	7,41	18,69	17,78	24,63	25,23
400	5,109	3,85	11,81	10,15	16,43	15,27

Расчет энергии Гиббса, константы равновесия и конверсии аммиака

Спивак С.И., Балаев А.В., Галин Д.З.

НФ БашГУ, danil_galin123@mail.ru

Расчёт константы равновесия производится для реакции синтеза аммиака из газовой смеси:



Изменение энтальпии и энтропии для химической реакции находится по следствию из закона Гесса, согласно которому изменение термодинамической функции в результате реакции равно разности сумм этих функций у конечных и начальных продуктов реакции

$$\Delta H_{298}^0 = \sum_{i=1}^k \Delta H_i - \sum_{j=1}^n \Delta H_j$$

$$\Delta S_{298}^0 = \sum_{i=1}^k S_i - \sum_{j=1}^n S_j$$

Расчет энергии Гиббса производится по следующей формуле:

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S.$$

Данные по энергии Гиббса, в диапазоне температур от 200 до 1000 °С, приведены в таблице 1.

Константа равновесия рассчитывается по формуле:

$$K_p = (\text{Exp}(-\sum \Delta G / R T)) * (P^{\Delta n}).$$

Где K_p – Константа равновесия, R – универсальная газовая постоянная (1,987 кал/моль*К), T – температура (Кельвин), P – парциальное давление, Δn – разница стехиометрических коэффициентов.

В таблице 2 приведено сводные данные о зависимости содержания аммиака (в процентах) в равновесной смеси от термодинамических условий, рассчитанные при помощи программы написанной в Delphi 7. Для сравнения в таблице приведены данные составленные Ларсоном относительно процентного содержания аммиака для широкого диапазона температур (200-1000 °С) и давления (10 – 1000 атм).

Также приведены графики зависимости конверсии аммиака от температуры при давлении 10 атм и при давлении 1000 атм.

Применим ее к функциям

$$f_1(t) = \ln(1+t+|t|^3), \quad f_2(t) = \ln(1+t+t^2 \text{sgt}), \quad \text{sgt} t = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0, \end{cases}$$

имеющим разрывы первого рода, соответственно третьей и второй производной в точке $t=0$. Результаты фильтрации даны на рис. 2.

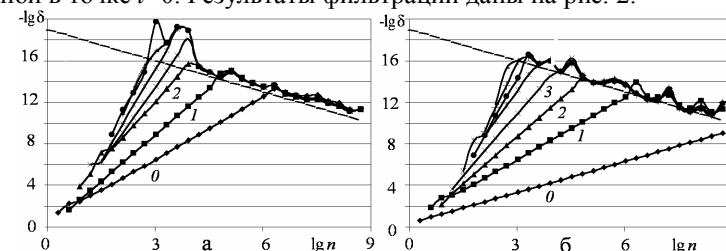


Рис.2 Результаты фильтрации для функций с разрывами первого рода: а – третьей производной; б – второй производной. Прямые $y=19-\lg n$.

Результаты показывают, что для первой функции формула (5) имеет второй порядок точности, а для второй функции – первый порядок. Это подтверждается и аналитическими методами. Значения показателей k_j в (1) следующих составляющих погрешности, несмотря на разрыв производных, возрастают последовательно на 1.

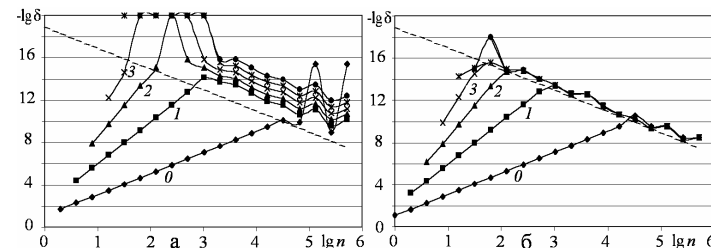


Рис.3 Фильтрация результатов вычисления второй производной: а – оценка по правилу Рунге; б – сравнение с эталоном. Прямая $y=19-2 \cdot \lg n$.

На рис. 3,а показаны результаты оценки погрешности по правилу Рунге при расчетах второй разностной производной. Видно существенное завышение оценок. Поэтому для практических оценок более целесообразно применять сравнение с единым «эталонным» значением, которое может быть получено в результате фильтраций и корректировок (рис. 3,б).

Численное интегрирование функций

В качестве примера вычислим методом средних прямоугольников интеграл от функции, представляющей собой сумму постоянной и переменной составляющих

$$\int_0^{\pi/2} (c + A \sin x) dx \approx h \sum_{i=1}^n f(x_i), \quad x_i = ih - \frac{h}{2}, \quad i = 1, \dots, n, \quad h = \frac{\pi}{2n}.$$

На рис. 4,а,б приведены графики относительной погрешности, соответствующие $A=10^{-8}$, 10^{-12} . Видно, что для $A=10^{-8}$ величина погрешности округления близка к зависимости $y=16,5-1/2 \lg n$, (верхняя пунктирная прямая). При уменьшении A (вначале для больших n) погрешность округления приближается к зависимости $y=16,5-\lg n$ (нижняя пунктирная прямая). Тем самым, малая переменная составляющая подавляет большую постоянную.

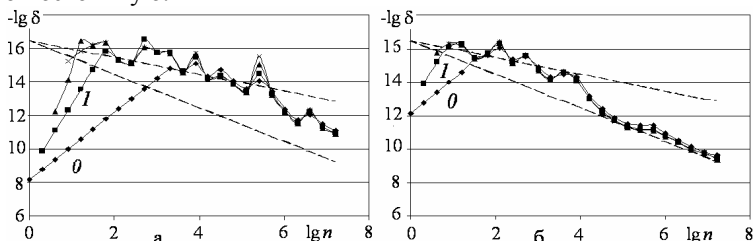


Рис.4 Результаты численного интегрирования функции $f(x)=0,1+A \sin x$: а – при $A=10^{-8}$; б – при $A=10^{-12}$. Прямые $y=16,5-0,5 \lg n$ и $y=16,5-\lg n$.

Рассмотрим в качестве еще одного примера интеграл от функции, имеющей разрыв первого рода на отрезке интегрирования

$$\int_0^1 x^3 \operatorname{sg}(x-0,5) dx, \quad \operatorname{sg} x = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

Для того чтобы разрыв всегда находился внутри отрезка разбиения при численном интегрировании, используем не удвоение, а утроение числа отрезков n . Численный эксперимент показал, что при применении метода Симпсона к такой функции погрешность описывается моделью (1). Степенная функция имеет конечное разложение в степенной ряд, поэтому вторая фильтрация полностью уничтожает погрешность метода (5,а).

Теперь рассмотрим интеграл от функции, имеющей разрыв второго рода $\int_0^1 x^{-1/2} dx$. Для численного интегрирования применялся метод пра-

$$\left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} \right|_{\tilde{r}=\tilde{c}} = -\frac{c^2}{a^2} \left(-\frac{2}{c} + \frac{4}{c} \right) = -2 \frac{c}{a^2} = -\frac{2}{\tilde{c}}$$

Аналогичное утверждение справедливо для цепочки Тоды:

Теорема 2. Пусть $u = u(n)$ – решение цепочки Тоды (3), удовлетворяющее при $r = c$ интегрируемому краевому условию (4). Тогда решение $\tilde{u} = \tilde{u}(n)$, полученное с помощью преобразования Кельвина (6) так

же удовлетворяет при $\tilde{r} = \tilde{c} = \frac{a^2}{c}$ интегрируемому краевому условию, причем

$$\tilde{u}_r(n) \Big|_{\tilde{r}=\tilde{c}} = \frac{2n}{\tilde{c}}.$$

Данные теоремы позволяют в принципе по одним известным решениям интегрируемой начально-краевой задачи строить другие решения той же задачи. Например, уравнение (1) имеет следующее частное решение, удовлетворяющее интегрируемому краевому условию (2):

$$u = -2 \ln(k(r^2 + b^2) + r(\alpha \cos \theta + \beta \sin \theta)),$$

при $\alpha^2 + \beta^2 = 4 + 4k^2 b^2$. Из теоремы 1 следует, что все функции, полученные с помощью применения преобразования Кельвина к этому и полученным решениям, удовлетворяют интегрируемому краевому условию (2):

$$u = -2 \ln \left(k \left(\frac{b^2}{a^2} r^2 + a^2 \right) + r(\alpha \cos \theta + \beta \sin \theta) \right), \dots$$

Список литературы

- В.Е.Захаров, С.В.Манакон, С.П.Новиков, Л.П.Питаевский. Теория солитонов. Метод обратной задачи. – Москва, Наука, 1980.
 Е.К.Склянин. Граничные условия для интегрируемых систем. // Функциональный анализ и его приложения. – 1987. Т. 21. № 2. – С. 86-87.
 И.Т. Хабибуллин. Уравнение sin-Гордона на полуоси. // Теория и математическая физика. – 1998. – т.114. №1. – с. 115.
 Habibullin, M. Gürses, K. Zheltukhin. Integrable boundary value problems for elliptic type Toda lattice in a disk. // Journal of mathematical Physics. – 2007. – №48, 102702.

$$u_{rr} + \frac{1}{r}u_r + \frac{1}{r^2}u_{\theta\theta} = 8e^u \quad (1)$$

допускает интегрируемое краевое условие вида

$$u_r|_{r=c} = -\frac{2}{c}. \quad (2)$$

Далее, эллиптическая цепочка Годы

$$u_{rr}(n) + \frac{1}{r}u_r(n) + \frac{1}{r^2}u_{\theta\theta}(n) = e^{u(n-1)-u(n)} - e^{u(n)-u(n+1)} \quad (3)$$

допускает следующее интегрируемое краевое условие:

$$u_r(n)|_{r=c} = \frac{2n}{c}. \quad (4)$$

Возникает задача проверки совместности данных краевых условий с тем или иным преобразованием. Оказывается, эта задача легко решается с помощью преобразования Кельвина

$$\tilde{u} = u + 4 \ln \frac{r}{a}, \tilde{r} = \frac{a^2}{r} \quad (5)$$

для уравнения Лиувилля (1) и

$$\tilde{u}(n) = u(n) - 4n \ln \frac{r}{a}, \tilde{r} = \frac{a^2}{r} \quad (6)$$

для цепочки Годы (3). Преобразование Кельвина переводит решение соответствующего уравнения в решение того же уравнения. Справедливо следующее утверждение:

Теорема 1. Пусть u – решение уравнения Лиувилля (1), удовлетворяющее при $r = c$ интегрируемому краевому условию (2). Тогда решение \tilde{u} , полученное с помощью преобразования Кельвина (5) также удовлетворяет при $\tilde{r} = \tilde{c} = \frac{a^2}{c}$ интегрируемому краевому условию, причем

$$\tilde{u}_r|_{\tilde{r}=\tilde{c}} = -\frac{2}{\tilde{c}}.$$

Действительно,

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{r}} = \frac{\partial(u + 4 \ln r - 4 \ln a)}{\partial \left(\frac{a^2}{r}\right)} = -\frac{r^2}{a^2} \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{4}{r} \right),$$

и

вых прямоугольников (чтобы не приходилось вычислять подынтегральную функцию в точке $x=0$). В результате численных исследований было установлено, что показатели в (1) имеют значения $1/2, 1, 2, 4, 6, \dots$. Результаты вычислений и фильтрации показаны на рис. 5,б. Отметим, что качественное отличие поведения зависимостей отсутствует. Разница проявляется только в появлении дополнительных слагаемых в (1) и, соответственно, в уменьшении порядка точности метода.

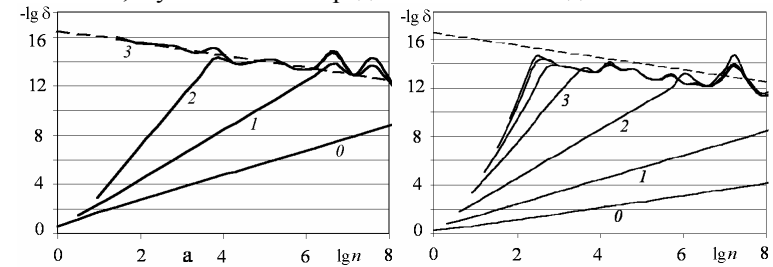


Рис.5 Фильтрация результатов вычисления интеграла на отрезке $[0,1]$ от разрывных функций: а – $x^3 \operatorname{sg}(x-0,5)$; б – $x^{-1/2}$. Прямые $y=16,5-0,5 \lg n$.

Сравнивая методы высокого порядка точности с методами фильтрации можно сказать следующее.

Метод высокого порядка сразу выдает результат с высокой точностью, но получить надежную оценку трудно. Фильтрация позволяет оценить влияние разных составляющих на общую погрешность, т. е. дает больше информации о процессе вычисления. Сопоставление нескольких кривых дает возможность увидеть особенности, нарушения, поставить вопросы, которые не возникли бы без данной информации. Это приводит к увеличению надежности оценок.

Метод высокого порядка требует повышенной гладкости функций. Если указанные требования не выполняются, то порядок точности уменьшается. Однако это не означает отсутствия других степенных составляющих, которые могут быть подвергнуты фильтрации. Тем самым, фильтрация повышает порядок точности численных методов даже для негладких функций.

Литература

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Наука, 2004. – 636 с.

2. Шерыхалина Н.М., Ошмарин А.А. Численная фильтрация данных, искаженных нерегулярной погрешностью // Вестник УГАТУ. – 2006. – Т. 8. – №1 (17). – С. 138 – 141.
3. Житников В.П., Шерыхалина Н.М., Ураков А.Р. Линейные некорректные задачи. Верификация численных результатов: учебное пособие. – Уфа: УГАТУ, 2002. – 90 с.

Интегрируемое краевое условие для эллиптического уравнения Тоды

Вильданов А.Н.

ИФ БашГУ, alvild@mail.ru

Аннотация

Рассматриваются интегрируемые обрывы на плоскости для уравнения Лиувилля и эллиптического уравнения Тоды. Показана применимость преобразования Кельвина для размножения решений соответствующих краевых задач.

В последнее время широкое применение получил метод обратной задачи рассеяния (МОЗР) [1]. Этот метод позволяет достаточно полно исследовать задачу Коши на всей оси для интегрируемых уравнений и строить широкие классы частных решений. При сужении области изменения независимой переменной к начальному условию добавляется граничное условие. Для полученной начально-краевой задачи метод обратной задачи применим далеко не всегда, точнее, не для любого вида граничных условий. Те граничные условия, для которых в принципе применим, возможно с небольшими модификациями, МОЗР (точнее говоря, для соответствующей начально-краевой задачи) носят в литературе название интегрируемых граничных (краевых) условий [2].

Задача отыскания интегрируемых краевых условий для нелинейных уравнений представляет отдельный интерес и широко исследуется. Как известно, интегрируемые уравнения обладают только для них характерным рядом свойств. Это наличие высших симметрий и законов сохранения, преобразования Беклунда и т.д. Оказывается, интегрируемые начально-краевые задачи сохраняют многие из этих свойств. Например, часто оказывается, что преобразование Беклунда переводит решения интегрируемой начально-краевой задачи снова в решения той же задачи при специальном выборе параметра преобразования. При этом говорят, что интегрируемое краевое условие совместно с преобразованием Беклунда [3].

В данной работе рассматриваются интегрируемые обрывы для уравнения Лиувилля и его дискретного аналога – цепочки Тоды. В работе [4] доказано, что уравнение Лиувилля

При уменьшении среднеквадратичной ошибки правой части, например на два порядка, среднеквадратичная ошибка решения уменьшается и принимает значение меньше 3%.

Для визуализации результатов приведем трехмерные графики (рис.1,2), а так же графики сечений (рис. 3-4, 5-6) точного и приближенного решений.

Из анализа графиков следует хорошее качественное и количественное соответствие искомого и приближенного решений.

Заключение

Рассмотрены некоторые обратные задачи биофизики, даны из математические модели, указаны методы их решения. Отмечается некорректность этих задач и предлагается численный метод нахождения решения на основе алгоритмов регуляризации (метод регуляризации Тихонова). Для двухмерной задачи приводится пример использования метода Тихонова и графики реализации численного решения. Полученное решение достаточно хорошо согласуется с точным решением.

Литература

- Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. -М.: Наука, 1986.
- Гончарский А.В., Черепашук А.М., Ягола А.Г. Некорректные задачи астрофизики, - М.: Наука, 1986.
- Сизиков В.С. Математические методы обработки результатов измерений. – Санкт-Петербург: Изд. Политехника, 2001.
- Сизиков В.С., Белов И.А. Реконструкция смазанных и дефокусированных изображений методом регуляризации // Оптик. Журн., 2000, Т.67, №4, -С.60-63.
- Усманов С.М., Латыпов И.И., Гималудинов И.К. Численное решение некорректно поставленных задач// Вопросы математического моделирования и механики сплошных сред. Сб. научных трудов. – Бирск: Изд. Бирского ГПИ, 1997. –С. 78-98.
- Кузнецов С.П. Динамический хаос. -М.: Физматгиз, 2001.
- Латыпов И.И. Исследование динамических систем трехпараметрическим логистическим отображением. //Вестник Бирск. гос.соц.-пед. академии: Научно-методический журнал, выпуск 7./ Под общ. ред. проф. С.М.Усманова/ - Бирск: Бирская гос. Соц.-пед.акад., 2007. – С.30-36.
- Зульпукаров М.-Г.М., Малинецкий Г.Г., Подлазов А.В. Обратная задача теории бифуркаций в динамических системах с шумом. –М.: Изд. ИПМ РАН, 2005.

Об одной обратной задаче неравновесного массопереноса

Булгакова Г.Т.

УГАТУ, г. Уфа, math@mail.rb.ru

Исследуется корректность постановки краевой задачи неравновесного массообмена в пористой среде, не допускающей рассогласование граничных условий с начальным условием. Решена обратная коэффициентная задача, моделирующая неравновесное двухфазное течение в пористой среде.

Современные расчеты двухфазных фильтрационных течений базируются на уравнениях сохранения масс фаз и обобщенного закона Дарси для потоков фаз и замыкаются эмпирическими функциями фазовых проницаемостей и капиллярного давления [1]. Именно видом функций фазовых проницаемостей определяется конкретная картина двухфазного течения (в частности, процесса вытеснения несмачивающей фазы смачивающей).

Результаты лабораторных исследований вытеснения несмачивающей фазы смачивающей и численного моделирования процесса двухфазной фильтрации на капиллярных моделях показали, что кривые фазовых проницаемостей двухфазной системы непостоянны во времени, что свидетельствует о неравновесном характере несмешивающегося вытеснения и является важным аргументом в пользу методики нестационарных исследований кернов. Фильтрационные модели, описывающие неравновесные течения, могут быть идентифицированы только по данным нестационарных исследований.

В этом случае эмпирические зависимости относительных фазовых проницаемостей (ОФП) оцениваются косвенным образом, путем решения соответствующей обратной задачи, состоящей в определении ОФП вытесняющей жидкости $f_1(s)$ и вытесняемой фазы $f_2(s)$ по замерам перепада давления на образце пористой среды $\Delta p^0(t)$ и объема вытесненной жидкости $Q_2^0(t)$, полученных в ходе лабораторного эксперимента.

Решение обратной задачи сводится к минимизации невязки

$$I = \sum_i [\alpha(\Delta p^0(t_i) - \Delta p(t_i))^2 + (Q_2^0(t_i) - Q_2(t_i))^2], \quad (1)$$

где $\alpha = Q_2^* / \Delta p^*$ – коэффициент, учитывающий различие в масштабах изменения и размерностях величин Q_2 и Δp , Q_2^* и Δp^* – их характерные значения. Функции $\Delta p(t)$ и $Q_2(t)$ определяются из решения прямой задачи, которая формулируется следующим образом.

По современным представлениям неравновесность фазовых проницаемостей связана с процессами массопереноса между порами. Предложения по совершенствованию моделей фильтрации с учетом неравновесных эффектов имеются в работах [2-4]. В большинстве из них использовались общепринятые в теории фильтрации феноменологические уравнения баланса массы, импульса и энергии для элементарного объема, характерный размер которого предполагается достаточно большим по сравнению с размером поровых каналов, но существенно меньшим характерного размера пористой среды. Неравновесность учитывалась либо введением в уравнения дополнительных членов, либо корректировкой равновесных соотношений, учитывающей взаимодействие фаз при тех или иных предположениях о его механизме.

Введение дополнительных слагаемых, учитывающих неравновесность, повышает порядок уравнения для определения насыщенности. Оно принимает вид типичного уравнения второго порядка гиперболического вида, линейного по старшим производным, характеристиками которого являются координатные линии. Постановки краевых задач неравновесной двухфазной фильтрации в [2-4] не обоснованы, что приводит к рассогласованию начальных и граничных условий. Поэтому краевая задача оказывается недоопределенной.

В представленной работе рассматривается корректная краевая задача неравновесной двухфазной фильтрации. Предложено граничное условие для насыщенности, которое согласуется с начальным условием. Для поставленной краевой задачи доказывається корректность, существование и единственность решения.

При нестационарной двухфазной фильтрации в рамках известного подхода [2] неравновесные фазовые проницаемости и капиллярное давление определяются при некоторой эффективной насыщенности \tilde{s} , связанной с истинной насыщенностью s кинетическим уравнением

$$\tilde{s} = s + \tau \frac{\partial s}{\partial t} \quad (2)$$

Для ОФП принимается:

$h = 3,84 \cdot 10^{-11}$; невязка: $8,1263 \cdot 10^{-7}$; параметр регуляризации: $3,5784 \cdot 10^{-9}$; среднеквадратичная ошибка решения: $Sk_z = 0,13337$, в процентах - 10,98%.

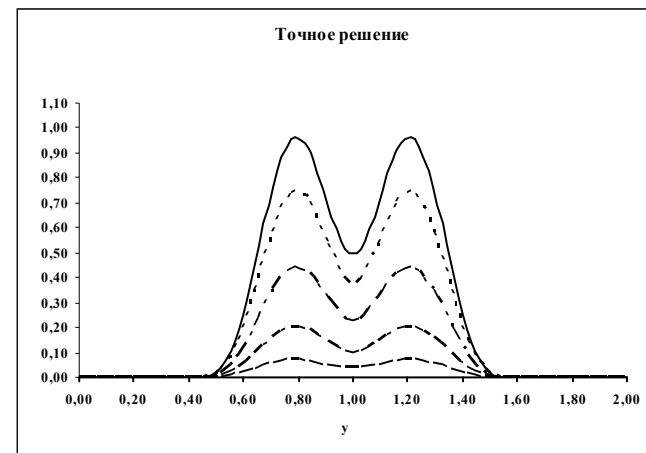


Рис. 5 Графики сечений точного решения $z(x, y)$.

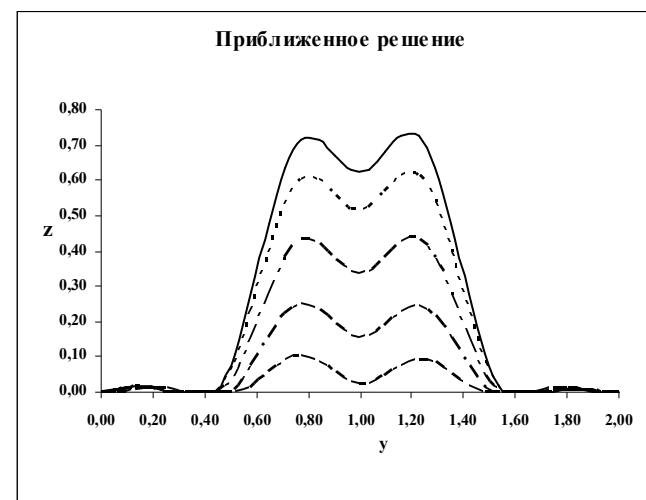


Рис. 6 Графики соответствующих сечений приближенного решения $z_a(x, y)$.

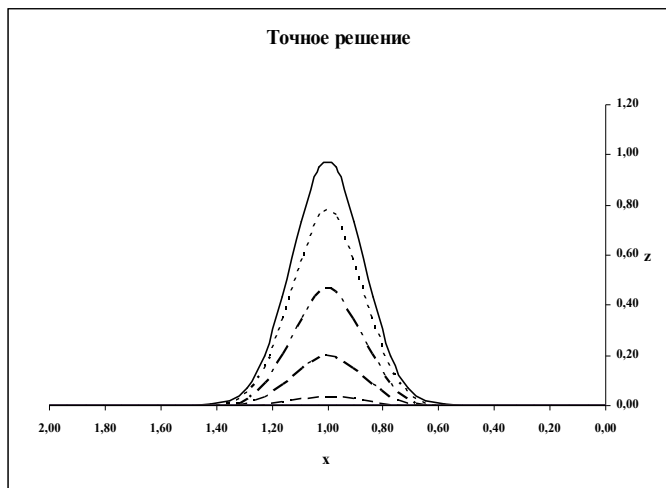


Рис. 3 Графики сечений точного решения $z(x, y)$.

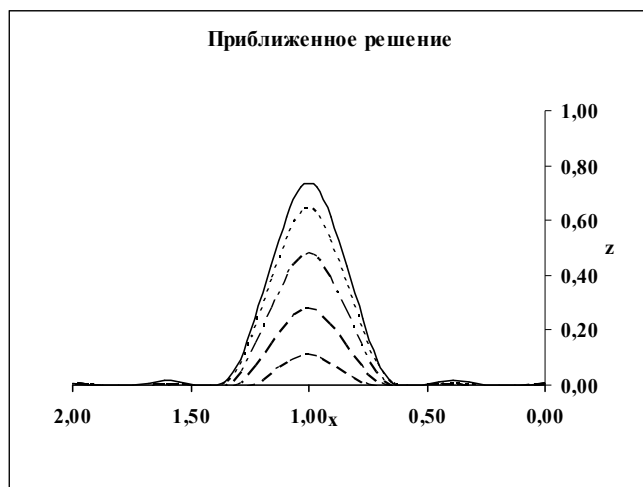


Рис. 4 Графики соответствующих сечений приближенного решения $z_\alpha(x, y)$.

Среднеквадратичная ошибка правой части: $Sk_u = 0,00159$, в процентах - 1,19%; погрешности правой части: $\delta = 6,324 \cdot 10^{-7}$; оператора:

$$f(\tilde{s}) = f\left(s + \tau \frac{\partial s}{\partial t}\right). \quad (3)$$

При этих предположениях процесс вытеснения несмачивающей фазы из образца пористой среды при постоянной суммарной скорости фильтрации смеси V_0 и постоянном τ для одномерного движения описывается системой уравнений для насыщенности s и полной скорости фильтрации V_0 .

$$m \frac{\partial s}{\partial t} + V_0 \frac{\partial F(\tilde{s})}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

$$-\frac{k}{\mu_1} [f_1(\tilde{s}) + \mu_0 f_2(\tilde{s})] \frac{\partial p}{\partial x} = V_0. \quad (5)$$

Перейдем к безразмерным переменным и введем следующие величины: $\theta = \frac{V_0 t}{ml}$ – безразмерное время, равное отношению объема закачан-

ной жидкости к объему пор; $\xi = \frac{x}{l}$ – безразмерная длина образца;

$\bar{\tau} = \frac{\tau V_0}{ml}$ – безразмерный параметр неравновесности (в дальнейшем черточки опускаются). Тогда система уравнений (4)-(5) в этих переменных принимает вид

$$\frac{\partial s}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \xi} F(\tilde{s}) = 0, \quad (6)$$

$$[f_1(\tilde{s}) + \mu_0 f_2(\tilde{s})] \frac{\partial p}{\partial \xi} = -\frac{l \mu_1 V_0}{k}. \quad (7)$$

Система уравнений (6)-(7) замыкается начальными и граничными условиями:

$$s(\xi, 0) = s_0, \quad s(0, \theta) + \tau \frac{\partial s(0, \theta)}{\partial \theta} = s_k \quad (8)$$

и

$$p(0, \theta) = \varphi(\theta). \quad (9)$$

Из решения краевой задачи (6)-(9) определяются функции $\Delta p^0(t)$ и $Q_2^0(t)$, которые используются для минимизации невязки I (1). Отметим, что имеет место неравенство $s_k > s_0 > 0$.

Задачу для определения неизвестной функции $s = s(\xi, \theta)$ перепишем следующим образом

$$\frac{\partial s}{\partial \theta} = \frac{1}{\tau}(\tilde{s} - s) \quad (10)$$

$$\frac{\partial \tilde{s}}{\partial \xi} = \frac{1}{\tau F'(\tilde{s})}(s - \tilde{s}) \quad (11)$$

$$\begin{aligned} s(\xi, 0) &= s_0, \\ \tilde{s}(0, \theta) &= s_k. \end{aligned} \quad (12)$$

Найдем условия, при которых задача (10)-(12) имеет гладкое решение в прямоугольнике $0 \leq \xi \leq a$, $0 \leq \theta \leq b$.

Краевая задача (10) - (12) сводится к интегральным уравнениям вида:

$$s(\xi, \theta) = s_0 + \frac{1}{\tau} \int_0^\theta [\tilde{s}(\xi, \eta) - s(\xi, \eta)] d\eta, \quad (13)$$

$$\tilde{s}(\xi, \theta) = s_k + \frac{1}{\tau} \int_0^\xi \frac{1}{F'(\tilde{s}(\eta, \theta))} [s(\eta, \theta) - \tilde{s}(\eta, \theta)] d\eta. \quad (14)$$

Для построения решения системы интегральных уравнений (13) – (14) используется метод последовательных приближений:

$$s^{(n+1)}(\xi, \theta) = s_0 + \frac{1}{\tau} \int_0^\theta [\tilde{s}^{(n)}(\xi, \eta) - s^{(n)}(\xi, \eta)] d\eta, \quad (15)$$

$$\tilde{s}^{(n+1)}(\xi, \theta) = s_k + \frac{1}{\tau} \int_0^\xi \frac{1}{F'(\tilde{s}^{(n)}(\eta, \theta))} [s^{(n)}(\eta, \theta) - \tilde{s}^{(n)}(\eta, \theta)] d\eta, \quad (16)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, \quad s^{(0)} = s_0, \quad \tilde{s}^{(0)} = s_k.$$

Справедливо следующее утверждение.

Лемма. Пусть производная функции $F(s)$ не обращается в нуль на любом интервале $(-a, a)$, а именно $|F'(s)| \geq A > 0$, и постоянная A не зависит от a . Тогда в прямоугольнике $0 \leq \xi \leq \xi_0$, $0 \leq \theta \leq \theta_0$, где $\theta_0 < \frac{\tau}{2}$, $\xi_0 < \frac{\tau A}{2}$ для последовательных приближений справедливы оценки

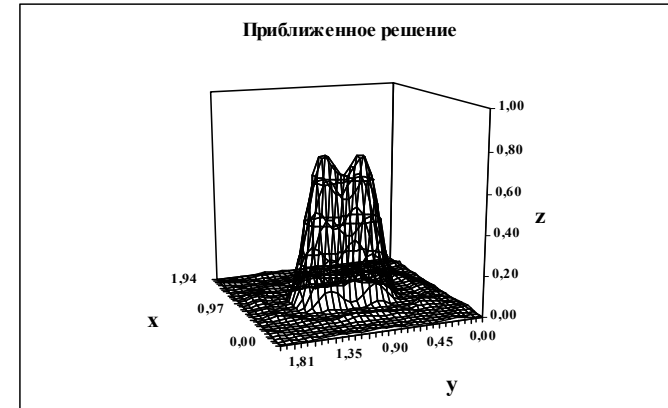


Рис. 2 Приближенное решение $z_\alpha(x, y)$ исходной задачи.

При численном решении данной задачи используют алгоритм дискретного преобразования Фурье (ДПФ) или быстрого преобразования Фурье (БПФ) [2,4,5].

Численное решение задачи

В качестве примера рассмотрим следующую задачу в виде двухмерного интегрального уравнения Фредгольма I рода типа свертки

$$\int_0^1 \int_0^1 e^{-20(x-\xi-0,5)^2 - 20(y-\eta-0,5)^2} \cdot z(\xi, \eta) d\xi d\eta = u(x, y), \quad 0 < x, y < 2, \quad (14)$$

приближенную правую часть $u_\delta(x, y)$ определим из численного решения уравнения (9) с заданием равномерной погрешности δ , с выбранным точным решением $z(x, t)$ в виде:

$$z(x, y) = \left(\frac{e^{-\frac{(x-0,3)^2}{0,03}} + e^{-\frac{(x-0,7)^2}{0,03}}}{0,9550408} - 0,0521309 \right) e^{-\frac{(y-0,5)^2}{0,03}}.$$

Применение метода регуляризации Тихонова дает следующие результаты.

применять нельзя. Да и вообще, для некорректных задач классическое понимание решения задачи теряет смысл.

Одним из способов решения (в новом смысле, например: нормальное решение, псевдорешение, квазирешение) таких задач является метод регуляризации Тихонова [1]. Для двумерных интегральных уравнений Фредгольма I рода типа свертки решение уравнения (2) методами двумерного ПФ и регуляризации Тихонова имеет вид:

$$z_{\alpha}(\xi, \eta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Z_{\alpha}(w_1, w_2) \cdot e^{-i(w_1\xi + w_2\eta)} dw_1 dw_2, \quad (12)$$

$$Z_{\alpha}(w_1, w_2) = \frac{\bar{K}(-w_1, -w_2) \cdot U(w_1, w_2)}{L(w_1, w_2) + \alpha \cdot M(w_1, w_2)}, \quad (13)$$

где $L(w_1, w_2) = |\bar{K}(w_1, w_2)|^2 = \bar{K}(w_1, w_2) \cdot \bar{K}(-w_1, -w_2)$,

$M(w_1, w_2) = (w_1^2 + w_2^2)^2$, α - параметр регуляризации.

Решение (7) при правильно выбранных значениях α и δ обладает устойчивостью и достаточной разрешающей способностью. Обычно для выбора α используют принцип невязки или обобщенный принцип невязки.

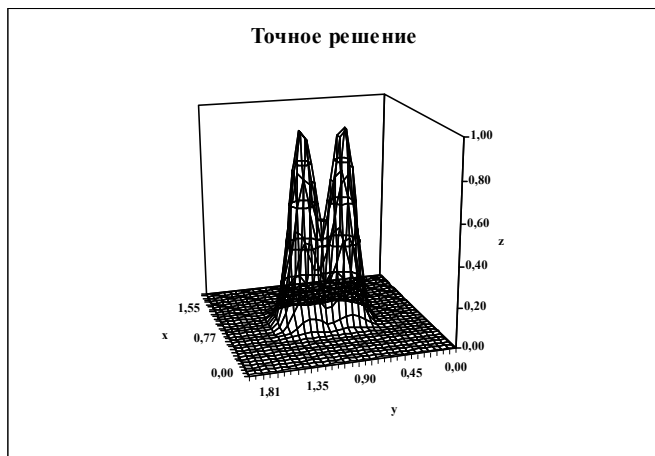


Рис. 1 Точное решение $z(x, y)$ исходной задачи.

$$\left| s^{(n)}(\xi, \theta) \right| \leq N, \quad \left| \tilde{s}^{(n)}(\xi, \theta) \right| \leq M, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (17)$$

где постоянная M определяется в виде

$$M = \max \left\{ \frac{s_0 \tau}{\tau - 2\theta_0}, \frac{s_k \tau A}{\tau A - 2\xi_0}, s_0 + \frac{(s_k - s_0)}{\tau} \theta_0, s_k + \frac{(s_k - s_0)\xi_0}{\tau A} \right\}$$

На основании леммы в работе доказана следующая теорема существования и единственности задачи (10) – (12).

Теорема. Пусть выполнены условия:

$$|F'(s)| \geq A > 0, \quad |F''(s)| \leq B, \quad s \in [-M; M]$$

Тогда в прямоугольнике $0 \leq \xi \leq \xi_0, 0 \leq \theta \leq \theta_0$ существует и притом единственное решение системы интегральных уравнений (13) – (14).

Сформулированная выше теорема доказывает корректность постановки краевой задачи (6) – (9).

Во избежание неустойчивости при нахождении функциональных зависимостей используется регуляризирующий метод параметризации искомым функций с помощью эталонных кривых [5,6].

Как показано в [5,6], обоснованную параметризацию функций фазовых проницаемостей можно осуществить, если, например, известен экспериментально установленный вид ОФП, определенных на идентичных образцах пористых сред стационарными методами исследования. Эта возможность основывается на том, что экспериментальные зависимости, полученные на различных образцах пористых сред со сходными физико-химическими свойствами, могут быть представлены в универсальной форме путем перехода к нормированным координатам

$$x = (s - s_0)/(s_k - s_0), \quad y_1 = f_1(s)/F_1, \quad y_2 = f_2(s)/F_2. \quad (18)$$

Величины s_0, s_k, F_1, F_2 характеризуют свойства конкретного образца пористой среды.

В связи с неустойчивостью обратной задачи для её решения важным является уменьшение сложности модели процесса, т.е. в данном случае речь идет об уменьшении общего числа параметров, определяемых по данным нестационарных исследований.

ОФП с учетом неравновесности восстанавливаются в параметрическом виде как

$$f_1 = \Phi_1(x, \tau, r_1, r_2, \dots, r_m), \quad f_2 = \Phi_2(x, \tau, q_1, q_2, \dots, q_m), \quad (20)$$

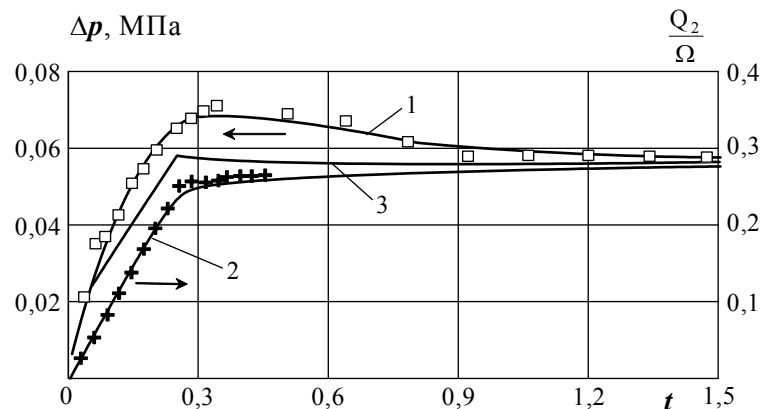


Рис.1. Зависимость перепада давления и безразмерного объема вытесненной нефти от безразмерного времени: 1,3 – перепад давления; 2 – безразмерный объем вытесненной нефти

где x – нормированная переменная, определяемая из (18), Φ_i – заданные функции, $r_i (i = 1, 2, \dots, m_1)$ и $q_i (i = 1, 2, \dots, m_2)$ – неизвестные параметры, определяемые из условия минимизации невязки (1).

Оптимальное число N искомого параметров может быть определено по методу структурной минимизации среднего риска [7] или же методами теории нечетных множеств [8].

Проблема правильного соотношения сложности идентифицируемой модели с количеством и уровнем погрешности имеющихся данных, решаемая при помощи метода структурной минимизации среднего риска, сводится к следующему. Оказывается, что если на допустимом множестве решения задать структуру, то наряду с минимизацией эмпирического риска (невязки) внутри элементов структуры появляется дополнительная возможность минимизации по элементам структуры. Это позволяет найти решение, дающее более глубокий гарантированный минимум среднего риска, чем решение, доставляющее минимум эмпирическому риску на всем допустимом множестве решений.

Для примера на рисунке представлены расчетные и экспериментальные зависимости, полученные в опытах по вытеснению нефти из модели пласта одного из месторождений объединения «Юганскнефтегаз» [9]. Функции ОПФ $f_1(x)$ и $f_2(x)$ рассчитывались по описанной выше методике.

при недостаточной разрешающей способности системы. Если обозначить, через $z(\xi, \eta)$ – искомое истинное распределение интенсивности микрообъектов, через $u(x, y)$ – наблюдаемое распределение интенсивности, а $K(s, t)$ – функцию рассеяния (аппаратная функция) системы, то задача редукиции сводится к решению интегрального уравнения (2).

Метод решения задачи восстановления искаженных изображений

Полученные уравнения (1), (2) обычно решаются методом преобразования Фурье. Для двумерного интегрального уравнения Фредгольма I рода имеем следующее обратное преобразование Фурье (ОПФ)

$$z(\xi, \eta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Z(w_1, w_2) \cdot e^{-i(w_1\xi + w_2\eta)} dw_1 dw_2, \quad (8)$$

где преобразование Фурье (ПФ) спектр решения

$$Z(w_1, w_2) = \frac{U(w_1, w_2)}{\bar{K}(w_1, w_2)}, \quad (9)$$

а $U(w_1, w_2)$, $\bar{K}(w_1, w_2)$ – преобразования Фурье спектры правой части $u(x, y)$ и ядра интегрального уравнения (2), равные

$$U(w_1, w_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} u(x, y) \cdot e^{i(w_1x + w_2y)} dx dy, \quad (10)$$

$$\bar{K}(w_1, w_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, y) \cdot e^{i(w_1x + w_2y)} dx dy. \quad (11)$$

Если удастся найти ПФ правой части (5) и ядра (6), а затем и самого решения (4), то по ОПФ образа решения можно получить искомое решение $z(\xi, \eta)$.

Однако задача решения интегральных уравнений (1), (2) в большинстве случаев оказывается некорректной [1]. Это связано с тем, что входные и выходные сигналы определяются с погрешностью (внешний шум, искажения, приближенное описание), аппаратная функция моделируется (описывается) приближенно, и следовательно рассматриваемые задачи становятся неустойчивыми. Поэтому, формулы преобразования Фурье

чество получаемых изображений [3,4]. Рассмотрим несколько таких факторов:

- сдвиг (смаз) изображения;
- неточность или ошибка в установлении фокуса;
- недостаточная разрешающая способность системы.

Рассмотрим первый случай.

Пусть истинное, четкое изображение микрообъекта описывается функцией (интенсивностью) $z(x, y)$. В результате сдвига (смаза) на величину Δ , изображение превратилось в нечеткое, которое описывается функцией (интенсивностью) $u(x, y)$. Тогда искомая функция с измеренной функцией (искаженное изображение), могут быть связаны интегральным соотношением:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(x - \xi) \cdot z(\xi, y) d\xi = u(x, y), \quad -\infty < x < +\infty, \quad (6)$$

где y - параметр, а $K(x - \xi)$ ядро интегрального преобразования:

$$K(s) = \begin{cases} 1/\Delta, & \text{при } -\Delta \leq s \leq 0, \\ 0, & \text{при } s > 0. \end{cases}$$

Во втором случае, пусть в результате ошибки или неточности в установлении фокуса было получено дефокусированное (размытое) изображение. Тогда искомая функция с измеренной функцией (размытым изображением), могут быть связаны соотношением, описываемым двумерным интегральным уравнением Фредгольма I рода типа свертки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x - \xi, y - \eta) \cdot z(\xi, \eta) d\xi d\eta = u(x, y), \quad -\infty < x, y < +\infty, \quad (7)$$

где $K(s, t) = \begin{cases} \frac{1}{\pi \rho^2}, & \text{при } \sqrt{s^2 + t^2} \leq \rho, \\ 0, & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$ $\rho = a\delta/f_2$ - радиус дифрак-

ционного круга, в который превращается каждая точка истинного изображения, a - радиус апертуры линзы системы (микроскопа), δ - погрешность фокусировки изображения, f_2 - расстояние от линзы до зрачка наблюдателя. Для системы с множеством линз величина ρ определяется как некоторое среднее значение для всех линз.

В третьем случае возникает задача *редукции (приведения) наблюдений биологических микрообъектов за аппаратную функцию системы*

На рис.1 приведены расчётные зависимости безразмерного объёма вытесненной нефти Q_2/Ω (кривая 2, Ω – объём пор) и перепада давления Δp (кривые 1, 3) от безразмерного времени (Qt/mlA) . Экспериментальные данные показаны на этом рисунке крестиками и квадратами.

Проведенные расчёты показали, что в рамках равновесной модели (кривая 3) ни при каких значениях параметров не удаётся удовлетворительно описать экспериментальную кривую $\Delta p(t)$. Результаты расчётов по методу неравновесной модели, представленные кривой 1, вполне удовлетворительно описывают экспериментальную зависимость $\Delta p(t)$.

В заключение отметим, что приведенное здесь решение обратной задачи позволяет оценить характерное время релаксации τ . При этом в ходе решения обратной задачи установлено, что время τ соизмеримо с временем прорыва вытесняющей жидкости из образца пористой среды.

Описанный алгоритм служит основой методики обработки результатов лабораторных исследований фильтрационных характеристик пористой среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 08-01-97031_а).

Литература

1. Чарный И.А. Подземная гидромеханика. - М.: Гостоптехиздат, 1963. - 396с.
2. Баренблатт Г.И., Винниченко А.П. // Успехи механики. 1980. Т.3. №3. С.35-50.
3. Николаевский В.Н., Бондарев Э.А., Миркин М.И. и др. Движение углеводородных смесей в пористой среде. - М.: Недра, 1968. - 190с.
4. Бочаров О.Б., Витовский О.В., Кузнецов В.В. Структура скачков насыщенности при неравновесном вытеснении в пористых средах // Изв. АН СССР. МЖГ. - 1990. - №6. - С.97-104.
5. Карачурин Н.Т., Кондратцев С.А., Хасанов М.М. // Изв. РАН. Прикладная математика и механика. 1996. Т.60. Вып.3. С.489-493.
6. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. - М.: Наука, 1986. - 287с.
7. Вапник В.Н., Глазкова Т.Г., Кашеев Т.А. и др. Алгоритмы и программы восстановления зависимостей // Под ред. В.Н. Вапника. - М.: Недра, 1984. - 815с.
8. Заде Л. Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений. - М.: Мир, 1976. - 168 с.
9. Отчет по НИР Д.93.46.93. ВНИИЦ «Нефтегазтехнология». – Уфа, 1993. – 42 с.

О целевой функции при решении обратной задачи ММР

Янборисов В.М.¹, Янборисов Э.В.¹, Спивак С.И.²

¹ УГАЭС, Уфа YanborisovVM@mail.ru
² БашГУ, Уфа

Аннотация

При решении обратной задачи поиска концентраций и кинетических параметров активных центров катализатора в случае применения метода наименьших квадратов для сопоставления теоретического и экспериментального ММР в виде массового распределения по степеням полимеризации необходимо учитывать доли всех макромолекул, то есть использовать распределение с шагом в одно звено по степени полимеризации.

Введение

Молекулярно массовое распределение (ММР) макромолекул полимеров зависит от кинетических параметров каталитической системы. В частности, для полицентровых каталитических систем Циглера-Натта ММР зависит от следующих параметров: C^i – концентраций активных центров полимеризации, M_0 – начальной концентрации мономера, A_0 – начальной концентрации алюминийорганического соединения (АОС), k_p^i – констант скорости реакции роста макромолекул, k_m^i и k_a^i – констант скорости реакции передачи на мономер и АОС, соответственно:

$$\text{ММР}(M_0, A_0, C^i, k_p^i, k_m^i, k_a^i, t).$$

В общем случае концентрации активных центров могут меняться в течение полимеризации – $C^i(t)$. Цель решения обратной задачи ММР – определение значений перечисленных кинетических параметров путем сравнения экспериментальной кривой ММР с расчетной кривой ММР, полученной теоретическим способом, например, моделированием процесса полимеризации методом Монте-Карло, либо решением системы дифференциальных уравнений [1], описывающей данный процесс, либо каким-нибудь другим способом.

Здесь возникает вопрос – каким условиям должна удовлетворять целевая функция при сопоставлении экспериментальной и расчетной кривой ММР?

Решения уравнения, в зависимости от f, λ и начального условия $x = x_0$ ведут себя по разному. В соответствии с теорией нормальных форм, исследуя разложение в ряд Тейлора функции $f(x, \lambda)$ для бифуркации коразмерности 1 можно выделить следующие типы бифуркации.

Бифуркация типа «седло-узел», соответствующая регулярной экстремальной точке (x_0, λ_0) кривой $f(x, \lambda)$, возникает при соблюдении условий $f'_x(x_0, \lambda_0) = 0$, $f'_\lambda(x_0, \lambda_0) \neq 0$, $f''_{xx}(x_0, \lambda_0) \neq 0$. При этом в окрестности точки бифуркации система приводится к виду $\frac{\partial y}{\partial t} = \mu - y^2$, где $y = y(t)$ - переменная состояния, μ - параметр ($y = 0$ соответствует $x = x_0$, а $\mu = 0$ соответствует $\lambda = \lambda_0$).

Транскритическая бифуркация («обмен устойчивостью») соответствует двойной точке и возникает при соблюдении условий:

$$f'_x(x_0, \lambda_0) = 0, f'_\lambda(x_0, \lambda_0) = 0, f''_{xx}(x_0, \lambda_0) \neq 0, D(x_0, \lambda_0) > 0,$$

$$\text{где } D(x, \lambda) = (f''_{x\lambda})^2 - f''_{xx}f''_{\lambda\lambda}.$$

При этом в окрестности точки бифуркации система приводится к виду $\frac{\partial y}{\partial t} = \mu^2 - y^2$ или $\frac{\partial y}{\partial t} = y\mu - y^2$.

Бифуркация типа «вилка» соответствует особой экстремальной точке и возникает при соблюдении условий $f'_x(x_0, \lambda_0) = 0$, $f'_\lambda(x_0, \lambda_0) = 0$, $f''_{xx}(x_0, \lambda_0) = 0$, $D(x_0, \lambda_0) > 0$. При этом различают суперкритическую (мягкую) бифуркацию, если система приводится к виду $\frac{\partial y}{\partial t} = y\mu - y^3$, и

субкритическую (жесткую) бифуркацию, если $\frac{\partial y}{\partial t} = -y\mu + y^3$.

Дальнейший ход исследования включает изучение влияния возмущения при изменении искомого параметра λ .

Задача восстановления искаженных изображений биологических микроорганизмов

При проведении исследований и наблюдений биологических микроорганизмов (вирусов, белков, аминокислот т.д.) с помощью технических систем (например, оптического или электронного микроскопа) возникают ряд факторов снижающие ка-

Рассмотрим две обратные задачи биофизики и методы их решения.

Обратная задача теории бифуркаций в динамических системах

Характерным свойством нелинейных систем является изменение числа и устойчивости решений (бифуркации). Для математических моделей представляющих собой систему дифференциальных уравнений мы наблюдаем структурную перестройку фазовых траекторий.

Особо важным для решения нелинейных систем является то, что в простых и сложных системах возникают бифуркации одного и того же типа. Это дает возможность свести задачу исследования динамики исходной системы к изучению более простой модельной системы [6,7].

Другим важным свойством нелинейных систем позволяющего сформулировать и решить обратную задачу является то, что во время прохождения точки бифуркации снижается устойчивость системы по отношению к малым изменениям начальных данных т.е. система становится чувствительной к малым возмущениям. Поэтому выбор траектории развития системы в окрестности точки бифуркации может осуществиться под воздействием либо малого управляющего воздействия либо случайным образом.

Выделяют два типа задач:

Во-первых, это задача ретроспективного анализа поведения системы (ставится задача нахождения точек бифуркации до рассматриваемого момента времени, а также задача исследования других траекторий динамики системы).

Во-вторых, задача определения точек бифуркации в будущем, а также исследование управляющего воздействия для развития системы по определенной траектории.

Одним из подходов для решения поставленных задач является исследование отклика системы на малое возмущение, которое может носить как регулярный, так и случайный характер [8].

В качестве примера можно привести диссипативную динамическую систему, поведение которой описывается автономным обыкновенным дифференциальным уравнением с параметром:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = f(x, \lambda),$$

где $x = x(t)$ – переменная состояния, t – время, λ – параметр, этого $f(x, \lambda)$ – некоторая нелинейная функция (фазовая скорость).

Функция распределения

Типичное экспериментальное ММР (авторы выражают благодарность акад. РАН Монакову Ю.Б. и Мингалееву В.З. за представленные ММР), полученное с применением гелхроматографа Waters (рис.1), является производной от интегральной массовой функции распределения w по $\log M$ и, по сути, представляет собой зависимость массовой доли фракции от $\log M$. Обозначим эту функцию следующим образом

$$g(M) = \frac{dw}{d(\log M)}.$$

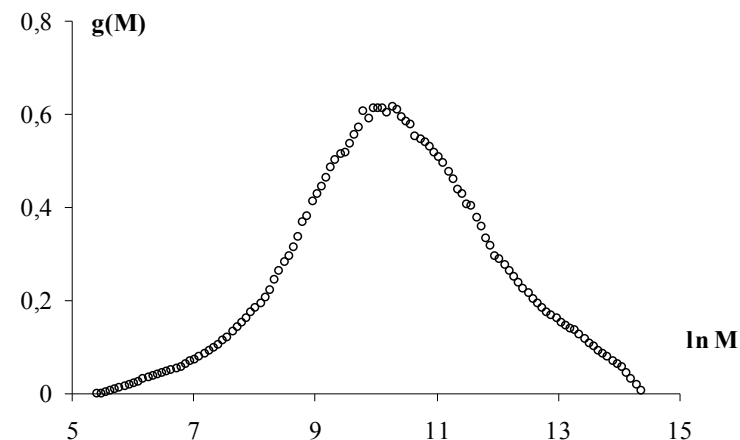


Рис. 1. ММР полибутадиена, синтезированного с применением катализатора $TiCl_4 - Al(i-C_4H_9)_3$: толуол, $[Ti]=3$ ммоль/л, $M_0=1,5$ моль/л, $Al/Ti=1,8$ (мольн).

Среднечисленная масса полимера рассчитывается как

$$M_n = \sum M \cdot \frac{\frac{g}{M}}{\sum \frac{g}{M}}, \quad (1)$$

где суммирование ведется по всем экспериментальным точкам, g – ненормирована на 1. По смыслу здесь дробь – это мольная доля фракции (но не молекул массы M). Если сократить на M :

$$M_n = \sum \frac{g}{\sum \frac{g}{M}} = \frac{\sum g}{\sum \frac{g}{M}}, \quad (2)$$

то в числителе – масса образца, в знаменателе – общее количество молекул. Среднемассовая масса M_w рассчитывается как

$$M_w = \sum M \cdot \frac{g}{\sum g}, \quad (3)$$

причем суммирование ведется только по экспериментальным точкам.

Аналогично, у Френкеля ([2], стр. 66): «Кривая $w(M)$ разбивается ... на фракции, характеризуемые относительными весами w_i . Каждой «фракции» приписывается свой молекулярный вес M_i ... Далее находятся...»

$$M_n = 1 / \sum \frac{w_i}{M_i} \quad M_w = \sum M_i w_i \quad (4)$$

Сравнивая эти формулы Френкеля с формулой (3) получаем, что

$w_i = \frac{g}{\sum g}$, т.е. g – весовая доля фракции, а не макромолекулы.

Однако расчетная теоретическая кривая ММР представляет собой, как правило, массовую функцию распределения [2], стр. 24 – массовую долю макромолекул массы M :

$$q_w(M) = \frac{dwt}{dM}. \quad (5)$$

В силу определения эта функция нормирована. Заранее отметим, что теоретическое распределение $q_w(M)$ вычисляется для всех макроцепей с шагом в одно звено. Переход от функции $g(M)$ к массовой функции распределения описывается выражением

$$q_w(M) = \frac{g(M)}{M \cdot \ln(10)}. \quad (6)$$

Целевая функция

Экспериментальное ММР, полученное с применением гелехроматографа, содержит, как правило, от сотен до нескольких тысяч точек. Т.е. вычислительные возможности программного обеспечения гелехроматографа Waters позволяют «фракционировать» кривую ММР от сотен до нескольких тысяч точек. Важно, что точки на рис. 1 располагаются с постоянным шагом по $\ln(M)$. Для лучшего понимания далее перейдем от молекулярной массы M к степени полимеризации p (рис.2)

$$q_w(p) = m_0 \cdot \frac{dwt / d(\log M)}{M \cdot \ln(10)}. \quad (7)$$

Обратные задачи биофизики

Латыпов И.И., Чудинов В.В.

БирГСПА, e-mai: l

Аннотация

В работе рассматриваются обратные задачи биофизики, приводятся их математические модели и методы решения. Подчеркивается некорректность большинства подобных задач, для решения которых могут быть использованы алгоритмы регуляризации. Рассматривается пример использования алгоритма регуляризации Тихонова, приводятся результаты численного расчета.

Введение

В современном высоко техническом и технологичном мире проведение научных и практических исследований предполагает использование тех или иных технических устройств, приборов, измерительной аппаратуры, моделирующих установок и вычислительных комплексов. Исследователю необходимо обработать полученные результаты, при этом учесть аппаратные искажения и восстановить исходную искомую закономерность (функцию) [1,3]. Ему в большинстве случаев приходится работать с искаженными данными, поэтому наряду с собственно решением задачи исследования явления или процесса приходится также решать обратную задачу определения величины z по экспериментальным значениям \tilde{z} .

В операторной форме это можно записать в следующем виде: $Az = f$, когда исходная зависимость рассматривается без искажений (погрешностей), где A - оператор измерительного преобразования; а также с учетом погрешностей как исходных данных, так и оператора: $\tilde{A}z = \tilde{f}$. И при нахождении искомой зависимости получим:

$$\tilde{z} = \tilde{A}^{-1}(\tilde{f}),$$

где \tilde{A}^{-1} - оператор обработки (оператор обращения A , если он существует).

Таким образом, проблема решения обратной задачи обработки результатов измерений (наблюдений) является актуальной как в научных исследованиях, так и в прикладных областях [1].

же результаты в значениях коэффициентов относительных жесткостей получаются, когда мы сохраняем не только первую, вторую собственную частоты, но и весь спектр частот. Причем, результаты решения задачи сохранения диапазона частот колебаний оболочки подтверждают теорему о двойственности решения обратной задачи.

Заключение

В работе показано, что при увеличении коэффициентов относительной жесткости шпангоута B_0 , B_l , с которыми упруго закреплены края цилиндрической оболочки, собственные значения и собственные частоты увеличиваются.

Рассмотрено применение метода решения обратной задачи к исследованию возможности сохранения заданного диапазона частот. Задачу сохранения диапазона частот колебаний оболочки при изменении коэффициента относительной жесткости на одном конце оболочки предлагается решить с помощью изменения относительной жесткости на другом конце. Причем, показано, что сохранения спектра частот колебаний оболочки при увеличении коэффициента жесткости на одном конце оболочки необходимо уменьшить коэффициент жесткости на другом конце.

Приведена программная реализация решений прямой и обратной задач.

Список литературы

- Антоненко Э.В. Частоты свободных колебаний гладких подкрепленных цилиндрических оболочек с упруго подкрепленными краями. Прикладная механика, Т 25, Вып.8, 1989, с.122–126.
 Сафина Г.Ф. Диагностирование относительной жесткости подкрепленных цилиндрических оболочек по собственным частотам их асимметричных колебаний //Контроль. Диагностика.2005. №12. – С. 55-59.

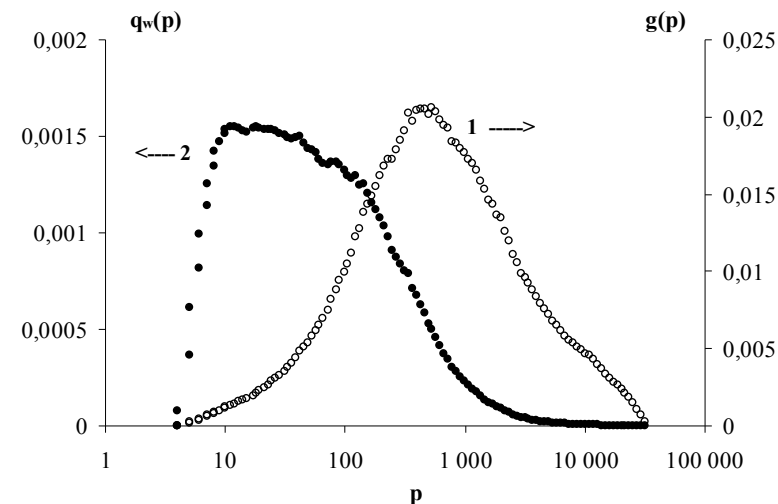


Рис. 2. ММР полибутадиена: 1 – массовая доля фракции, нормированная; 2 – массовая доля макромолекул длины p , ненормированная.

При расчете функции распределения по степеням полимеризации по формуле (7) в экспериментальных точках, естественно, сумма долей будет меньше 1, т.к. в сумме будут отсутствовать доли макромолекул, которые расположены между экспериментальными точками.

В экспериментальной зависимости $g(\ln p)$ шаг по абсциссе является фиксированным (табл. 1). Если рассматривать $q_w(p)$, то при малых степенях полимеризации p точки идут с шагом 1 и даже дублируются одинаковые p (если округлять до целого); при больших же p шаг достигает несколько тысяч (табл. 1). Поэтому при вычислении целевой функции

$$F = \sum [q_w^{\text{экс.}} - q_w^{\text{теор.}}]^2 \quad (8)$$

только в экспериментальных точках (с одинаковым статистическим весом точек) будет переоцениваться низкомолекулярная составляющая ММР, тогда как нас должна более интересовать именно высокомолекулярная область ММР, поскольку свойства полимера в определяющей степени зависят от длинных макромолекул [2].

Таблица 1.

Зависимость величины шага по степени полимеризации в экспериментальном ММР полибутадиена.

M	p	ln(p)	q _w (p)	Δln(p)	Δp
481	9	2,187	1,474E-03	0,077	1
520	10	2,264	1,512E-03	0,077	1
561	10	2,342	1,536E-03	0,077	1
607	11	2,419	1,549E-03	0,077	1
655	12	2,496	1,551E-03	0,077	1
...
1 366 874	25 312	10,139	7,775E-07	0,077	1 881
1 476 581	27 344	10,216	5,187E-07	0,077	2 032
1 595 092	29 539	10,293	2,940E-07	0,077	2 195
1 723 115	31 910	10,371	9,988E-08	0,077	2 371

При решении обратной задачи поиска концентраций и кинетических параметров типов активных центров в случае применения метода наименьших квадратов для сопоставления теоретической и экспериментальной зависимостей необходимо использовать именно все точки. Дело в том, что в экспериментальной зависимости в области малых молей масс точки следуют с интервалом Δp близким к 1, а в области больших молей масс - с интервалом Δp, достигающим до нескольких тысяч звеньев (табл. 1). Естественно, если сравнивать только в этих точках, то будет значительно переоцениваться низкомолекулярная область (т.к. в ней намного больше точек). Т.е. будет хорошее совпадение в низкомолекулярной области (в несколько десятков звеньев) при совсем необязательном совпадении в высокомолекулярной области (от 1000 до сотен тысяч звеньев).

Если в зависимость (7) добавить «недостающие» точки с шагом Δp=1 путем линейной интерполяции, то расчет целевой функции (8) будет осуществляться уже для абсолютно всех макроцепей, присутствующих в образце полимера, тем самым корректно учитывая высокомолекулярную область ММР. Более того, функция q_w(p) автоматически станет нормирована на 1, т.е. сумма массовых долей всех макромолекул станет равна 1 (по определению).

Вышесказанное подтверждает анализ вычисления характеристик полибутадиена по q_w(p) (после вставки точек) с использованием разных диапазонов суммирования по степени полимеризации (табл.2).

Обратная задача по сохранению диапазона частот колебаний оболочки

В работе [2] поставлена и решена обратная задача по диагностированию закрепленной оболочки по спектру частот ее колебаний. Доказана теорема о двойственности и найден метод восстановления закреплений оболочки по двум собственным частотам асимметричных колебаний. В продолжение исследований поставим задачу сохранения заданного диапазона частот колебаний оболочки при изменении коэффициентов относительной жесткости закрепления на концах оболочки. Подобную проблему мы предлагаем решить с помощью найденного метода решения обратной задачи.

Пусть по практической надобности необходимо увеличить коэффициент жесткости на одном из концов закрепления оболочки. При этом по исследованиям прямой задачи частоты будут увеличиваться. Нам же необходимо сохранить спектр частот прежним.

Рассмотрим задачу сохранения на конкретном примере. Пусть, коэффициенты относительной жесткости $B_0=1$, $B_l=1$. Тогда уравнение (1.3) примет вид:

$$\left[\left(\alpha^2 + \frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2} \right) \cdot \sin \alpha \cdot \sin \left(\sqrt{\frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2}} \right) - 2\alpha \cdot \sqrt{\frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2}} \left(1 - \cos \alpha \cdot \cos \left(\sqrt{\frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2}} \right) \right) \right] -$$

$$- 2 \cdot \left(\alpha^2 - \frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2} \right) \left(\alpha^2 \cdot \sqrt{\frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2}} \cdot \sin \alpha \cdot \cos \left(\sqrt{\frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2}} \right) - \frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2} \cdot \alpha \cdot \right.$$

$$\left. \sin \left(\sqrt{\frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2}} \right) \cdot \cos \alpha \right) - \alpha^2 \cdot \frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2} \cdot \left(\alpha^2 - \frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2} \right) \cdot \sin \alpha \cdot \sin \left(\sqrt{\frac{10-100\alpha^2}{100+\alpha^2}} \right) = 0.$$

Решая данное уравнение, находим собственные значения $\alpha_1 = 3,17501$, $\alpha_2 = 6,28788$, $\alpha_3 = 9,42634$ и т.д. Тогда соответствующие им частоты колебаний $\omega_1 = 0,96127$, $\omega_2 = 3,34717$, $\omega_3 = 6,46582$ и т.д.

Решим задачу сохранения диапазона частот: частоты колебаний прежние, коэффициент жесткости B_l увеличим, например, с 1 до 1,9. Тогда, решая обратную задачу, определяем, что коэффициент жесткости на другом конце закрепления должен быть равным $B_0 = 0.08$. Если же уменьшить B_l , например, до 0,2, то для сохранения диапазона частот необходимо, чтобы значение коэффициента B_0 было равно 1,78. Такие

Таблица 1

Зависимость значений ω_i от коэффициента B_i при фиксированном B_0

B_0	B_i	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4	ω_5
1	1	0.96127	3.34717	6.46582	9.83372	13.2511
1	3	0.98043	3.35149	6.46746	9.83452	13.2515
1	5	0.99983	3.35583	6.46911	9.83531	13.2519
1	10	1.04892	3.36684	6.47326	9.83729	13.2530
1	15	1.09807	3.37805	6.47745	9.83929	13.2541

Исследовано также влияние на спектр собственных частот колебаний оболочки обоих коэффициентов относительной жесткости упругих закреплений. Одновременное увеличение B_0 и B_i относительной жесткости закреплений ведет также к увеличению собственных частот и собственных значений колебаний трубы. Например, графики изменений ω_1 , ω_2 от одновременно меняющихся коэффициентов B_0 и B_i даны соответственно на рисунке 2 (а, б).

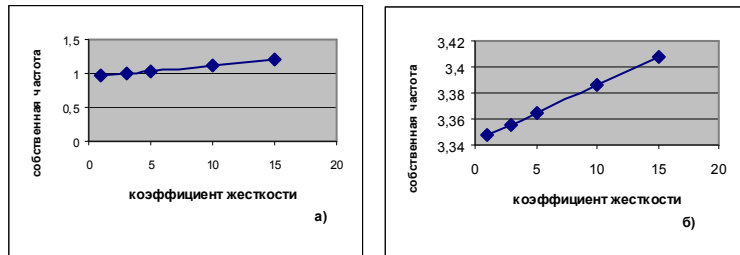
Рис.2 Зависимость частот ω_1 (а) и ω_2 (б) от коэффициентов B_0 , B_i

Таблица 2.

Зависимость характеристик полибутадиена от диапазона суммирования по степени полимеризации.

Диапазон p	$\Sigma q_w(p)$	$\Sigma p \cdot q_w(p)$	Диапазон p	P_w	P_n
1 – 1 000	65%	12%	1 – 500	98	173,51
1 000 – 2 000	14%	11%	1 – 1 000	221	166,14
2 000 – 3 000	6%	8%	1 – 10 000	1151	162,08
3 000 – 4 000	3%	7%	1 – 20 000	1596	162,01
4 000 – 32 000	11%	63%	1 – 32 000	1807	162,00

Если сумма массовых долей $\Sigma q_w(p)$, т.е., количество звеньев в % к общему числу звеньев в полимере, максимальна для коротких макромолекул, то величина $\Sigma p \cdot q_w(p)$, влияющая на среднемассовую степень полимеризации P_w , распределена по всему диапазону макроцепей. Ожидаемым образом среднечисленная степень полимеризации P_n , вычисленная по формуле (1), практически не зависит от длинных макромолекул, тогда как для вычисления P_w (по формуле (3)) необходимо использовать все точки (табл. 2). Хорошо видно (рис.3), что в первом случае учитывается только низкомолекулярный пик.

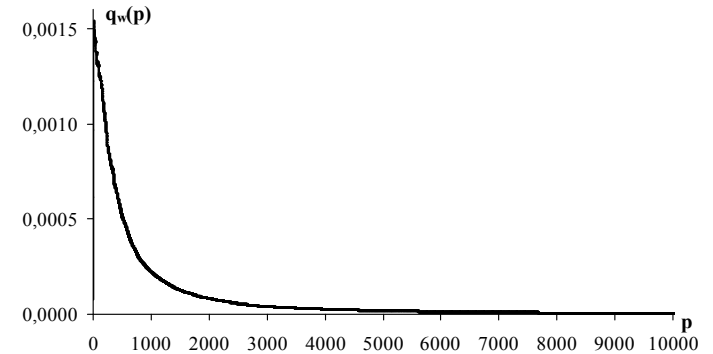


Рис. 3. Массовая функция распределения макромолекул полибутадиена по степени полимеризации.

Для коротких и длинных макромолекул значения $q_w(p)$ отличаются на несколько порядков (табл. 1). Поэтому при вычислении целевой функции соответствующие квадраты отклонений могут различаться на

16 порядков, что опять же приведет к переоценке низкомолекулярной части ММР. С целью избегания этого артефакта возможно следует применять суммирование не квадратов отклонений, а их относительных значений:

$$F = \sum \left[\frac{q_w^{\text{эксп.}} - q_w^{\text{теор.}}}{q_w^{\text{эксп.}}} \right]^2 \quad (9)$$

Необходимо отметить, что в результате вставки точек происходит переход от нескольких сотен экспериментальных точек к нескольким сотням тысяч точек, что естественным образом приводит к увеличению времени вычисления целевой функции (8). Однако увеличение времени на суммирование не столь существенно, т.к. само вычисление $q_w^{\text{теор.}}$ требует на порядок больших затрат компьютерного времени.

Таким образом, для корректного учета высокомолекулярной области ММР при решении обратной задачи определения кинетических характеристик каталитических систем предлагается использовать целевую функцию, в которой применяется массовое распределение макромолекул по степеням полимеризации с шагом в одно звено.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 06-03-32240.

Литература

1. Усманов Т.С., Спивак С.И., Усманов С.М. Обратные задачи формирования молекулярно-массовых распределений. М.: Химия, 2004. – 250 с.
2. Френкель С.Я. Введение в статистическую теорию полимеризации. М.: Наука, 1965. – 267с.

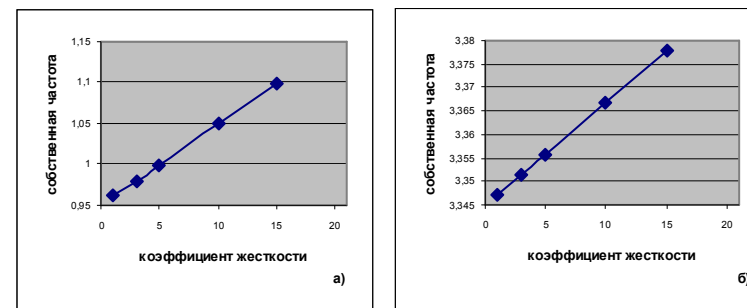


Рис.1 Зависимость частот ω_1 (а) и ω_2 (б) от коэффициента B_i при $B_0 = 1$

Уравнение (1.3) позволяют установить зависимость частот свободных колебаний от параметра жесткости B .

Зависимость собственных частот колебаний от коэффициентов упругих закреплений

Рассмотрим влияние коэффициентов относительной жесткости упругих закреплений цилиндрической оболочки на значения собственных частот ее асимметричных колебаний.

Каждой собственной частоте ω_i асимметричных колебаний оболочки соответствует определенное собственное значение α_i . По решению прямой задачи (1.1), (1.2) получаем, что увеличение коэффициентов относительной жесткости B_0, B_i упругих краевых ребер оболочки ведет к увеличению собственных частот ω_i .

На рисунке 1 (а, б) рассмотрены графики зависимости собственных частот ω_1, ω_2 от коэффициента относительной жесткости B_i шпангоута, с которой закреплен правый конец трубы, при относительной жесткости на левом конце. (Рисунок 1).

Такие изменения касаются всего спектра частот колебаний оболочки. В таблице 1 приведены значения первых пяти собственных значений в зависимости от коэффициентов относительной жесткости закреплений оболочки.

асимметричных колебаний и сохранение диапазона частот с помощью изменений в закреплениях.

Прямая задача по определению собственных частот асимметричных колебаний цилиндрической оболочки

Уравнение асимметричных колебаний цилиндрической оболочки известно и имеет вид [1]:

$$y^{(4)}(x) + 2v^2 y''(x) + r^4 y(x) = 0, \quad (1.1)$$

где

$$2v^2 = \omega^2 \frac{\rho h_{\Sigma}}{E_1 h_1}, \quad r^4 = \frac{n^4 (n^2 + 1)^2 D_2}{E_1 h_1 R^6} - \omega^2 \frac{n^2 (n^2 + 1) \rho h_{\Sigma}}{E_1 h_1 R^2},$$

где R, l, h, D - радиус, длина, толщина и цилиндрическая жесткость; E, ρ - модуль упругости и плотность материала; ω - частота свободных колебаний; h_{Σ} - толщина оболочки с учетом каркаса, n - тон колебания (величины, характеризующие оболочку в осевом направлении, обозначены индексом «1», в кольцевом направлении – индексом «2»).

Граничные условия оболочки со шпангоутами рассмотрим в виде

$$\begin{aligned} y'(0) = y'(l) = 0; \\ y'''(0) + 2v^2 y'(0) - B_0 l^{-3} y(0) = 0 \\ y'''(l) + 2v^2 y'(l) + B_l l^{-3} y(l) = 0. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Здесь B_0, B_l - коэффициенты относительной жесткости упругих закреплений оболочки при $x=0$ и $x=l$. Подставив решение $y(x) = C_1 \sin ax + C_2 \cos ax + C_3 \sin bx + C_4 \cos bx$ ($a^2 = v^2 - \sqrt{v^4 - r^4}$, $b^2 = v^2 + \sqrt{v^4 - r^4}$) уравнения (1.1) в краевые условия (1.2), находим частотное уравнение:

$$\begin{aligned} B_0 B_l \left[(\alpha^2 + \beta^2) \sin \alpha \sin \beta - 2\alpha\beta(1 - \cos \alpha \cos \beta) \right] - (B_0 + B_l)(\alpha^2 - \beta^2) \cdot \\ \cdot (\alpha^2 \beta \sin \alpha \cos \beta - \beta^2 \alpha \sin \beta \cos \alpha) - \alpha^2 \beta^2 (\alpha^2 - \beta^2)^2 \sin \alpha \sin \beta = 0 \end{aligned} \quad (1.3)$$

Математическое моделирование физических полей в кусочно-однородных средах

Кризский В.Н.

СГПА, Стерлитамак, Krizsky@rambler.ru

Аннотация

На основе методов интегральных преобразований, интегральных представлений и интегральных уравнений решения прямых трехмерных стационарных и нестационарных задач о физических полях в кусочно-однородных средах строятся рекуррентные алгоритмы, позволяющие понижать геометрическую сложность решаемой задачи. Формулируются обратные задачи и алгоритмы поиска границ сред, аппроксимированных сплайн-функциями, как экстремалей регуляризирующих функционалов.

Введение

Ряд физических процессов характеризуются полями, описываемыми дифференциальными уравнениями в частных производных второго порядка вида [1,2]:

$$\operatorname{div}(\sigma(P) \cdot \overline{\operatorname{grad} U(P,t)}) - a^2 U(P,t) - b^2 \frac{\partial U(P,t)}{\partial t} - c^2 \frac{\partial^2 U(P,t)}{\partial t^2} = -f(P,t)$$

Здесь $P = (x, y, z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$ - точка пространства, a, b, c - числовые коэффициенты, $f(P,t)$ - функция интенсивности источников/стоков поля, $\sigma(P)$ - функция, описывающая физические свойства среды, $U(P,t)$ - потенциал поля. Переменную $t \geq 0$ интерпретируют как время. При $c \neq 0$ имеем уравнения гиперболического типа (задачи колебательных процессов и сейсмоки, распределения электромагнитных полей (ЭМП) в изоляторе - волновое уравнение $/a = 0, b = 0/$, ЭМП в области однородности среды - телеграфное уравнение $/a = 0, b \neq 0/$). При $c = 0$ и $b \neq 0$ получим уравнения параболического типа (задачи диффузии, теплопроводности и термометрии, распределения квазистационарных ЭМП). При $c = 0$ и $b = 0$ будем иметь эллиптические уравнения

(задачи гравиметрии, геоэлектрики стационарных ЭМП – уравнение Пуассона или Лапласа / $a = 0$ / и монохроматические ЭМП – уравнение Гельмгольца / $a \neq 0$ /).

В кусочно-однородных средах $\Omega = \bigcup_{i=1}^N \Omega_i$, где функция $\sigma(P)$ – кусочно-постоянна, в области Ω_i постоянства функции $\sigma(P) = \sigma_i = const > 0$, уравнение имеет вид:

$$\Delta U_i(P, t) - \frac{a_i^2}{\sigma_i} U_i(P, t) - \frac{b_i^2}{\sigma_i} \frac{\partial U_i(P, t)}{\partial t} - \frac{c_i^2}{\sigma_i} \frac{\partial^2 U_i(P, t)}{\partial t^2} = -\frac{1}{\sigma_i} f(P, t)$$

Разбиение расчетной области Ω на кусочно-однородные подобласти Ω_i с достаточно гладкими границами S_i всегда можно осуществить. Количество подобластей N будет определяться задаваемой точностью аппроксимации функции $\sigma(P)$ кусочно-постоянной функцией.

В силу принципа суперпозиции потенциальных полей, будем считать, что функция $f(P, t)$ определяет интенсивность $I(t)$ точечного источника в некоторой фиксированной точке $A(x_0, y_0, z_0)$ области Ω , т.е.: $f(P, t) = I(t) \cdot \delta(P - A)$, где $\delta(P - A)$ – дельта-функция Дирака.

На внешней границе Γ ограниченной области Ω в общем случае задают граничные условия третьего рода $\alpha \frac{\partial U(P, t)}{\partial \mathbf{n}} - \beta U(P, t) \Big|_{P \in \Gamma} = \psi(P, t)$, $|\alpha| + |\beta| \neq 0$. На бесконечной границе неограниченной области Ω (для внешних краевых задач) определяют условия «регулярности» решения в виде: $u(P, t) \rightarrow 0$, при $P \rightarrow \infty$.

На границе $\gamma_{ij} = S_i \cap S_j$ контакта сред Ω_i и Ω_j с различными постоянными значениями $\sigma(P)$, задают условия сопряжения четвертого рода – непрерывности потенциала и плотности потока физической величины:

$$U_i(P, t) \Big|_{P \in \gamma_{ij}} = U_j(P, t) \Big|_{P \in \gamma_{ij}}; \quad \sigma_i \frac{\partial U_i(P, t)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{P \in \gamma_{ij}} = \sigma_j \frac{\partial U_j(P, t)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{P \in \gamma_{ij}}$$

Кроме того, задачу для нестационарных случаев в зависимости от типа уравнения дополняют одним или двумя начальными условиями, описывая состояние системы в начальный момент времени: $U(P, 0) = \varphi_1(P)$ и $U'(P, 0) = \varphi_2(P)$.

Прямая и обратная задачи по асимметричным колебаниям цилиндрической оболочки

Сафина Г.Ф., Зарипова Л.И.

НФ БашГУ, Safinagf@mail.ru

Аннотация

В работе рассмотрены прямая и обратная спектральная задачи по асимметричным колебаниям цилиндрической оболочки. Исследовано влияние коэффициентов относительной жесткости упругих закреплений цилиндрической оболочки со шпангоутами на спектр частот ее колебаний. Найден метод диагностирования закреплений оболочки по собственным частотам ее колебаний. Практическая значимость полученных результатов состоит в том, что рассмотренный метод решения обратной задачи позволяет обеспечивать заданный диапазон частот колебаний цилиндрической оболочки при помощи изменений в ее упругих закреплениях.

Введение

Известно, что круговые цилиндрические оболочки являются элементами многих механических систем. Величины жесткости закреплений краевых ребер оболочек со временем могут менять свои значения в связи с усталостью материалов и температурными изменениями. Об относительной жесткости упругих шпангоутов, на которые опираются края цилиндрической оболочки невозможно судить при помощи визуального осмотра, без часто дорогостоящей процедуры разборки механической системы. Поэтому, для диагностирования жесткостей закреплений краев оболочек важен поиск методов неразрушающего контроля.

Влияние ряда краевых условий на величины собственных значений асимметричных колебаний цилиндрических оболочек рассмотрено в работе [1]. Обратное влияние – влияние собственных частот на краевые условия, исследовано в работе [2]. Представленная в данном сообщении работа является продолжением этих исследований.

Целью работы является исследование влияния коэффициентов относительной жесткости упругих закреплений оболочек на спектр частот их

другие подгруппы в матрицах, содержащие инволюции, отвечающие плотной системе идемпотентов.

Список литературы

- Dieudonne J. On the automorphisms of the classical groups // Men. Amer. Soc. – 1951. №2. – p. 1-95.
 Rickart C.E. Isomorphic groups of linear transformations // Amer. I. Math. – 1950. – v. 72. – p. 451-464.
 Yan Shi-jian. Linear groups over a ring // Chinese Math. – 1956. – v.7, №2. – p. 163-179.
 Голубчик И.З., Михалев А.В. Изоморфизмы полной линейной группы над ассоциативным кольцом // Вестник Моск. ун-та. – 1983. – Серия 1. Математика. Механика. - №3. – с. 61-72.
 Голубчик И.З., Михалев А.В. Изоморфизм унитарных групп над ассоциативными кольцами // Зап. науч. семинаров Ленингр. отд. Мат. ин-та АН СССР. – 1985. – Т. 26, №4. – с. 49 – 67.

В случае эллиптических уравнений функции $U(P,t)$, $f(P,t)$ и, следовательно, $I(t)$ не зависят от времени: $U(P,t)=U(P)$, $f(P,t)=f(P)$, $I(t)=I=const$.

Опишем алгоритмы решения таких задач, позволяющие понижать их геометрическую сложность (величину N) до уровня аналитической или численной разрешимости.

Прямые задачи

1. Стационарный случай. Рассмотрим кусочно-однородную среду Ω с внешней границей Γ , состоящую из областей Ω_i . Граница области $\Omega_i - S_i = \gamma_i \cup \Gamma_i$, где $\Gamma_i = \Gamma \cap S_i$ и $\gamma_i = S_i \setminus \Gamma_i$. Пусть в среде Ω_{i_0} в точке $A(x_0, y_0, z_0)$ находится точечный источник интенсивности I . Математическая модель распределения потенциала поля $U(P)$, $P(x, y, z)$ в данной среде имеет вид:

$$\Delta U_{i_0}(P) - \frac{a_{i_0}^2}{\sigma_{i_0}} U_{i_0}(P) = -\frac{I}{\sigma_{i_0}} \delta(P-A); \Delta U_i(P) - \frac{a_i^2}{\sigma_i} U_i(P) = 0, i = \overline{1, N}, i \neq i_0; \quad (1.1)$$

$$U_i(P) - U_j(P) \Big|_{\gamma_i \cap \gamma_j} = 0, \sigma_i \frac{\partial U_i(P)}{\partial \mathbf{n}} - \sigma_j \frac{\partial U_j(P)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\gamma_i \cap \gamma_j} = 0, \quad i = \overline{1, N}, \quad (1.2)$$

$$j \in \Gamma_{\gamma_i}^N = \{j \mid j = \overline{1, N}, i < j; \gamma_i \cap \gamma_j \neq \emptyset\};$$

$$\alpha_i \frac{\partial U_i(P)}{\partial \mathbf{n}} - \beta_i U_i(P) \Big|_{P \in \Gamma_i} = \psi_i(P), |\alpha_i| + |\beta_i| \neq 0, \quad i = i_1, i_2, \dots, i_k, \quad k \leq N; \quad (1.3)$$

$$U_m(P) \rightarrow 0, \quad P \rightarrow \infty, \quad m = m_1, m_2, \dots, m_n, \quad n \leq N. \quad (1.4)$$

Здесь $\Gamma_{\gamma_i}^N$ – множество номеров областей, граничащих с областью Ω_i , i_1, i_2, \dots, i_k – номера областей Ω_i , участки границ которых являются частью внешней границы Γ области Ω , m_1, m_2, \dots, m_n – номера областей с участками границ, уходящими в бесконечность, \mathbf{n} – вектор внешней нормали к границе.

Рассмотрим вспомогательную задачу, определяющую функцию Грина:

$$\Delta G_i(P, Q) - \kappa_i G_i(P, Q) = -\delta(P-Q), P(x, y, z) \in \Omega_i, \quad i = \overline{1, N}, N_1 \leq N, Q(\xi, \eta, \varphi); \quad (1.5)$$

$$G_i(P, Q) - G_j(P, Q) \Big|_{\gamma_i \cap \gamma_j} = 0, \sigma_i \frac{\partial G_i(P, Q)}{\partial \mathbf{n}} - \sigma_j \frac{\partial G_j(P, Q)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\gamma_i \cap \gamma_j} = 0, \quad i = \overline{1, N}, j \in \Gamma_{\gamma_i}^N; \quad (1.6)$$

$$\alpha_i \frac{\partial G_i(P, Q)}{\partial \mathbf{n}} - \beta_i G_i(P, Q) \Big|_{P \in \Gamma_i} = 0, |\alpha_i| + |\beta_i| \neq 0, i = i_1, i_2, \dots, i_{k_1}, k_1 \leq k \leq N_1; \quad (1.7)$$

$$G_m(P, Q) \rightarrow 0, P \rightarrow \infty, m = m_1, m_2, \dots, m_{n_1}, n_1 \leq n \leq N. \quad (1.8)$$

Задача (1.5)–(1.8) – задача эллиптического типа с оператором Гельмгольца $H[U_i(P)] \equiv \Delta U_i(P) - \frac{a_i^2}{\sigma_i} U_i(P) = \Delta U_i(P) - \kappa_i U_i(P)$, $\kappa_i = \frac{a_i^2}{\sigma_i} \geq 0$.

Будем считать, что функция Грина $G(P, Q)$ определяется в среде, состоящей из первых N_1 областей Ω_i .

Если $N_1 = N$, то решение задачи (1.1)–(1.4) имеет вид [2]:

$$U(P) = \frac{I}{\sigma_{i_0}} G(P, A) + \sum_{l_1} \frac{1}{\alpha_{l_1}} \int_{\Gamma_{l_1}} \psi_{l_1}(Q) G_{l_1}(P, Q) d\Gamma_{l_1, Q} + \sum_{l_2} \frac{1}{\beta_{l_2}} \int_{\Gamma_{l_2}} \psi_{l_2}(Q) \frac{\partial G_{l_2}(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\Gamma_{l_2, Q},$$

где l_1 – номера участков внешней границы Γ , на которых заданы условия второго или третьего рода при $\alpha_{l_1} \neq 0$, а l_2 – номера участков внешней границы Γ , на которых заданы условия первого рода (при $\alpha_{l_2} = 0, \beta_{l_2} \neq 0$).

При $N_1 < N$ рассмотрим в каждой области Ω_i формулу Остроградского [2]:

$$\int_{\Omega_i} (V(Q)H[U_i(Q)] - U_i(Q)H[V(Q)]) d\Omega_{i, Q} = \int_{S_i} (V(Q) \frac{\partial U_i(Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} - U_i(Q) \frac{\partial V(Q)}{\partial \mathbf{n}_Q}) dS_{i, Q},$$

подставляя в нее вместо функции $V(Q)$ функцию Грина $G(P, Q)$, определяемую решением граничной задачи (1.5)–(1.8). Полученные интегральные представления решения в областях Ω_i , $i = \overline{1, N}$ умножим на σ_i и просуммируем по i от 1 до N с учетом граничных условий (1.2)–(1.4) и (1.6)–(1.8). Получим интегральное представление решения задачи (1.1)–(1.4) в Ω :

$$U(P) \sum_{i=1}^N v_i \sigma_i = I G_{i_0}(P, A) + \sum_{i=N_1+1}^N \sum_{j \in \Gamma_{N_1}^i} (\sigma_j - \sigma_i) \int_{\Gamma_i \cap \Gamma_j} U_i(Q) \frac{\partial G_i(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\gamma_{i, Q} + \quad (1.9)$$

$$+ \sum_{l_1} \frac{\sigma_{l_1}}{\alpha_{l_1}} \int_{\Gamma_{l_1}} \psi_{l_1}(Q) G_{l_1}(P, Q) d\Gamma_{l_1, Q} + \sum_{l_2} \frac{\sigma_{l_2}}{\beta_{l_2}} \int_{\Gamma_{l_2}} \psi_{l_2}(Q) \frac{\partial G_{l_2}(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\Gamma_{l_2, Q}, v_i = \begin{cases} 1, & P \in \Omega_i \\ 1/2, & P \in S_i \\ 0, & P \notin \Omega_i \cup S_i \end{cases},$$

согласно которому, решение исходной задачи (1.1)–(1.4) может быть найдено в любой точке P кусочно-однородной среды Ω , если определено решение задачи (1.5)–(1.8) – функция Грина $G(P, Q)$ и известны граничные значения потенциала на границах сред, не вошедших в задачу для функции Грина.

Теорема 1. Если есть изоморфизм групп обратимых элементов $\varphi: U(R) \rightarrow U(S)$, то существуют разложения в прямую сумму подколец $R = R_1 \oplus R_2, S = S_1 \oplus S_2$, кольцевой изоморфизм $\theta_1: R_1 \rightarrow S_1$, кольцевой антиизоморфизм $\theta_2: R_2 \rightarrow S_2$, такие что $\varphi(A) = \theta_1(eA) + \theta_2((1-e)A^{-1})$ для всех $A \in E(R)$.

Утверждение теоремы 1 доказано в [4] для полной линейной группы $GL_n(R), n \geq 3$ над произвольным ассоциативным кольцом R . Для коммутативных колец эта теорема доказана в [3].

Изоморфизмы унитарных групп над ассоциативными кольцами

Сопряжением $\tau \in R$ называют антиавтоморфизм мультипликативно-второго порядка.

Пусть $\{e_i \in R | 1 \leq i \leq 6\}$ – плотная ортогональная система идемпотентов:

$$e_i^2 = e_i, e_i \cdot e_j = 0, ReR = R, \sum_{i=1}^6 e_i = 1, e_k^r = e_{k+3}, 1 \leq i \neq j \leq 6, 1 \leq k \leq 3$$
 Пусть

$U(R, \tau) = \{A \in R | A^\tau \cdot A = A \cdot A^\tau = 1\}$ – унитарная (ортогональная, симплектическая) группа и $E(R, \tau)$ – подгруппа в $U(R, \tau)$, порожденная элементами $1 + e_i r e_j - (e_i r e_j)^\tau$, где $r \in R, 1 \leq i \neq j \leq 6$.

Пусть центр $Z(R)$ кольца R содержит обратимый элемент α , такой, что элемент $\alpha \alpha^\tau - 1$ обратим в R .

Справедлива следующая теорема.

Теорема 2. Пусть $\varphi: U(R, \tau_1) \rightarrow U(S, \tau_2)$ – изоморфизм групп, где τ_1 и τ_2 – сопряжения в R и S соответственно. Тогда существует изоморфизм колец $\theta: R \rightarrow S$, такой, что $\varphi(A) = \theta(A)$ для всех $A \in E(R, \tau_1)$.

В доказательстве теоремы 1 используются коммутаторные формулы с элементами $1 + e_i r e_j$ и инволюциями $1 - 2(e_i + e_j)$, где $r \in R, 1 \leq i \neq j \leq 3$. В доказательстве теоремы 2 – с элементами $1 + e_i r e_j - (e_i r e_j)^\tau$ и инволюциями $1 - 2(e_i + e_i^\tau + e_j + e_j^\tau)$, где $r \in R, 1 \leq i \neq j \leq 3, \tau_1$ – сопряжение в R . Не трудно показать, что их образы будут такого же вида. Используя коммутаторные формулы над образами, можно перейти от гомоморфизма групп к гомоморфизму колец.

Общий случай $1 \leq i \neq j \leq n$ сводится к случаю $1 \leq i \neq j \leq 3$, поскольку можно выбрать сумму и осуществить переход от n к 3: $e'_1 = e_1, e'_2 = e_2, e'_3 = e_3 + e_4 + \dots + e_n$.

Полученные результаты позволяют перенести описание изоморфизмов с матричных групп на сетевые подгруппы в матрицах и некоторые

О методе инволюций в теории линейных групп

Исмагилова А.С., Сатышев И.С.

БашГУ, Нефтекамский филиал, IsmagilovaAS@rambler.ru

Аннотация

В работе описаны изоморфизмы классических групп над ассоциативными кольцами с $\frac{1}{2}$. Особенность состоит в том, что кольцо содержит плотную ортогональную систему идемпотентов, которые не сопряжены.

Введение

Главная тенденция теории автоморфизмов классических групп – это переход от коммутативных колец к некоммутиративным, далее, - от колец матриц к еще более общим.

Метод инволюций был введен Дьедоне [1] и Риккартом [2], который в дальнейшем был модифицирован. Полученные результаты были доказаны с помощью этого метода и вычислительной техники Янь Ши-цзяня [3], развитый в работах Голубчика И.З. и Михалева А.В. [4,5].

Изоморфизмы групп обратимых элементов над ассоциативными кольцами

Пусть R и S - ассоциативные кольца, $\frac{1}{2} \in R, \frac{1}{2} \in S$.

Элемент $\delta \in R$ называют инволюцией, если $\delta^2 = 1$.

Элемент $e \in R$ называют идемпотентом, если $e^2 = e$.

Пусть $\{e_i \in R | 1 \leq i \leq 3\}$ - плотная ортогональная система идемпотентов:

$$e_i^2 = e_i, e_i \cdot e_j = 0, R e_i R = R, \sum_{i=1}^3 e_i = 1, 1 \leq i \neq j \leq 3$$

Пусть $U(R)$ - группа обратимых элементов кольца R , $E(R)$ - подгруппа в $U(R)$, порожденная элементами $1 + e_i r e_j$ для всех $r \in R, 1 \leq i \neq j \leq 3$.

Следующая теорема показывает, что изоморфизм групп обратимых элементов стандартный на элементарной подгруппе.

Опуская в (1.9) точку P на каждую из поверхностей $\gamma_l, l \in \Gamma_{\gamma_k}^N, k = \overline{N_1+1, N}$ получим систему интегральных уравнений Фредгольма второго рода:

$$U_l(P) - 2 \sum_{i=N_1+1}^N \sum_{j \in \Gamma_{\gamma_i}^N} \frac{\lambda_{ij}^-}{\lambda_{kl}^+} \int_{\gamma_i \cap \gamma_j} U_i(Q) \frac{\partial G_i(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\gamma_{iQ} = \\ = \frac{2I}{\lambda_{kl}^+} G_{\gamma_k}(P, A) + \frac{2}{\lambda_{kl}^+} \sum_{i=N_1+1}^N \frac{\sigma_i}{\alpha_i} \int_{\gamma_i} \psi_{\gamma_i}(Q) G_i(P, Q) d\Gamma_{iQ} + \frac{2}{\lambda_{kl}^+} \sum_{i=N_1+1}^N \frac{\sigma_i}{\beta_i} \int_{\gamma_i} \psi_{\gamma_i}(Q) \frac{\partial G_i(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\Gamma_{iQ}$$

относительно неизвестных граничных значений потенциала $U_l(P)$. Здесь $P \in \gamma_l, l \in \Gamma_{\gamma_k}^N, k = \overline{N_1+1, N}, Q \in \gamma_j, j \in \Gamma_{\gamma_i}^N, i = \overline{N_1+1, N}, \lambda_{ij}^{\pm} = \sigma_j \pm \sigma_i$.

Метод обладает универсальностью – он позволяет варьировать вмещающее пространство от исходного сложно-построенного ($N_1 = N$) до однородного ($N_1 = 1$).

Данный подход допускает реализацию процедуры упрощения геометрии среды. Так как задача для функции Грина аналогична исходной задаче, но с меньшим числом областей $N_1 < N$, то для ее решения снова может быть применен описанный выше метод, в котором вторая функция Грина строится для области с количеством подобластей $N_2 < N_1$. Понижение геометрической сложности среды осуществляется до такого N_r ($N_r < \dots < N_2 < N_1 < N$), для которого задача для функции Грина будет разрешима аналитически или численно. Отметим, что для однородной среды ($N_r = 1$), для ряда областей Ω , аналитические представления для функции Грина найдены [3]: известны функции Грина часто используемых в геофизике сред – однородного пространства $G(P, Q) = \exp(-\sqrt{k}R(P, Q)) / (4\pi R(P, Q))$, и полупространства с плоской границей и граничным условием первого рода на ней $G(P, Q) = (4\pi)^{-1} (\exp(-\sqrt{k}R(P, Q)) / R(P, Q) - \exp(-\sqrt{k}R(P, Q^*)) / R(P, Q^*))$, где $R(P, Q)$ – расстояние между точками P и Q , Q^* – точка, симметричная точке Q относительно границы.

Предложенный выше способ позволяет и усложнять геометрию пространства, так как кусочно-однородное пространство, для которого получено решение прямой задачи, может быть принято за вмещающее, т.е. может быть дополнено новым включением. К новой задаче применимы аналогичные формулы.

2. Нестационарный случай. Пусть в кусочно-однородной среде Ω , состоящей из областей $\Omega_i, i = \overline{1, N}$, в среде Ω_{i_0} в точке $A(x_0, y_0, z_0)$ нахо-

дится точечный источник, изменяющий свою интенсивность во времени по закону $I(t)$, и математическая модель распределения потенциала поля $U(P, t)$ в точке $P(x, y, z)$ в момент времени t данной среды описывается начально-краевой задачей для уравнений гиперболического типа (сохранены обозначения п.1.):

$$\Delta U_{i_0}(P, t) - \frac{a_{i_0}^2}{\sigma_{i_0}} U_{i_0}(P, t) - \frac{b_{i_0}^2}{\sigma_{i_0}} \frac{\partial U_{i_0}(P, t)}{\partial t} - \frac{c_{i_0}^2}{\sigma_{i_0}} \frac{\partial^2 U_{i_0}(P, t)}{\partial t^2} = -\frac{I(t)}{\sigma_{i_0}} \delta(P-A), \quad c_{i_0} \neq 0; \quad (2.1)$$

$$\Delta U_i(P, t) - \frac{a_i^2}{\sigma_i} U_i(P, t) - \frac{b_i^2}{\sigma_i} \frac{\partial U_i(P, t)}{\partial t} - \frac{c_i^2}{\sigma_i} \frac{\partial^2 U_i(P, t)}{\partial t^2} = 0, \quad c_i \neq 0, \quad i = \overline{1, N}, \quad i \neq i_0; \quad (2.2)$$

$$U_i(P, t) - U_j(P, t) \Big|_{\gamma_i \cap \gamma_j} = 0, \quad \sigma_i \frac{\partial U_i(P, t)}{\partial \mathbf{n}} - \sigma_j \frac{\partial U_j(P, t)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\gamma_i \cap \gamma_j} = 0, \quad i = \overline{1, N}, \quad j \in \Gamma_{\gamma_i}^N, \quad (2.3)$$

$$\alpha_i \frac{\partial U_i(P, t)}{\partial \mathbf{n}} - \beta_i U_i(P, t) \Big|_{P \in \Gamma_i} = \psi_i(P, t), \quad |\alpha_i| + |\beta_i| \neq 0, \quad i = i_1, i_2, \dots, i_k, \quad k \leq N; \quad (2.4)$$

$$U_m(P, t) \rightarrow 0, \quad P \rightarrow \infty, \quad m = m_1, m_2, \dots, m_n, \quad n \leq N; \quad (2.5)$$

$$U(P, 0) = \varphi_1(P), \quad U_t(P, 0) = \varphi_2(P). \quad (2.6)$$

Применим к задаче интегральное преобразование Лапласа:

$$U^\omega(P) = \int_0^\infty U(P, t) e^{-\omega t} dt, \quad U(P, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\omega_0 - i\infty}^{\omega_0 + i\infty} U^\omega(P) e^{\omega t} d\omega.$$

Получим однопараметрическое (по ω) семейство эллиптических краевых задач:

$$\Delta U_{i_0}^\omega(P) - \frac{a_{i_0}^2 + \omega b_{i_0}^2 + \omega^2 c_{i_0}^2}{\sigma_{i_0}} U_{i_0}^\omega(P) = -\frac{b_{i_0}^2 + \omega c_{i_0}^2}{\sigma_{i_0}} \varphi_1(P) - \frac{c_{i_0}^2}{\sigma_{i_0}} \varphi_2(P) - \frac{I^\omega}{\sigma_{i_0}} \delta(P-A), \quad (2.7)$$

$$\Delta U_i^\omega(P) - \frac{a_i^2 + \omega b_i^2 + \omega^2 c_i^2}{\sigma_i} U_i^\omega(P) = -\frac{b_i^2 + \omega c_i^2}{\sigma_i} \varphi_1(P) - \frac{c_i^2}{\sigma_i} \varphi_2(P), \quad i = \overline{1, N}, \quad i \neq i_0; \quad (2.8)$$

$$U_i^\omega(P) - U_j^\omega(P) \Big|_{\gamma_i \cap \gamma_j} = 0, \quad \sigma_i \frac{\partial U_i^\omega(P)}{\partial \mathbf{n}} - \sigma_j \frac{\partial U_j^\omega(P)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\gamma_i \cap \gamma_j} = 0, \quad i = \overline{1, N}, \quad j \in \Gamma_{\gamma_i}^N; \quad (2.9)$$

$$\alpha_i \frac{\partial U_i^\omega(P)}{\partial \mathbf{n}} - \beta_i U_i^\omega(P) \Big|_{P \in \Gamma_i} = \psi_i^\omega(P), \quad |\alpha_i| + |\beta_i| \neq 0, \quad i = i_1, i_2, \dots, i_k, \quad k \leq N; \quad (2.10)$$

$$U_m^\omega(P) \rightarrow 0, \quad P \rightarrow \infty, \quad m = m_1, m_2, \dots, m_n, \quad n \leq N \quad (2.11)$$

с оператором Гельмгольца

$$H[U_i^\omega(P)] \equiv \Delta U_i^\omega(P) - \kappa_i U_i^\omega(P), \quad \kappa_i = \frac{a_i^2 + \omega b_i^2 + \omega^2 c_i^2}{\sigma_i}.$$

Применяя к решению задачи (2.7)-(2.11) метод п.1 с функцией Грина $G^\omega(P, Q)$, определяемой задачей вида (1.5)-(1.8), получим представление решения:

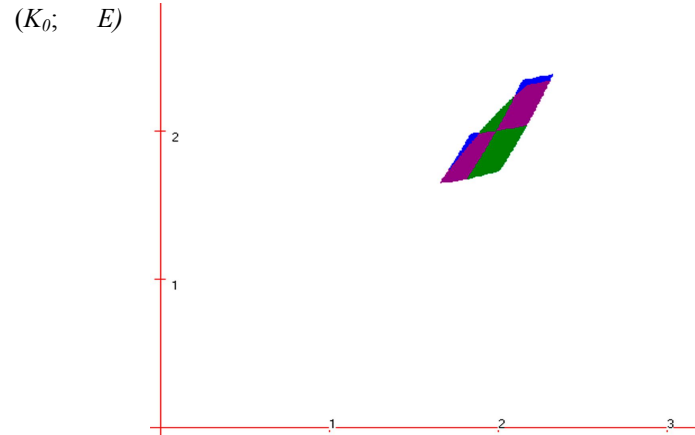


Рис.3. Область решений ($N=3$, «тестовые» значения $K = E = 2$; eps=15% от значения модуля функции $L_n(T)$ для первого способа или 10% от значения модуля K_i для второго способа, $dT=0,05$). Зеленый цвет соответствует области решений, полученных первым способом, синий – вторым, фиолетовый – третьим.

проверим, чтобы соответствующая им функция $K(T)$ не отклонялась по модулю от $L_n(T)$ более, чем на $\varepsilon(T)$ на всем промежутке $T_1 \leq T \leq T_2$ (T перебираем с достаточно малым шагом dT).

Способ 2. Для каждой пары значений $(K_0; E)$ проверим, чтобы соответствующая им функция $K(T)$ не отклонялась по модулю от опытных данных более, чем на $\varepsilon(T)$ **только** в точках $(T_i; K_i)$. Решение, полученное вторым способом, можно считать достаточно корректным, так как функция вида (*) гладкая и монотонно возрастающая для всех значений T . Тем не менее, наложим на решение дополнительное условие, заключающееся в том, чтобы полученная нами функция $K(T)$ не лежала полностью по одну сторону от точек $(T_i; K_i)$. Решение отвергается, если более 95% точек полученного решения лежат по одну сторону от точек $(T_i; K_i)$.

Список литературы

- Вентцель Е.С. Исследование операций. Задачи, принципы, методология. Учеб. Пособие для студ. вузов. – 2-е изд., стер. – М.: Высш. Шк., 2001
- Вержбицкий В.М. Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения): учеб. пособие для вузов. – М.: Высш. Шк., 2001

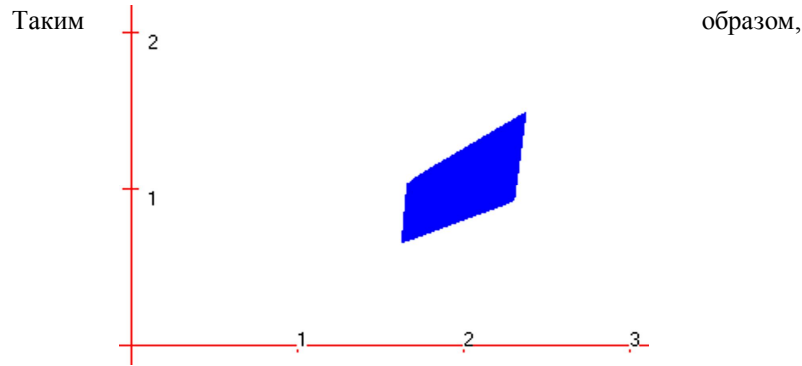


Рис.2. Область решений обратной задачи для 2-х переменных ($\bar{\lambda}_{12}=1$, $\bar{\lambda}_{21}=2$. eps=15% от значения функции $\bar{p}_i(x)$)

первоначальная задача сводится к тому, чтобы определить, при каких значениях λ_{12} и λ_{21} система неравенств

$$\begin{cases} |\bar{p}_1(x) - p_1(x)| < \varepsilon(x) \\ |\bar{p}_2(x) - p_2(x)| < \varepsilon(x) \end{cases} \quad (5)$$

выполняется для всех x из интервала $0 \leq x \leq X$.

Реализация на ЭВМ. Входными данными программы являются первоначальные «тестовые» значения $\bar{\lambda}_{12}$, $\bar{\lambda}_{21}$

Численное решение задачи на ЭВМ представляет собой программу, перебирающую значения λ_{12} и λ_{21} на некоторой прямоугольной области с заданным шагом и проверяющую выполнение системы условий (5).

Результат работы программы представлен на рисунке 2.

Пример обратной задачи кинетической химии

Постановка задачи. Имеется набор из N пар значений $(T_i; K_i)$, полученный опытным путем. Предполагается, что функция $K(T)$ имеет вид:

$$K(T) = K_0 \cdot e^{-\frac{E}{T}} \quad (*)$$

Теперь рассмотрим следующую задачу: при каких значениях K_0 и E соответствующая им функция $K(T)$ не отклоняется по модулю от опытных данных более, чем на $\varepsilon(T)$ во всех точках $(T_i; K_i)$.

Решение. Способ 1. Построим интерполяционный многочлен Лагранжа $L_n(T)$ по точкам $(T_i; K_i)$. Далее, для каждой пары значений

$$\begin{aligned} U^\omega(P) \sum_{i=1}^N v_i \sigma_i = I^\omega G_0^\omega(P, A) + \sum_{i=N_1+1}^N \sum_{j \in \Gamma_{\gamma_i}^+} (\sigma_j - \sigma_i) \int_{\gamma_i \cap \gamma_j} U_i^\omega(Q) \frac{\partial G_i^\omega(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\gamma_{iQ} + \\ + \sum_{i=1}^N \int_{\Omega_i} ((c_i^2 \omega + b_i^2) \varphi_1(Q) + c_i^2 \varphi_2(Q)) G_i^\omega(P, Q) d\Omega_{iQ} + \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i}{\alpha_i} \int_{\Gamma_{i_1}} \psi_i^\omega(Q) G_i^\omega(P, Q) d\Gamma_{i_1Q} + \\ + \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i}{\beta_i} \int_{\Gamma_{i_2}} \psi_i^\omega(Q) \frac{\partial G_i^\omega(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\Gamma_{i_2Q}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Граничные значения потенциала в (2.12) определяются системой интегральных уравнений Фредгольма:

$$\begin{aligned} U^\omega(P) - 2 \sum_{i=N_1+1}^N \sum_{j \in \Gamma_{\gamma_i}^+} \frac{\lambda_{ij}^-}{\lambda_{kl}^+} \int_{\gamma_i \cap \gamma_j} U_i^\omega(Q) \frac{\partial G_i^\omega(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\gamma_{iQ} = \frac{2}{\lambda_{kl}^+} I^\omega G_0^\omega(P, A) + \\ + \frac{2}{\lambda_{kl}^+} \sum_{i=1}^N \int_{\Omega_i} ((c_i^2 \omega + b_i^2) \varphi_1(Q) + c_i^2 \varphi_2(Q)) G_i^\omega(P, Q) d\Omega_{iQ} + \\ + \frac{2}{\lambda_{kl}^+} \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i}{\alpha_i} \int_{\Gamma_{i_1}} \psi_i^\omega(Q) G_i^\omega(P, Q) d\Gamma_{i_1Q} + \frac{2}{\lambda_{kl}^+} \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i}{\beta_i} \int_{\Gamma_{i_2}} \psi_i^\omega(Q) \frac{\partial G_i^\omega(P, Q)}{\partial \mathbf{n}_Q} d\Gamma_{i_2Q}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Здесь $P \in \gamma_i$, $l \in \Gamma_{\gamma_k}^+$, $k = \overline{N_1+1, N}$, $Q \in \gamma_j$, $j \in \Gamma_{\gamma_i}^+$, $i = \overline{N_1+1, N}$, $\lambda_{ij}^\pm = \sigma_j \pm \sigma_i$.

Геометрическая сложность задачи (2.7)-(2.11) в пространстве образов преобразования Лапласа понижается как и в стационарном случае. Алгоритм описан в п.1.

Решение задач для уравнений параболического, а также смешанных типов, тоже дается формулами (2.12) и (2.13), в которых следует обнулить соответствующие коэффициенты a_i, b_i, c_i , $i = \overline{1, N}$.

Часто задачу (2.1)-(2.6) формулируют для отклонений (возмущений) поля от стационарного распределения, полагая начальные возмущения равными нулю ($\varphi_1(P) = 0, \varphi_2(P) = 0$). Это упрощает расчетные формулы (2.12), (2.13) – в них исчезают объемные интегралы по областям Ω_i .

Обратные задачи поиска границ

В случае стационарных процессов обратная задача поиска в пространстве $W_2^1(H)$ границы S_k среды Ω_k с постоянным значением параметра $\sigma(P) = \sigma_k$, как экстремали регуляризирующего функционала, по известным экспериментальным значениям $\tilde{U}(P, A)$ потенциала, полученным на множестве $E \times E$, $P, A \in E \subset \Omega$ имеет вид:

$$S_k = \text{Arg min} \left\{ \|U(P, A, S_k) - \tilde{U}(P, A)\|_{L_2(E \times E)}^2 + \alpha \|S_k - S_k^*\|_{W_2^1(H)}^2 \right\},$$

где $U(P, A, S_k)$ – решение прямой задачи (1.1)–(1.4), S_k^* – априори известное описание границы, $H \subset R^2$ – множество изменения параметров параметрического описания границы, α – параметр регуляризации.

Поиск параметрической границы $S_k = S_k(\bar{s}, \tau_1, \tau_2)$, где $\tau_1 \in [a_1, b_1]$, $\tau_2 \in [a_2, b_2]$, включения Ω_k сводится к поиску элемента компактного множества – конечномерного вектора $\bar{s} = (s_1, \dots, s_L)$, входящего в описание границы при ограничении вариации его компонент $m_i \leq s_i \leq M_i$, $i = \overline{1, L}$. А в общем случае – к поиску аппроксимирующей границу сплайн-функции $Sp_k = Sp_k(\bar{s}, \tau_1, \tau_2)$, в котором конечномерным вектором \bar{s} является вектор значений функции S_k в узлах сеточной области $W_h \subset [a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$. Число параметров L – есть количество узлов сетки W_h .

Для нестационарных процессов возможны два подхода. *Первый* – это сведение к семейству стационарных задач применением преобразования Лапласа к временным трендам экспериментальным данным потенциала $\tilde{U}(P, A, t)$, $t \in [t_0, t_e]$ и получению множества данных $\tilde{U}^\omega(P, A)$ при различных значениях параметра ω из фиксированного набора $\{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$. Затем – определение на решении $U^\omega(P, A, S_k)$ прямой задачи (2.7)–(2.11) границы S_k как экстремали функционала:

$$S_k = \text{Arg min} \left\{ \sum_{\omega} \|U^\omega(P, A, S_k) - \tilde{U}^\omega(P, A)\|_{L_2(E \times E)}^2 + \alpha \|S_k - S_k^*\|_{W_2^1(H)}^2 \right\}.$$

Второй подход – поиск границы S_k на исходных экспериментальных данных $\tilde{U}(P, A, t)$, $t \in [t_0, t_e]$ – минимизация на решении задач (2.1)–(2.6) функционала

$$F^\alpha(S_k) = \|U(P, A, t, S_k) - \tilde{U}(P, A, t)\|_{L_2(E \times E \times [t_0, t_e])}^2 + \alpha \|S_k - S_k^*\|_{W_2^1(H)}^2.$$

Апробация вышеизложенных алгоритмов проведена для стационарных задач геоэлектроразведки постоянным током $/a_i = b_i = c_i = 0$, $i = \overline{1, N}$ / в работе [3].

Литература

1. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики – Москва: Наука, 1972. – 736 с.
2. Положий Г.Н. Уравнения математической физики. – Москва: Высшая школа, 1964. – 560 с.

Обратная задача для 2-х переменных

Постановка задачи. Рассмотрим систему, способную находиться в 2-х состояниях: S_1 и S_2 . Интенсивность перехода из состояния S_1 в состояние S_2 обозначим как λ_{12} , а из состояния S_2 в состояние S_1 как λ_{21} .

Решим задачу при некоторых фиксированных $\bar{\lambda}_{12}$, $\bar{\lambda}_{21}$ и получим решения $\bar{p}_1(x)$ и $\bar{p}_2(x)$, где $p_i(x)$ – вероятность нахождения системы в состоянии S_i в момент времени x .

Теперь рассмотрим следующую задачу: при каких значениях λ_{12} и λ_{21} соответствующие им решения $p_1(x)$ и $p_2(x)$ будут отличаться по модулю от $\bar{p}_1(x)$ и $\bar{p}_2(x)$ не более чем на $\varepsilon(x)$ на промежутке времени $0 \leq x \leq X$.

Решение. Запишем систему Колмогорова, соответствующую значениям $\bar{\lambda}_{12}$ и $\bar{\lambda}_{21}$:

$$\begin{cases} \bar{p}_1'(x) = -\bar{\lambda}_{12}\bar{p}_1(x) + \bar{\lambda}_{21}\bar{p}_2(x) \\ \bar{p}_2'(x) = \bar{\lambda}_{12}\bar{p}_1(x) - \bar{\lambda}_{21}\bar{p}_2(x) \end{cases}$$

Решая эту систему как систему дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами, получим решение вида:

$$\begin{cases} \bar{p}_1(x) = C_1 + C_2 e^{-(\bar{\lambda}_{12} + \bar{\lambda}_{21})x} \\ \bar{p}_2(x) = \frac{\bar{\lambda}_{12}}{\bar{\lambda}_{21}} C_1 - C_2 e^{-(\bar{\lambda}_{12} + \bar{\lambda}_{21})x} \end{cases} \quad (1)$$

Зададим начальные условия вида:

$$\begin{cases} \bar{p}_1(0) = 1 \\ \bar{p}_2(0) = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Подставим (2) в (1) и получим:

$$\begin{cases} \bar{p}_1(x) = \frac{\bar{\lambda}_{21}}{\bar{\lambda}_{21} + \bar{\lambda}_{12}} + \frac{\bar{\lambda}_{12}}{\bar{\lambda}_{21} + \bar{\lambda}_{12}} e^{-(\bar{\lambda}_{12} + \bar{\lambda}_{21})x} \\ \bar{p}_2(x) = \frac{\bar{\lambda}_{12}}{\bar{\lambda}_{21} + \bar{\lambda}_{12}} - \frac{\bar{\lambda}_{12}}{\bar{\lambda}_{21} + \bar{\lambda}_{12}} e^{-(\bar{\lambda}_{12} + \bar{\lambda}_{21})x} \end{cases} \quad (3)$$

Аналогично, решаем систему Колмогорова для λ_{12} и λ_{21} с краевыми условиями вида (2):

$$\begin{cases} p_1(x) = \frac{\lambda_{21}}{\lambda_{21} + \lambda_{12}} + \frac{\lambda_{12}}{\lambda_{21} + \lambda_{12}} e^{-(\lambda_{12} + \lambda_{21})x} \\ p_2(x) = \frac{\lambda_{12}}{\lambda_{21} + \lambda_{12}} - \frac{\lambda_{12}}{\lambda_{21} + \lambda_{12}} e^{-(\lambda_{12} + \lambda_{21})x} \end{cases} \quad (4)$$

Компьютерное моделирование марковских процессов.

Нуриахметов И.А., Спивак С.И.

Нефтекамский филиал БашГУ, ildares@mail.ru
БашГУ, Уфа, s.spivak@bashnet.ru

Прямая задача

Постановка задачи. Рассмотрим систему, способную находиться в n состояниях $S_1 \dots S_n$. Интенсивность перехода из состояния S_i в состояние S_j обозначим как λ_{ij} . обозначим $\Lambda = \{ \lambda_{ij} \}_{i,j=1..n}$ – матрица интенсивностей переходов системы.

Задача: найти вероятности $p_i(x)$ нахождения системы в состоянии S_i в момент времени x , если известно начальное состояние системы.

Решение. Классическим методом моделирования данной задачи является система Колмогорова – система дифференциальных уравнений особого вида, в которых неизвестными функциями являются вероятности состояний $p_i(x)$. Фактически, система Колмогорова представляет собой систему линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами, которые явно вычисляются из матрицы Λ .

Реализация на ЭВМ. Входными данными являются число состояний системы n , соответствующая системе матрица интенсивностей переходов Λ и первоначальное состояние системы.

Численное решение выполнено методом Рунге-Кутты.

Результат вычислений выводится в виде графиков функций $p_i(x)$.

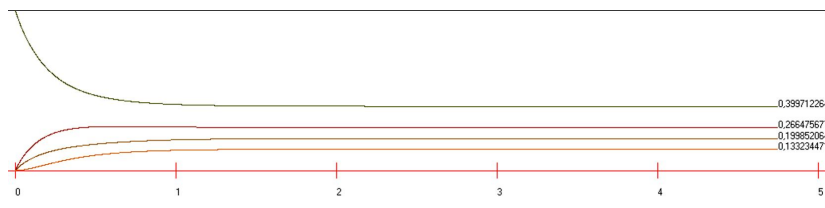


Рис.1. Пример работы программы для системы с 4-мя возможными состояниями.

3. Кризский В.Н. Математическое моделирование потенциальных геоэлектрических полей. – дисс. д.ф.-м.н., Стерлитамак, 2004. – 350 с.

Некоторые особенности численного решения обратной задачи молекулярно-массового распределения

Усманов Т.С.

РН-УФАНИПИНЕФТЬ, г.Уфа,

Введение

Продукты ионно-координационной полимеризации на катализаторах Циглера-Натта, как правило, характеризуются весьма широкими полимодальными экспериментальными кривыми молекулярно-массового распределения (ММР). Причины, приводящие к уширению кривых ММР, рассмотрены в [1]. При этом отмечено, что в ходе ионно-координационной полимеризации вид и ширина кривых ММР полимерных материалов во многом определяется кинетической неоднородностью катализатора [1,2].

Детальная математическая обработка экспериментальных гель-хроматограмм полидиенов сводится к обратной задаче формирования ММР, т.е. к численному решению интегрального уравнения Фредгольма первого рода:

$$q_w(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(s) K(s, x) ds, \quad (1)$$

где $s = \ln \lambda$, λ – статистический параметр Френкеля [3], равный:

$$\lambda = \frac{\sum V_{oi}}{m_0 V_p}, \quad (2)$$

V_p – скорость реакции роста цепи, $\sum V_{oi}$ – суммарная скорость реакций обрыва цепи, m_0 – молекулярная масса мономера; $x = \ln M$, M – молекулярная масса макромолекулы, $\psi(s)$ – искомая функция распределения активных центров полимеризации, $q_w(x)$ – экспериментально полученная кривая ММР. Ядро интегрального уравнения Фредгольма

Шаг 4.1. Перейти в вершину $v_1(e)$. Среди ребер, инцидентных этой вершине выбрать ребро \tilde{e}_1 , образующее с ребром e минимальный угол (угол между ребрами отсчитывается как на рис.1, т.е. против часовой стрелки). Положить $l_1(e) = \tilde{e}_1$.

Шаг 4.2. Перейти в вершину $v_2(e)$. Среди ребер, инцидентных этой вершине выбрать ребро \tilde{e}_2 , образующее с ребром e минимальный угол. Положить $l_1(e) = \tilde{e}_2$.

Для нахождения покрытия полученного плоского графа цепями с упорядоченным охватыванием необходимо загрузить закодированный файл в программу “Eulerian Cover Constructor” [4]. Эта программа позволяет найти покрытие цепями с упорядоченным охватыванием для любого плоского графа без висячих вершин.

Для укладки, представленной на рис. 2 (а), будет найдена последовательность цепей, приведенная на рис. 2(б).

В скобках указаны вершины, из которых начинается построение цепи и в которых оно завершается. Первые три цепи соединяют вершины нечетной степени, четвертая же является эйлеровой цепью суграфа, содержащего все оставшиеся ребра.

Доказательство корректности алгоритма приведено в [2].

Литература

- Мухачева Э.А., Мухачева А.С., Валеева А.Ф., Картак В.М. Методы локального поиска оптимума в задачах ортогонального раскроя и упаковки.: аналитический обзор и перспективы развития. – М.: Приложение к журналу информационные технологии. – 2004. – с. 2–17.
- Panyukova T. Chain sequences with ordered enclosing. – *Journal of Computer and System Sciences International*, 2007, Vol. 46, No.1; 10. – pp. 83–92.
- Panyukova T. Cover with Ordered Enclosing for Flat Graphs. – *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, 2007, No. 28. – p.17–24.
- Панюкова Т.А. Программное обеспечение для построения цепей с упорядоченным охватыванием. – Труды 38-й Региональной молодежной конференции «Проблемы теоретической и прикладной математики». Екатеринбург: УрО РАН, 2008. – С. 360–365.

денной на рис.2(а), который кодируется в виде следующей матрицы

$$A = \left(\begin{array}{c|cccc} \text{№ прямоугольника} & x_{\text{верх}} & y_{\text{верх}} & x_{\text{нижн}} & y_{\text{нижн}} \\ \hline 1 & 0 & 0 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 4 \\ 3 & 3 & 1 & 5 & 4 \\ 4 & 0 & 4 & 4 & 6 \end{array} \right),$$

число строк которой N_A равно количеству прямоугольников.

Заметим, что функции $f_1(e)$ и $f_2(e)$ определяются автоматически с помощью приложения, разработанного для построения покрытий с упорядоченным охватыванием [4]. Поэтому достаточно определить только функции $l_k(e)$, $k=1,2$ и $v_k(e)$, $k=1,2$.

Очевидно, что вершинами графа с учетом кратности будут все вершины прямоугольников и только они. Вертикальные и горизонтальные отрезки, соединяющие пары соседних вершин, являются ребрами графа. Можно уменьшить число ребер, удалив вершины степени два и объединив инцидентные этим вершинам ребра. Однако полученный гомеоморфный граф представляет лишь теоретический интерес.

Алгоритм приведения прямоугольного раскройного плана к кодировке ребер, принятой в [2,3], можно представить следующим образом.

АЛГОРИТМ RECODE

Входные данные: раскройный план, представленный в виде матрицы A .

Выходные данные: представление графа с помощью функций $v_k(e)$, $l_k(e)$, $k=1,2$.

Шаг 1. Найти максимальные значения координат раскройного плана $x_{\max} = \max\{x_{3,i}: i=1, \dots, N_A\}$ и $y_{\max} = \max\{y_{4,j}: j=1, \dots, N_A\}$.

Шаг 2. Для каждого $y_k \in [0, y_{\max}]$ найти все горизонтальные ребра графа. Для этого просмотреть все узлы сетки от $(0, y_k)$ до (x_{\max}, y_k) . Если отрезок $[(x_i, y_k), (x_j, y_k)]$, $i < j$ принадлежит границе хотя бы одного из прямоугольников, то $[(x_i, y_k), (x_j, y_k)]$ является ребром графа. Положить $v_1(e) = (x_i, y_k)$, $v_2(e) = (x_j, y_k)$.

Шаг 3. Для каждого $x_k \in [0, x_{\max}]$ найти все вертикальные ребра графа: просмотреть все узлы сетки от $(x_k, 0)$ до (x_k, y_{\max}) и найти отрезки $[(x_k, y_i), (x_k, y_j)]$, $i < j$, принадлежащие границе хотя бы одного из прямоугольников. Тогда $[(x_k, y_i), (x_k, y_j)]$ является ребром графа. Положить $v_1(e) = (x_k, y_i)$, $v_2(e) = (x_k, y_j)$.

Шаг 4. Для каждого ребра e выполнить следующие действия.

первого рода (1) $K(s, x) = \exp[2(s+x) - \exp(s+x)]$ – представляет собой нормированную функцию Флори [1,3].

В работах [1,4-11] предложен метод расчета распределений активных центров (АЦ) полимеризации по вероятности передачи цепи, основанный на численном решении интегрального уравнения (1) с помощью метода регуляризации А.Н. Тихонова. При этом рассчитываются количество и характеристики типов АЦ, ведущих полимеризацию в исследуемой каталитической системе. К настоящему времени является уже установленным фактом то, что в лантанид-, неодим- и титансодержащих катализаторах наблюдаются от двух до четырех типов АЦ ионно-координационной полимеризации диенов, т.е. $j = \overline{1..4}$ [1]. Дальнейшее разделение расчетных кривых кинетической активности $\psi(s)$ на ряд гауссовых распределений позволило рассчитать кинетические константы скоростей элементарных реакций для каждого из этих АЦ.

Особенность 1. В работах [1,4-11] результаты численного решения обратных задач ММР использованы лишь частично. Дело в том, что при расчетах констант j -го АЦ применены только s_{0j} – местоположение максимума расчетной кривой $\psi_j(\sigma, s_0)$ и соответствующая доля полимерной продукции p_j , производимой этим же активным центром. Другими словами, задача упрощалась до предела и сводилась к рассмотрению лишь j -параметрической задачи, а соответствующая расчетная функция кинетической активности данного j -го типа АЦ предполагалась в виде δ -функции, т.е. $\psi_j(s) \equiv \delta(s - s_0)$. В работах [1,12] было показано, что функцию кинетической активности $\psi_j(s)$ j -го АЦ можно описать δ -функцией только тогда, когда $\sigma < 0,3$. Как правило, для рассмотренных в [1,4-11] образцов полидиенов $\sigma \geq 0,45$. В этих случаях при изучении кинетических характеристик каждого j -го типа АЦ необходимо учесть и ширину функции распределения $\psi_j(\sigma, s_0)$, т.е. величину σ .

Допустим, что расчетные функции $\psi_j(s)$ для j -того АЦ описываются широкой гауссовой функцией распределения молекулярных масс:

$$\psi_j(s) = \frac{1}{\sigma_j \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(s - s_{0j})^2}{2\sigma_j^2}\right), \quad (3)$$

где σ_j – параметр ширины нормального распределения (3), s_{0j} – местоположение максимума функции $\psi_j(s)$.

В данной работе впервые рассмотрено влияние параметра ширины гауссового распределения кинетической активности j -го АЦ на среднечисленную (M_n) и среднемассовую (M_w) характеристики ММР продуктов ионно-координационной полимеризации.

Для j -го типа АЦ полимеризации расчетная кривая ММР описывается в виде:

$$q_{wj}(x) = \int_a^b \frac{1}{\sigma_j \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(s-s_{0j})^2}{2\sigma_j^2}\right] \exp[2(x+s) - \exp(x+s)] ds. \quad (4)$$

В этом случае все усредненные характеристики кривой ММР j -того АЦ полимеризации будут зависеть от параметров ширины σ_j и местоположения максимума s_{0j} . Используя выражение (4) с помощью метода численного интегрирования Симпсона [13] были рассчитаны зависимости $q_{wj}(\sigma_j, x)$ и $q_{wj}(s_{0j}, x)$.

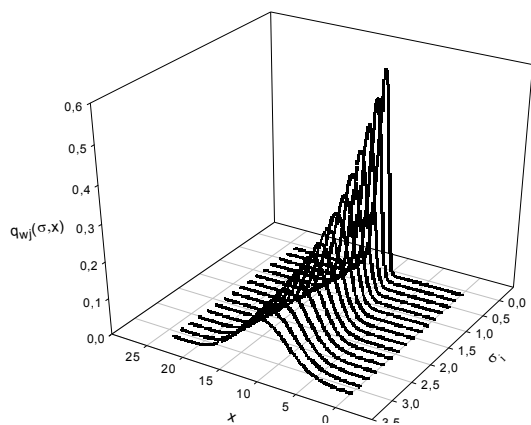


Рис.1. Динамика изменения вида кривых ММР, рассчитанных по выражению (4) в зависимости от параметра ширины σ_j .

На рис.1 показана динамика изменения вида кривой ММР с изменением параметра σ_j . С увеличением параметра σ_j интенсивность функ-

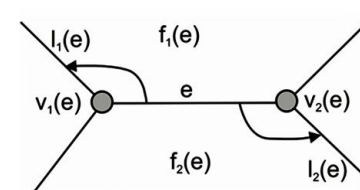


Рис.1. Представление ребер плоского графа

Для реализации алгоритма из работы [3], каждое ребро e графа G , представляющего раскройный план, должно быть закодировано с использованием функций $v_1(e)$, $v_2(e)$, $l_1(e)$, $l_2(e)$ (рис.1).

Функции $v_k(e)$, $k=1,2$ представляют вершины, инцидентные ребру e , $f_k(e)$, $k=1,2$ – грани, которые находятся слева при движении по ребру e от вершины $v_k(e)$ к $v_{3-k}(e)$, и $l_k(e)$, $k=1,2$ – ребра, инцидентные граням $f_k(e)$. Для определения положения прямоугольных деталей на раскройном листе достаточно указать либо координаты двух противоположных углов (например, левого верхнего и правого нижнего), либо координаты одного из углов и размеры прямоугольника. Плоский граф, соответствующий раскройному плану, состоящему только из прямоугольников, содержит только вершины степени 2, 3 или 4.

Рассмотрим алгоритм преобразования раскройного плана в граф и определения функций для каждого ребра на примере укладки, приве-

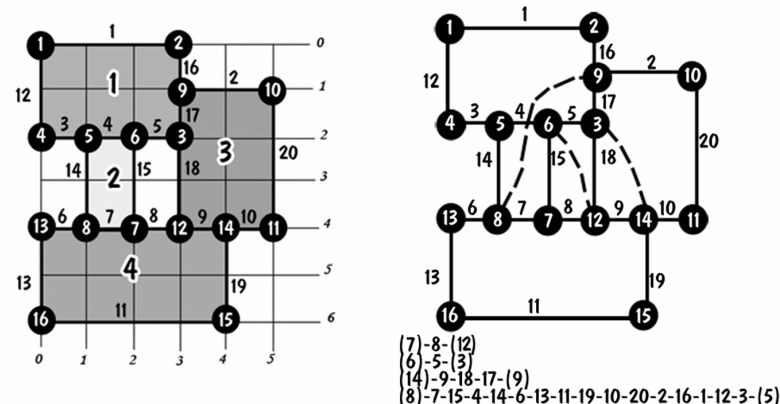


Рис.2. (а) Пример прямоугольной укладки. (б) Пример покрытия раскройного плана, состоящего из прямоугольников, цепями с упорядоченным охватыванием.

ратор мутации. Критериями остановки в эволюционных алгоритмах могут быть различные условия, например, ограничение по числу итераций, достижение оптимума и т.д. Результатом работы считается лучшее найденное решение.

Алгоритм для поиска решения обратной задачи

Допустим, на раскройном листе уложено конечное число прямоугольных деталей, для которых требуется организовать раскрой так, чтобы отрезанная от листа часть не требовала дополнительных разрезов. Формализовать данное ограничение можно с помощью определения последовательности цепей с упорядоченным охватыванием [2].

Моделью раскройного листа будем считать плоскость S , моделью раскройного плана – плоский граф G с внешней гранью f_0 на этой плоскости. Пусть J – часть траектории движения режущего инструмента. Через $\text{Int}(J)$ обозначим объединение всех связных компонент $S \setminus J$, не содержащих внешней грани. Тогда $\text{Int}(J)$ представляет собой отрезанную от листа часть.

Определение 1 [2]. Будем говорить, что цепь $C = v_1 e_1 v_2 e_2 \dots v_k$ в плоском графе G имеет **упорядоченное охватывание**, если для любой его начальной части $C_l = v_1 e_1 v_2 e_2 \dots e_l$, $l \in (E)$ выполнено условие $\text{Int}(C_l) \cap E = \emptyset$.

Определение 2. Будем говорить, что последовательность реберно-непересекающихся цепей

$C^0 = v^0 e_1^0 v_1^0 e_2^0 \dots e_{k_0}^0 v_{k_0}^0$, $C^1 = v^1 e_1^1 v_1^1 e_2^1 \dots e_{k_1}^1 v_{k_1}^1$, ..., $C^{n-1} = v^{n-1} e_1^{n-1} v_1^{n-1} e_2^{n-1} \dots e_{k_{n-1}}^{n-1} v_{k_{n-1}}^{n-1}$ с упорядоченным охватыванием, покрывающая граф G и такая, что

$$(\forall m : m < n) \left(\bigcup_{l=0}^{m-1} \text{Int}(C^l) \right) \cap \left(\bigcup_{l=m}^{n-1} C^l \right) = \emptyset,$$

является покрытием с упорядоченным охватыванием.

Построение покрытия графа G с упорядоченным охватыванием решает поставленную задачу раскроя. Наибольший интерес представляют покрытия с минимальным числом цепей, поскольку переход от одной цепи к другой соответствует холостому проходу режущего инструмента.

Определение 3. Минимальную по мощности последовательность реберно-непересекающихся цепей с упорядоченным охватыванием в плоском графе G будем называть эйлеровым покрытием с упорядоченным охватыванием.

Теорема существования такой последовательности цепей и алгоритм их построения приведены в [3].

ций $q_w(\sigma_j, x)$ уменьшается и она становится шире, причем ее асимметрия постепенно уменьшается. В то же время изменение местоположения максимума s_{0j} не сказывается в виде расчетной кривой $q_{wj}(s_{0j}, x)$ j -того АЦ полимеризации (рис.2). Из рис.2 также видно, что с изменением местоположения максимума расчетной функции $\psi(s_{0j})$ вид кривой $q_w(x)$ не изменяется, происходит только её смещение.

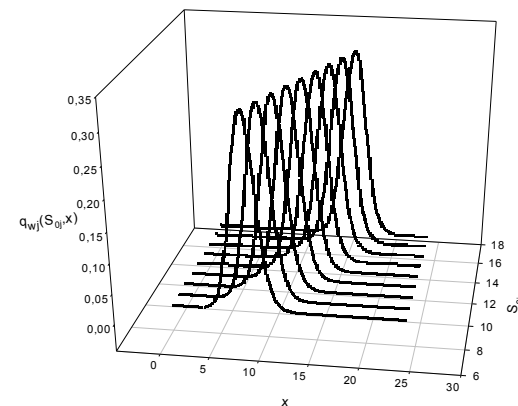


Рис.2. Вид кривых ММР $q_{wj}(s_{0j}, x)$, рассчитанных по выражению (4) при различных значениях параметра s_{0j} .

По этим расчетным кривым $q_{wj}(s_{0j}, x)$ по известной формуле [3,14] определены среднечисленные $M_{nj}(t)$ и среднемассовые $M_{wj}(t)$ значения молекулярных масс:

$$M_{nj} = \frac{\sum_i q_{wj}(x_i)}{\sum_i [\exp(-x_i) \cdot q_{wj}(x_i)]} \quad (5)$$

$$M_{wj} = \frac{\sum_i [\exp(x_i) \cdot q_{wj}(x_i)]}{\sum_i q_{wj}(x_i)} \quad (6)$$

Как видно из рис.3, с увеличением параметра ширины σ_j среднечисленные значения кривой ММР M_{nj} плавно уменьшаются, а характе-

ристика среднемассовых молекулярных масс $M_w(\sigma_j)$, наоборот, возрастает. Более информативной является расчетная зависимость коэффициента полидисперсности $u_j(\sigma_j) = \frac{M_w(\sigma_j)}{M_n(\sigma_j)}$ (рис.3 в).

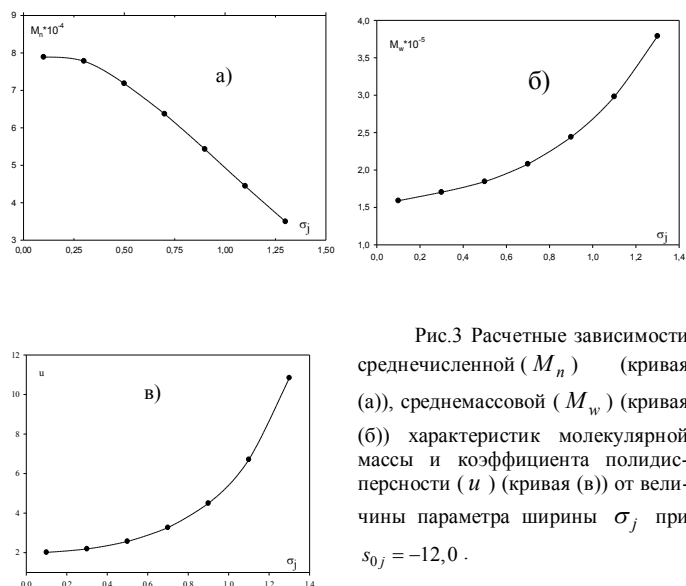


Рис.3 Расчетные зависимости среднечисленной (M_n) (кривая (а)), среднемассовой (M_w) (кривая (б)) характеристик молекулярной массы и коэффициента полидисперсности (u) (кривая (в)) от величины параметра ширины σ_j при $s_0 = -12,0$.

Как видно из этого рисунка зависимость $u_j(\sigma_j)$ с увеличением параметра ширины распределения молекулярных масс σ_j возрастает начиная от 2 (последнее соответствует дельта-функции $\psi_j(s) \equiv \delta(s - s_0)$, уже при $\sigma_j > 0,3$ для описания экспериментальной кривой ММР j -того АЦ полимеризации необходимо использовать интегральное выражение вида (4).

Численное решение обратной задачи ММР

В качестве примера рассмотрим одну из экспериментальных кривых ММР образца полиизопрена (рис.4), синтезированного на каталитической системе $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$ [7,8]. Подготовка каталитического

Следующий подходящий (*Next-Fit, NF*). Первый предмет упаковывается в корзину №1. Каждый последующий предмет упаковывается в ту же корзину, если позволяет её остаточная емкость. В противном случае он упаковывается в новую корзину.

Первый подходящий (*First-Fit, FF*). На каждом шаге текущий предмет помещается в частично заполненную корзину, если позволяет ее остаточная емкость. В противном случае выбирается первый подходящий для корзины предмет. Очевидно, что **FF** всегда находит решение не хуже, чем **NF**. Известны и другие реализации алгоритмов типа подходящий.

Вторая группа, *жадные алгоритмы*, базируется на принципах локальной оптимизации. На каждом алгоритмическом этапе делается локально оптимальный выбор. При этом допускается, что итоговое решение также окажется оптимальным. Выбор, сделанный в жадном алгоритме, может зависеть от сделанных ранее выборов, но он не может зависеть от выборов или решений последующих подзадач.

Применяются различные технологии декодирования упаковок: нижний-левый, блочные декодеры и алгоритмы комбинирования эвристик» Эксперименты показали их высокую эффективность. К метаэвристическим относятся метод муравьиной колонии, методы поиска с запретами, имитации отжига и эволюционные алгоритмы. Эти алгоритмы не гарантируют получения оптимального решения, но, тем не менее, исследования доказывают их высокую эффективность. Приведем примеры некоторых из эволюционных алгоритмов.

Идея *генетического* алгоритма по аналогии с живой природой состоит в организации эволюционного процесса, целью которого является получение оптимального решения. Базовыми понятиями алгоритма являются *ген, хромосома, популяция*. Операции производятся не над одной хромосомой, а над целым набором хромосом. Этот набор называется *популяцией*. Направленный перебор решений осуществляется с помощью генетических операторов *кроссовера, мутации, селекции*.

На каждом шаге эволюции с помощью оператора *селекции* выбираются два решения (родители). Оператор *скрещивания (кроссовер)* строит новое решение, которое добавляется в популяцию, а решение с худшей оценкой удаляется из нее. Если оценка меняется мало или по истечении заданного количества итераций, текущее решение подвергается небольшим случайным изменениям, *мутации*. Наиболее простым среди эволюционных алгоритмов является алгоритм (1+1)-ЕА, известный так же, как (1+1)-эволюционная стратегия. Популяция данного алгоритма состоит из одной особи. Начальный генотип генерируется случайным образом. На каждой итерации t к текущему генотипу применяется опе-

ной упаковки определяют ход режущего инструмента, разделяющего упаковку на исходные заготовки.

Краткий обзор моделей и методов решения прямой задачи

Остановимся на задаче 2DRPP. Для проектирования упаковки нужно определить способы кодирования схемы упаковки (представление допустимого решения) и применить алгоритм декодирования (получение упаковки из закодированного решения). Такая упаковка будет допустимой. В ее окрестности находят оптимальную или близкую к ней. С этой целью применяются различные метаэвристики.

Прямая схема кодирования. Зададим положение каждого прямоугольника P_i , $i=1\dots m$, вектором (x_i, y_i) с минимальными координатами. Если прямая схема кодирования обеспечивает неперекрывание прямоугольников, то восстановить упаковку по этой схеме не составляет труда. Поэтому разрабатываются схемы кодирования, снабженные декодерами – алгоритмами перехода от заданной схемы к прямой.

Кодирование перестановкой прямоугольников. Список $\pi = \{1(\pi), 2(\pi), \dots, i(\pi), \dots, m(\pi)\}$, $i(\pi)$ – номер прямоугольника, занимающего в π позицию i , – представляет наиболее популярную схему кодирования. С помощью того или иного алгоритма размещения (декодера) вычисляют координаты (x_i, y_i) прямоугольника P_i и строят эскиз упаковки. Ее длина зависит от перестановки π и от используемого декодера. Каждому списку π (в отличие от прямой схемы) соответствует несколько различных упаковок.

Задачи раскрой-упаковки являются типичными представителями NP-трудных проблем и для их решения применяются общие подходы: точные методы; простые эвристики и метаэвристики. Ввиду неполиномиальной сложности точных алгоритмов, уделяется значительное внимание приближенным методам. Среди них различают методы типа *подходящий* и *жадные* алгоритмы. Они могут быть и декодерами.

Алгоритмы типа *подходящий*. Выделяются два основных класса алгоритмов. Они определяются порядком упаковки предметов в корзины. *Он-лайн* алгоритмы рассматривают предметы в заданном порядке и упаковывают их в корзину с помощью некой стратегии. *Офф-лайн* алгоритмы вначале упорядочивают предметы. Для *офф-лайн* алгоритмов важно, чтобы задачи были статическими, *он-лайн* алгоритмы могут применяться, когда предметы динамически прибывают на место упаковки или имеют случайные веса (длины). Как правило, в обоих классах используются следующие основные стратегии выбора.

комплекса и методика проведения ГПХ измерений образца полиизопрена представлены в [10].

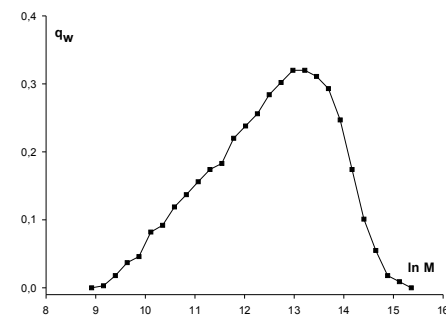


Рис.4. Экспериментальная кривая ММР полиизопрена $q_w(\ln M)$, полученного на титан-содержащих катализаторах при $t = 60$ мин

Результат численного решения обратной задачи ММР (1) – функция распределения АЦ полимеризации $\psi(s)$ представлена на рис. 5. Минимум функционала Тихонова достигался при оптимальном параметре регуляризации α , равным 0,0016, при этом невязка составила 0,00019. Как видно из рис. 5, расчетная функция распределения $\psi(s)$ имеет два четко выраженных максимума.

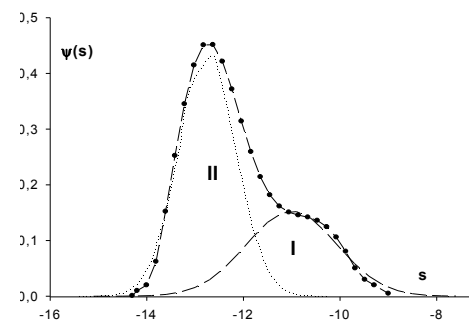


Рис.5. Функция распределения активных центров полимеризации $\psi(s)$ образца ПИ, рассчитанная из экспериментальной зависимости $q_w(x)$, представленной на рис.4.

Проблема рационального использования промышленных материалов: оптимизация обратного хода раскроя

Мухачева Э.А., Панокова Т.А.

Уфимский государственный авиационный технический университет, elitamuh@mail.ru,
Южно-Уральский государственный университет, kwark@mail.ru

Аннотация

Принято рассматривать задачи раскроя-упаковки в двух постановках: «оптимальное размещение деталей заданной формы и заданных размеров» и «оптимальный ход режущего инструмента при заданном размещении деталей на плоскости». Как правило, эти задачи не связывают друг с другом. Однако физически вторую задачу можно назвать обратной к первой. В таком ракурсе и рассматривается нами пара задач. При этом большее внимание уделено обратной. Что касается первой, то здесь мы ограничимся небольшим обзором с характеристикой подходов для ее решения.

Введение

В качестве основной принято рассматривать следующую задачу упаковки (Packing Problem (PP)): имеются малые элементы, их необходимо разместить без взаимного перекрытия внутри больших объектов так, чтобы заданная целевая функция достигла минимума (максимума). В категории «задач раскроя и упаковки» содержится множество прикладных проблем, которые изучаются с давних пор. Большая часть таких задач являются NP-трудными комбинаторными проблемами, и для них не существует точных методов решения полиномиальной сложности. Одним из важнейших факторов классификации является способ разделения малых элементов, расположенных внутри объектов. Различаются задачи *гильотинной* и *негильотинной* упаковки (2 Dimensional Rectangular Packing Problem (2DRPP)).

Некоторые подходы к решению задачи прямоугольной упаковки рассматриваются в следующем разделе [1]. Далее, в разделе 2 для задан-

Предположим, что отклонения статистического параметра полимеризации λ в расчетных распределениях АЦ от значения λ_{max} носят статистический характер, тогда полученные распределения можно разбить на отдельные "гауссовы" функции (рис.5). Площади под каждой гауссовой кривой характеризуют соответствующие доли мономера, израсходованного на каждом типе АЦ ($S_1 = 0,36$ и $S_2 = 0,64$, причем $S_1 + S_2 = 1$). Таким образом, у образцов ПИ, синтезированных на титансодержащих катализаторах, обнаружены два типа АЦ (рис. 5).

Расчетную кривую ММР для этого предельного случая q_w сумм (x) вычисляли по формуле:

$$q_w \text{ сумм} (x) = b_1 \lambda_1^2 \cdot \exp(2x - \lambda_1 e^x) + b_2 \lambda_2^2 \cdot \exp(2x - \lambda_2 e^x), \quad (7)$$

где $b_1 = S_1 = 0,36$ и $b_2 = S_2 = 0,64$, статистические параметры Френкеля λ_1 и λ_2 - рассчитаны по формулам $\lambda_j = \exp s_{0j}$. Выражение (7), как видно из рис.6, описывало экспериментальную кривую ММР образца ПИ с точностью до 9,1%.

Как было показано выше, даже в случае одного активного центра ионно-координационной полимеризации параметр полидисперсности u может быть больше 2. Все зависит от значения параметра ширины σ_j . Поэтому при математической обработке экспериментальных кривых ММР продуктов ионно-координационной полимеризации наряду с наложением нескольких типов АЦ необходимо учесть распределение АЦ в области действия конкретного активного центра полимеризации.

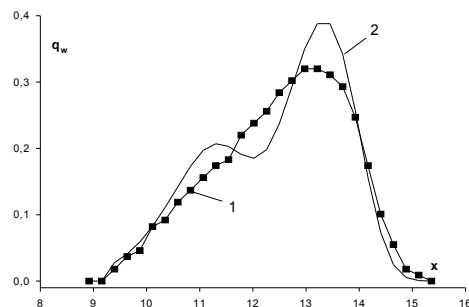


Рис.6. Сравнительное сопоставление экспериментальной кривой ММР для образца ПИ (кривая 1) и расчетной q_w сумм (x) (кривая 2), полученная по формуле (7).

при $\varepsilon = 0.005$

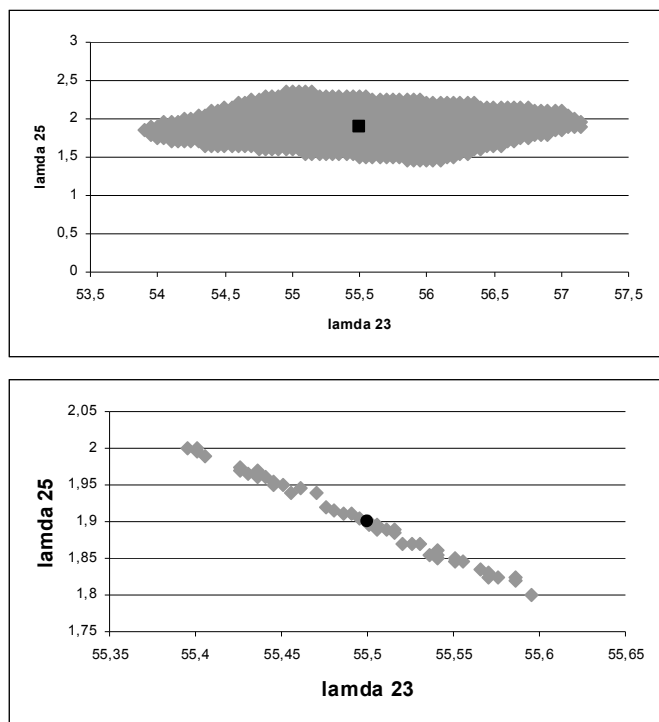


Рис 5. Область неопределенности при $\varepsilon = 0.005$

Литература

- Вентцель Е.С. Исследование операций Задачи, принципы, методология – Москва, высшая школа 2001.
 Абдюшева С.Р., Спивак С.И. Система управления и информационные. Технологии (в печати).
 Канторович Л.В. Сибирский математический журнал, 1962. – Т.3. – №5. – С.701-709.

Учет параметра ширины молекулярных масс σ_j для каждого АЦ приводит к более точному описанию экспериментальной кривой в расчете соответствующей кривой ММР. Кривые $q_{w1}(x_i)$ и $q_{w2}(x_i)$, рассчитанные по формуле (4) для каждого активного центра полимеризации образца ПИ, представлены на рис.7. Суммарная кривая $q_{w\text{сумм}}(x_i) = b_1q_{w1}(x_i) + b_2q_{w2}(x_i)$ описывает экспериментальную гелхроматограмму образца ПИ уже с точностью до 3,7%.

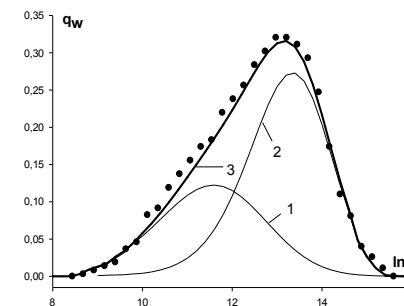


Рис.7. Сравнительное сопоставление экспериментальной кривой ММР для образца ПИ и расчетной $q_{w\text{сумм}}(x)$ (кривая 3). Точками обозначена экспериментальная кривая ММР $q_w(x)$, кривая 1 - $q_{w1}(x)$, кривая 2 - $q_{w2}(x)$.

Особенность 2. Чтобы уменьшить ошибку расчета значений $M_{n\text{эксн.}}$ до погрешности эксперимента, нами в [7,6,9] использовано условие максимума расчетной функции распределения АЦ $\psi_j(s)$ (рис.5), для которого справедливо соотношение:

$$\ln M_{\text{max}j} + s_{0j} = \ln 2, \quad (8)$$

где $M_{\text{max}j}$ - молекулярная масса, на которой приходится максимум j -го АЦ, $s_{0j} = \ln \lambda_j$ - местоположение этого j -го максимума на расчетной кривой. Когда в выражении (1) функция распределения кинетической активности представлена в виде δ -функции, т.е. $\psi_j(s) \equiv \delta(s - s_{0j})$, экспериментальные значения среднечисленной характеристики ММР $M_{n\text{эксн.}}$ для j -того типа АЦ определяются по место-

положению максимума функции кинетической активности s_{0j} , т.е. по формуле [3]:

$$M_{nj} = \frac{1}{\lambda_j} = \frac{1}{\exp s_{0j}}. \quad (9)$$

Тогда расчетные значения среднечисленных молекулярных характеристик (M_n), полученные по формуле:

$$M_{n\text{ сумм}} = \sum_{j=1}^m p_j M_{nj}, \quad (10)$$

получаются несколько больше, чем соответствующие экспериментальные значения $M_{n\text{ эксп}}$ на 9,7%.

Для анализируемой экспериментальной кривой ММР образца ПИ, представленной на рис.5, среднечисленные характеристики $M_{n\text{ сумм}}$ и $M_{n\text{ эксп}}$, рассчитанные по выражениям (4) и (5) совпадают в пределах ошибки 0,6%, а среднемассовые характеристики $M_{w\text{ сумм}}$ и $M_{w\text{ эксп}}$, рассчитанные по выражению (4) и (6) в пределах 0,4% (табл. 1).

Таблица 1

Характеристики образца полиизопрена, синтезированного на каталитической системе $\text{TiCl}_4\text{-Al}(i\text{-C}_4\text{H}_9)_3$ при времени реакции $t=20$ мин.

	1-ый АЦ	2-ой АЦ	образец ПИ	
			Экспер.	Расчет
M_{nj}	56280	300800	117462	116664
M_{wj}	199680	737697	539090	540781
u_j	3,55	2,45	4,59	4,63
b_j	0,36	0,64	1,0	
$x_{\text{макс}}$	11,7	13,44	13,21	13,2
$q_{w\text{макс}}$	0,122	0,273	0,320	0,316
s_{0j}	-11,01	-12,75	–	–
σ_j	0,97	0,59	–	–
p_j	0,75	0,25	1,0	

при $\varepsilon = 0.01$

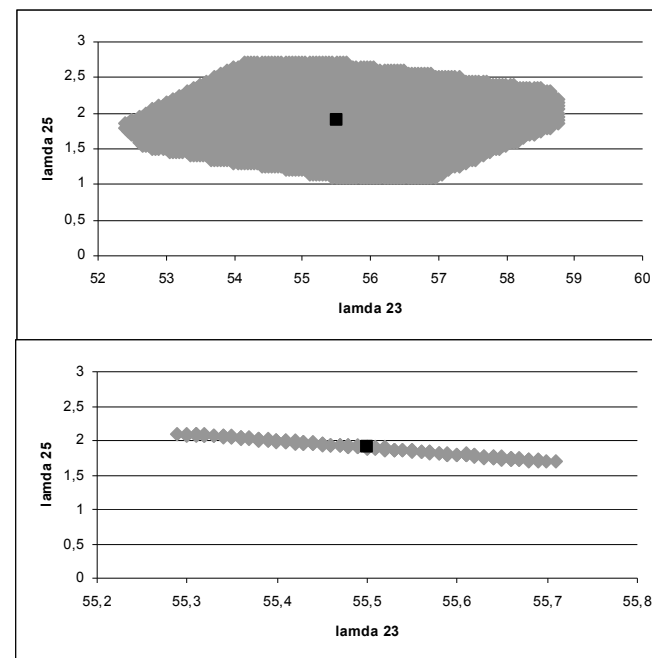


Рис 4. Область неопределенности при $\varepsilon = 0.01$.

при $\varepsilon = 0.015$

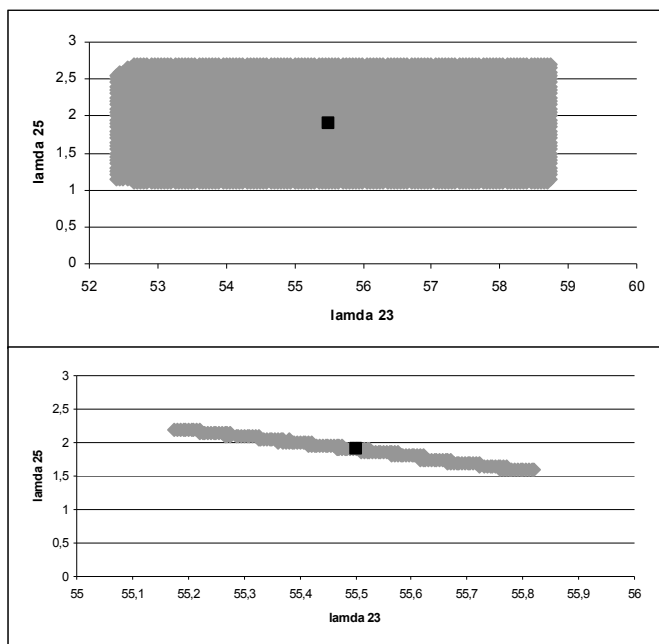


Рис 3. Область неопределенности при $\varepsilon = 0.015$

Особенность 3. Обратную задачу ММР, в принципе, можно решать через численную функцию $q_n(M)$ или через массовую функцию $q_w(M)$ распределений макромолекул. В физико-химии полимеров для расчетных моделей, как правило, используется функция $q_n(M)$. В частности, при наложении двух или более типов АЦ ионно-координационной полимеризации суммарная численная функция распределения $q_{n\text{сумм}}(M)$ рассматривается как линейная суперпозиция распределений макромолекул, производимых отдельными типами АЦ [1]:

$$q_{n\text{сумм}}(M) = p_1 q_{n1}(M) + p_2 q_{n2}(M), \quad (11)$$

В общем случае:

$$q_{n\text{сумм}}(M) = \sum_{j=1}^m p_j q_{nj}(M), \quad (12)$$

где p_j - статистический множитель, определяющий долю полимерных молекул, образованных на j -том типе АЦ.

Однако функция распределения $q_n(M)$ непосредственно из эксперимента не определяется. Исходя из основного уравнения ГПХ [15]:

$$F(V)dV = q_w(\ln M)d(\ln M), \quad (13)$$

измеряется массовая функция распределения $q_w(M)$.

Уравнение (13) связывает элюэнтный объем выхода V с логарифмом молекулярной массы $(\ln M)$ полимеризата. Используя калибровочную зависимость ГПХ:

$$\ln M = C_1 - C_2 V, \quad (14)$$

где C_1 и C_2 - константы, экспериментальные гель-хроматограммы были скорректированы на приборное уширение [16].

Учитывая известную взаимосвязь между функциями распределения $q_n(M)$ и $q_w(M)$ [3]:

$$q_w(M) = \frac{M}{M_n} q_n(M), \quad (15)$$

можно получить линейную суперпозицию и для массовой функции распределения макромолекул:

$$q_{w\text{сумм}}(M) = b_1 q_{w1}(M) + b_2 q_{w2}(M), \quad (16)$$

или в общем случае:

$$q_{w\text{сумм}}(M) = \sum_{j=1}^m b_j q_{wj}(M) \quad (17)$$

$$\text{где } b_1 = p_1 \cdot \frac{M_{n1}}{M_n}, \quad b_2 = p_2 \cdot \frac{M_{n2}}{M_n} \quad \text{или} \quad b_j = p_j \cdot \frac{M_{nj}}{M_n},$$

M_n - среднечисленная молекулярная масса всего продукта (полиизопрена) полимеризации, M_{nj} - среднечисленная молекулярная масса макромолекул, синтезированных j -тым типом АЦ, причем $b_1 + b_2 = 1$

$$\text{или } \sum_{j=1}^m b_j = 1.$$

В случае рассмотренного выше полимеризата ПИ с двумя типами АЦ имеет место:

$$p_1 = \frac{M_{n2} - M_n}{M_{n2} - M_{n1}}, \quad (18)$$

$$p_2 = \frac{M_n - M_{n1}}{M_{n2} - M_{n1}} \quad (19)$$

где $p_1 + p_2 = 1$.

Среднечисленные и среднемассовые значения распределения макромолекул j -го типа АЦ M_{nj} и M_{wj} и суммарные величины $M_{n\text{сумм}}$ и $M_{w\text{сумм}}$ всего продукта полимеризации определяются по формулам (5) и (6) через экспериментальную гель-хроматограмму $q_{w\text{экт}}(M)$, представленную на рис.4.

Выводы

В данной работе впервые изучено влияние параметра ширины спектра молекулярных масс макромолекул, производимых отдельным активным центром ионно-координационной полимеризации, на среднечисленную и среднемассовую характеристики полимерного материала. Проведен анализ экспериментальной кривой ММР полиизопрена, синтезированного на титансодержащих катализаторах. Учет параметра ширины σ_j молекулярных масс макромолекул, производимых j -тым типом АЦ ионно-координационной полимеризации, приводит к более точному расчету среднечисленной (M_{nj}) и среднемассовой (M_{wj}) характеристик ММР полученных полимерных материалов. Причем величина коэффициента полидисперсности зависит не только от числа активных центров, но и от ширины распределения расчетной функции кинетической актив-

при $\varepsilon = 0.02$

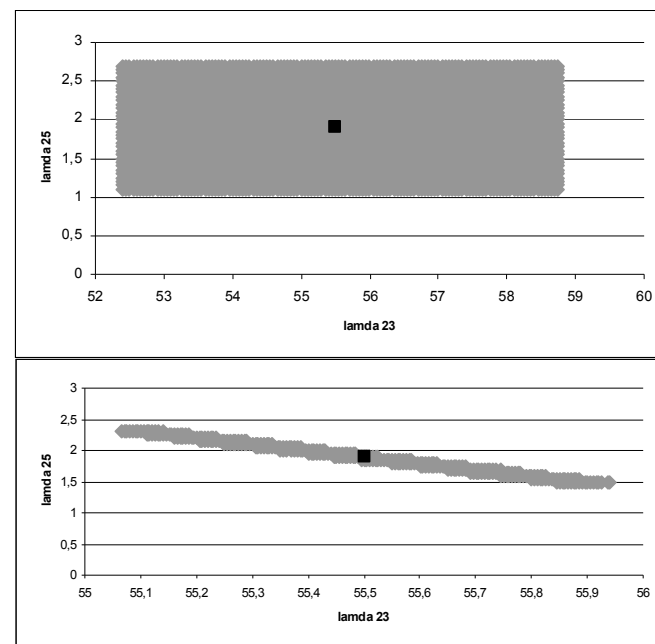


Рис 2. Область неопределенности при $\varepsilon = 0.02$

ния системы в том или ином состоянии при средних значениях интенсивностей: $\lambda_{12} = 211,7$, $\lambda_{21} = 141,5$, $\lambda_{23} = 55,5$, $\lambda_{25} = 1,9$, $\lambda_{34} = 1,6$, $\lambda_{35} = 9$, $\lambda_{45} = 1,9$, которые были найдены на основе статистической информации.

Определим область неопределенности по интенсивностям λ_{ij} как решение системы неравенств [3]:

$$|p_i^{cm} - p_i^p| \leq \varepsilon_i, \quad (i = \overline{1, n}) \quad (4)$$

где p_i^{cm} - табличные данные по вероятностям заболеваний туберкулезом; p_i^p - вероятности, рассчитанные по системе (1).

В результате вычислений получили интервалы изменения интенсивностей.

λ_{12}	λ_{21}	λ_{23}	λ_{25}	λ_{34}	λ_{35}	λ_{45}
Начальное приближение						
211,7	141,5	55,5	1,9	1,6	9	1,9
Интервалы изменения						
(195,5;231,5)	(126,5; 156,3)	(52,4;58,8)	(1,1;2,7)	(1,5;1,7)	(8,7;9,1)	(1,6;2,3)

Рассмотрим интенсивности переходов λ_{23} , переход из состояния A_2 – «болен туберкулезом» в состояние A_3 – «диагноз активного туберкулеза», и λ_{25} , переход из A_2 в A_5 – «смерть». При различных значениях ε построим область неопределенности по этим константам удовлетворяющая неравенству (4) и (5):

$$|p_i^{cm} - p_i^p| \leq \varepsilon \cdot p_i^{cm} \quad (5)$$

В результате получим следующие графики:

ности $\psi_j(\sigma, s_0)$, соответствующей j -тому типу АЦ ионно-координационной полимеризации.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ №08-01-97028-р_поволжье_a.

Литература

1. Усманов Т.С., Спивак С.И., Усманов С.М. Обратные задачи формирования молекулярно-массовых распределений. – М.: Химия, 2004. – 252 с.
2. Монаков Ю.Б., Тостиков Г.А. Каталитическая полимеризация 1,3-диенов. – М.:Наука, 1990. – 211 с.
3. Френкель С.Я. Введение в статистическую теорию полимеризации. – М.: Наука, 1965. – 267 с.
4. Сигаева Н.Н., Усманов Т.С., Широкова Е.А., Будтов В.П., Спивак С.И., Монаков Ю.Б. // Докл. РАН – 1999. – Т. 365, №2 – С. 221-224.
5. Усманов Т.С., Гатауллин И.К., Усманов С.М., Спивак С.И., Монаков Ю.Б. // Докл. РАН.-2002. –Т.385, №3. –С.368-371.
6. Усманов Т.С., Максютובה Э.Р., Гатауллин И.К., Спивак С.И., Усманов С.М., Монаков Ю.Б. //Высокомолек. соед. Серия А.-2003.-Т.45, №2.-с. 181-187.
7. Усманов А.С., Спивак С.И., Насыров И.Ш., Усманов С.М. // Системы управления и информационные технологии. – 2004. – №4 (16). – С. 34-38.
8. Усманов А.С., Исмаилов Р.Р., Усманов Т.С., Спивак С.И., Усманов С.М. //Башкирский химический журнал. – 2005. – Т.12, №2. - С.67-74.
9. Usmanov S.M., Usmanov T.S., Yagola A.G., Monakov Yu.B. Determination of catalyst active sites distributions in ionic polymerization. //Inverse Problems in Science and Engineering. - 2005.-V.13, №2. - P. 101-107.
10. Усманов Т.С., Сайтова С.С., Ионова И.А., Глухов Е.А., Гареев А.Р., Баженов Ю.П., Насыров И.Ш., Монаков Ю.Б.//Высокомолек. соед. Серия Б.- 2005.-Т. 46, №1. - С.110-115.
11. Усманов Т.С., Усманов А.С., Усманов С.М., Ягола А.Г. //Вычисл. методы и программирование. - 2006. - Том 7. - С.294-299.
12. Набиуллин А.Р. Применение методов Монте-Карло и регуляризации Тихонова для моделирования начальной стадии радикальной полимеризации. //Автореферат дисс. на соискание уч. ст. кандидата ф.-м. наук.– Уфа: ИФМиК УНЦ РАН, 2000.–22 с.
13. Самарский А.А. Введение в численные методы. – М.: Наука, 1987. – 288 с.
14. Usmanov S.M., Zaikov G.E. Numerical methods of solving ill-posed problems of dielectric spectrometry. New York.: Nova Science Publisher, Inc, 2002. - 156 p.
15. Бельский Б.Г., Виленчик Л.З., Хроматография полимеров. – М.: Химия, 1978. – 334 с.
16. Усманов Т.С., Набиуллин А.Р., Сигаева Н.Н., Будтов В.П., Усманов С.М., Спивак С.И., Монаков Ю.Б. //Журнал прикладной химии. - 2001. - Т.74. - №7. - С.1162-1165.

Некорректная задача определения спектра энергий образования флуктуационных микропустот

Шакирьянов Э.Д., Усманов С.М.

БирГСПА, Бирск, eddydan@rambler.ru

Аннотация

В настоящей работе ставится и решается задача по нахождению спектра энергий образования флуктуационных микропустот из экспериментальной конверсионной зависимости константы скорости роста при полимеризации 1,6 ди-(метакрилоилокси)гексаметилен (МГ). Нахождение спектра сводится к решению интегрального уравнения Фредгольма I рода методом регуляризации Тихонова. Анализ полученных результатов согласуется с микрогетерогенной моделью радикально-иницированной трехмерной полимеризации и позволяет оценить доли флуктуационного объема приходящиеся на полимеризат.

Введение

Задача синтеза полимерных материалов олигоэфиракрилатов (ОЭА) с заранее известными прочностными свойствами и по сей день является весьма актуальной. Для решения такой проблемы необходимо выбрать оптимальный режим полимеризации ОЭА с контролируемой глубиной превращения, что требует глубоких знаний кинетики трехмерной свободно-радикальной полимеризации ОЭА.

Процесс свободно-радикальной полимеризации протекает по классическому механизму радикальной полимеризации [1], включающий в себя реакции инициирования, роста, обрыва и передачи цепи. Для описания кинетики полимеризации ОЭА используют одну из кинетических моделей: механическую, вязкостную или модель свободного объема. При этом необходимо отметить, что протекание процесса полимеризации сопровождается изменением «физического» состояния реакционной массы от жидкого до стеклообразного. Это в свою очередь влечет за собой уменьшение констант скоростей элементарных реакций. Следует заранее определить, что речь идет не об истинных значениях константы скорости роста цепи, во многом зависящей от химической природы, а об

статистической информации.

В любой момент времени индивид может находиться в любом из перечисленных состояний. Необходимо оценить вероятность его нахождения в том или ином состоянии.

Для процесса заболевания туберкулезом рассмотрим пять состояний системы: A_1 – «здоров», A_2 – «болен туберкулезом», A_3 – «диагноз активного туберкулеза», A_4 – «инвалиды в связи с туберкулезом», A_5 – «смерть», где λ_{ij} – интенсивности переходов из одного состояния в другое. Соответствующая схема представлена на рис.1.

Для нахождения вероятностей присутствия индивида в том или ином состоянии составим уравнения Колмогорова. Для схемы, представленной на Рисунке 1, система дифференциальных уравнений имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dp_1(t)}{dt} = -\lambda_{12}p_1(t) + \lambda_{21}p_2(t) \\ \frac{dp_2(t)}{dt} = \lambda_{12}p_1(t) - (\lambda_{21} + \lambda_{23} + \lambda_{25})p_2(t) \\ \frac{dp_3(t)}{dt} = \lambda_{23}p_2(t) - (\lambda_{34} + \lambda_{35})p_3(t) \\ \frac{dp_4(t)}{dt} = \lambda_{34}p_3(t) - \lambda_{45}p_4(t) \\ \frac{dp_5(t)}{dt} = \lambda_{25}p_2(t) + \lambda_{35}p_3(t) + \lambda_{45}p_4(t) \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $p_i(t)$ ($i = \overline{1,5}$) – вероятность состояния A_i .

При задании начальных условий предполагается, что первоначально система находится в состоянии «здоров». Таким образом, эти условия имеют следующий вид

$$p_1(0) = 1, p_2(0) = 0, p_3(0) = 0, p_4(0) = 0, p_5(0) = 0 \quad (2)$$

Кроме того, для любого момента времени t выполняется нормировочное условие

$$p_1(t) + p_2(t) + p_3(t) + p_4(t) + p_5(t) = 1 \quad (3)$$

Когда интенсивности переходов известны, случай сводится к прямой задаче – решению уравнений Колмогорова. Но если интенсивности переходов неизвестны, возникает обратная задача, то есть задача оценивания интенсивностей переходов по статистическим данным.

Для прямой и обратной задачи разработана программа в среде Фортран. Методом Кутты—Мерсона рассчитываются вероятности нахождения

Математическое моделирование процесса заболевания туберкулезом

Спивак С.И., Райманова Г.К.

Башкирский Государственный Университет, Gulli_RGK@mail.ru

Аннотация

Рассматривается процесс заболевания туберкулезом как процесс многих состояний. При математическом моделировании используется Марковский процесс.

Введение

Широкое применение получил подход, позволяющий применять теорию марковских процессов для моделирования ситуации как поведение системы со многими состояниями [1]. Рассмотрим процесс заболевания туберкулезом, как модель многих состояний, которая используется для описания состояния застрахованного лица.

При математическом моделировании на основе Марковских процессов возникают две взаимно противоположные задачи. Прямая задача состоит в расчете вероятностей соответствующих состояний при известных параметрах модели. Обратная задача состоит в определении параметров модели на основе известных из эксперимента результирующих характеристик процесса [2].

В страховых моделях исходные параметры – это интенсивности перехода из состояния в состояние. Они могут быть найдены на основе

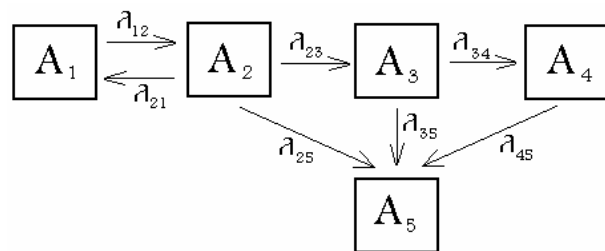


Рис.1 Граф состояний.

эффективной константе скорости роста цепи, зависящей от физического состояния реакционной среды, определяющей молекулярную подвижность свободного радикала и двойной связи. [2]. Учитывая, что при высоких степенях превращения на особенности полимеризационного процесса сказывается влияние диффузионного контроля, для описания кинетики полимеризации ОЭА наиболее приемлемо использование модели свободного объема.

Резкое падение скорости полимеризации с увеличением конверсии объясняется низкой молекулярной подвижностью в реакционной зоне, связанной с отсутствием достаточного свободного объема. В то же время, информация о количественных параметрах свободного флуктуационного объема позволяет судить о прочностных характеристиках продукта полимеризации. Тем не менее проблема определения флуктуационного свободного объема в мономер-полимерной системе в ходе процесса полимеризации изучена недостаточно.

В данной работе решается задача отыскания спектра энергий образования флуктуационных микропустот из конверсионной зависимости константы скорости реакции роста полимерной цепи.

Объект исследования

В качестве объекта исследования ОЭА был выбран полимер – 1,6 ди-(метакрилоилокси) гексаметилен. Структурная формула МГ представлена следующим образом:

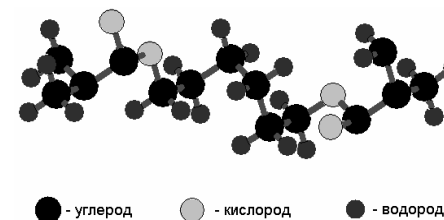
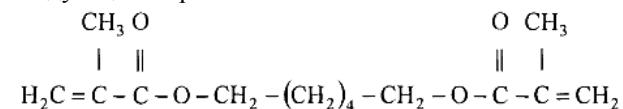


Рис 1. Оптимизированная структура молекулы МГ.

В работе был рассмотрен процесс полимеризации МГ при постоянной температуре 298 К [3]. Физико-химические свойства мономера и полимера МГ приведены в таблице [2].

Образец	T_g , К	$(\alpha_l - \alpha_g) \cdot 10^{-4}$, град ⁻¹	Плотность, г/см ³	М, г/моль
Мономер МГ	240	5	0,995	254
Полимер МГ	430	3,7	1,148	–

Основные положения дырочной модели Френкеля свободного объема

Среди ряда моделей для описания свободного объема наибольшее распространение получила дырочно-активационная модель Френкеля. Дырочная модель основана на предположении о квазикристаллической структуре жидкости. Число ячеек, на которые подразделяют объем жидкости, больше числа частиц, так что именуются ячейки, занятые молекулами, и пустые (дырки), причем каждая ячейка занята не более чем одной молекулой [4].

Если объем каждой микропустоты обозначить через v_h , а число микропустот – через N_h , то увеличение объема тела при плавлении равняется сумме объемов возникающих новых микропустот (флуктуационному свободному объему):

$$V_f = V - V_0 = N_h \cdot v_h, \quad (1)$$

где V_f – свободный объем, V – общий объем, V_0 – объем тела в отсутствие флуктуационных микропустот. Здесь под v_h Френкель понимает минимальный объем дырки, который должен быть одного порядка с объемом частицы $v = V/N$. Обозначим через ε_h энергию образования минимальной дырки. Данная энергия необходима для совершения работы, направленной против сил давления молекулярного притяжения. Среднее значение энергии образования микропустот для широкого ряда веществ, согласно литературным данным, находится в пределах 10-18 кДж/моль [5]. Согласно Френкелю, число дырок N_h должно составлять лишь небольшую долю от общего числа молекул N :

$$N_h = N \exp(-\varepsilon_h / kT). \quad (2)$$

Секция 3. Обратные задачи математической физики и спектральной теории дифференциальных уравнений

Следовательно для свободного объема жидкости получаем выражение:

$$V - V_0 = v_h N \exp(-\varepsilon_h / kT). \quad (3)$$

В случае если жидкость находится под давлением P , то энергия образования дырки равна $\varepsilon_h + v_h P$, так как против внешнего давления совершается дополнительная работа $v_h P$. Тогда окончательное уравнение состояния жидкости по Френкелю [4] записывается в виде

$$V - V_0 = N v_h \exp\left(-\frac{\varepsilon_h + v_h P}{kT}\right). \quad (4)$$

Иногда более удобно использовать такую характеристику как доля флуктуационного свободного объема, которая определяется как отношение свободного объема к общему объему системы:

$$f = \frac{V - V_0}{V} = \frac{V_f}{V}. \quad (5)$$

Её можно представить как функцию температуры и давления

$$f \cong \exp\left(-\frac{\varepsilon_h + v_h P}{kT}\right). \quad (6)$$

Исходя из уравнения состояния жидкости по Френкелю (4), при обычных условиях ($P \cong 1 \text{ атм}$) максимальное внутреннее давление у стеклообразных систем, против которого совершается работа образования дырки $\varepsilon_h = v_h P_m$, составляет $P_m \cong 10^4 \div 10^5$, что значительно превышает внешнее давление $P_m \gg P$. Поэтому в равенстве (6) можно пренебречь вторым слагаемым $\varepsilon_h = v_h P_m \gg v_h P$. Следовательно получаем:

$$f \cong \exp\left(-\frac{\varepsilon_h}{kT}\right). \quad (7)$$

Кинетическая модель, основанная на теории свободного объема

Как уже было отмечено, процесс свободно-радикальной полимеризации протекает по механизму классической радикальной полимеризации, включающему в себя реакции инициирования, роста, обрыва и передачи цепи.

В соответствии с Бубаком [6] для роста полимерной цепи допускаются непрерывные процессы реакции диффузии и химической реакции:

$$\frac{1}{k_p} = \frac{1}{k_{pR}} + \frac{1}{k_{pD}}, \quad (8),$$

где k_p – общая доля коэффициента роста, k_{pR} – химический вклад и k_{pD} – диффузионный вклад, который согласно Хэмилеку [7] зависит от свободного объема системы и, следовательно, от степени конверсии, но не от молярной массы полимера

$$k_{pD} = k_{pD}^0 \cdot \exp \left[-v_p^* \cdot \left(\frac{1}{f} - \frac{1}{f^0} \right) \right], \quad (9)$$

где f – доля свободного объема системы и f^0 – доля свободного объема при нулевой конверсии или же доля свободного объема, приходящаяся на мономер, k_{pD}^0 и v_p^* – регулируемые модельные параметры.

Химическое вклад k_{pR} неизвестен, но может быть вычислен из условия нулевой конверсии, из которого следует $k_p = k_p^0$ и $f = f^0$, откуда $k_{pD} = k_{pD}^0$ и, следовательно,

$$\frac{1}{k_{pR}} = \frac{1}{k_p^0} - \frac{1}{k_{pD}^0}. \quad (10)$$

Соответственно, для константы скорости роста получаем:

$$k_p = \frac{1}{\frac{1}{k_p^0} - \frac{1}{k_{pD}^0} + \frac{\exp(v_p^* \cdot (\frac{1}{f} - \frac{1}{f^0}))}{k_{pD}^0}}. \quad (11)$$

В свою очередь, Хэмилек в своих расчетах опирается на работу Буэче [16], связывая коэффициент диффузии со свободным объемом системы. Описывая взаимосвязь вязкости и температуры стеклования в растворах полимеров, Буэче развивает теорию вязкоупругих свойств, используя концепцию свободного объема, основанную на эмпирическом соотношении Дуллитла [21]. Ссылаясь на труды Вильямса, Ланделла и Ферри в теории вязкоупругих свойств полимеров [15], Буэче определяет долю свободного объема при температуре T в полимерах соотношением:

$$f = f_g + \Delta\alpha_p (T - T_{gp}), \quad (12)$$

где f_g – доля свободного объема при температуре стеклования, $\Delta\alpha_p = \alpha_{lp} - \alpha_{gp}$ – разность между коэффициентами теплового расширения выше и ниже температуры стеклования полимера, T_{gp} – температура стеклования полимера.

$$j = \frac{q^{(-)} - q^{(+)}}{l_h}, \quad q^{(+)} = -\lambda_h \left(\frac{\partial T_h}{\partial r} \right)_a,$$

где $q^{(+)}$ – интенсивность теплового потока от стенки скважины в газогидратный массив, λ_h и l_h – коэффициент теплопроводности и удельная теплота разложения газогидрата. Скорость изменения радиуса скважины

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{j}{\rho_h^0}.$$

будем определять на основе уравнения:

Результаты расчетов

Рассматривается режим работы систем добычи газа, при котором поддерживаются постоянные значения давлений на входе подводящего канала, по которому закачивается вода и на выходе подъемной колонны. Кроме того, температура теплоносителя на входе также постоянна. Эти условия могут быть записаны в виде:

$$p^{(i)} = p_0, \quad p = p_e, \quad T^{(i)} = T_0$$

Кроме того, рассматривались не только системы добычи газа, представляющие собой вертикальные каналы, но и скважины в виде спирали (змеевика). На рис. 1 представлены распределения температурных полей и массовых расходов газа вдоль скважины. Пунктирными линиями представлены расчеты для случая, когда скважина представляет собой спираль (числа на кривых выражают время в часах).

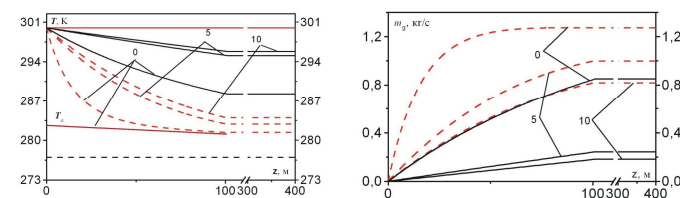


Рис. 1 Распределения температурных полей и массовых расходов газа вдоль скважины

Литература

- Истомин В.С., Якушев В.С. Газовые гидраты в природных условиях. – М: Недра, 1992. –236.
 Бык С.Ш., Макогон Ю.Ф., Фомина В.И. Газовые гидраты. – М: Химия, 1980. –296.

Жидкость будем считать несжимаемой, а газ калорически совершенным:

$$\rho_l^0 = const, \quad p = \rho_g^0 R_g T. \quad (6)$$

Силовое и тепловое взаимодействия потока в системе добычи

Силу трения и интенсивность теплопередачи между теплоносителем и внутренней скважины будем учитывать по схеме Кириллова-Петухова, согласно которой можем записать:

$$\tau_c^{(-)} = \xi_c^{(-)} \frac{\rho_l^0 w^{(i)2}}{8}, \quad \xi_c^{(-)} = (1.82 \lg \text{Re}_l - 1.64)^{-2}, \quad \text{Re}_l = \frac{2a_c^{(-)} \rho_l w_l}{\mu_l},$$

$$q_c^{(-)} = q_c = q_c^{(+)} = \beta(T^{(i)} - T), \quad \beta_c^{(-)} = \frac{\lambda_l \text{Nu}_l^-}{2a_c^{(-)}}, \quad \text{Pr}_l = \frac{\mu_l c_l}{\lambda_l},$$

$$\text{Nu}_l^- = \frac{(\xi_c^{(-)}/8) \text{Re}_l \text{Pr}_l}{1.07 + 12.7 \sqrt{\xi_c^{(-)}/8} (\text{Pr}_l^{2/3} - 1)}, \quad \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta_c^{(-)}} + \frac{1}{\beta_c} + \frac{1}{\beta_c^{(+)}}.$$

Для силового и теплового взаимодействия восходящего потока со стенками примем следующие соотношения:

$$\tau_c^{(+)} = \tau = \xi \frac{\rho w^2}{8}, \quad \xi = (1.82 \lg \text{Re} - 1.64)^{-2}, \quad \text{Re} = \frac{2a \rho w}{\mu},$$

$$\beta_c^{(+)} = \frac{\lambda \text{Nu}}{2a}, \quad \beta_c^{(-)} = \frac{\lambda \text{Nu}}{2a}, \quad \text{Pr} = \frac{\mu c}{\lambda},$$

$$\text{Nu} = \frac{(\xi/8) \text{Re} \text{Pr}}{1.07 + 12.7 \sqrt{\xi/8} (\text{Pr}^{2/3} - 1)}.$$

Описание интенсивности вымывания газогидрата

Интенсивность j разрушения газогидрата на поверхности скважины лимитируется интенсивностью подвода тепла к этой поверхности. При этом температура стенки скважины T_a равна равновесной температуре разложения газогидрата $T_{(s)}$, которая соответствует значению давления восходящего потока p для данного сечения:

$$T_{(s)}(p) = T_{(h0)} + T_* \ln(p/p_{(h0)})$$

В соответствии с вышесказанным можно записать:

Для растворов полимеров Буэче своей работе [16] приводит следующее выражение:

$$f = c [f_g + \Delta\alpha_p (T - T_{gp})] + (1-c) [f_g + \Delta\alpha_s (T - T_{gs})], \quad (13)$$

где c – доля полимера, $\Delta\alpha_s = \alpha_{ls} - \alpha_{gs}$ – разность между коэффициентами теплового расширения выше и ниже температуры стеклования растворителя, T_{gs} – температура стеклования растворителя.

Учитывая, что значение f_g для полимеров не постоянно [17, 22] при расчетах f_g было использовано соотношение:

$$\Delta\alpha T_g = f_g \ln\left(\frac{1}{f_g}\right) \quad (14)$$

Согласно (13) долю свободного объема в ходе полимеризации МГ можно разложить на две составляющие – вклады долей свободного объема мономерной и полимерной частей:

$$f = f^0 \cdot (1 - \chi) + \exp\left(-\frac{\varepsilon}{RT}\right) \cdot \chi \quad (15)$$

где χ – конверсия.

Здесь полимерная составляющая расписана согласно уравнению (7). Подставляя соотношение (15) в выражение (11), получаем

$$k_p = \left[\frac{1}{k_p^0} + \frac{\exp\left\{v_p^* \cdot \left[\frac{1}{f^0 \cdot (1 - \chi) + \exp\left(-\frac{\varepsilon}{RT}\right) \cdot \chi} - \frac{1}{f^0} \right] - 1\right\}}{k_{pd}^0} \right]^{-1}, \quad (16)$$

где k_p – константа скорости реакции роста; k_{pd}^0 , v_p^* – модельные константы; f^0 – доля свободного объема без конверсии; χ – конверсия; T – температура; $R = 8,31$ Дж/К – универсальная газовая постоянная; ε – энергия образования флуктуационных микропустот.

Важно отметить, что молекулярная структура сложной полимерной системы характеризуется наличием различных кинетических единиц: атомных групп, боковых сегментов, подвижных фрагментов цепи, концевых элементов и т.д., каждая из которых характеризуется своим типом молекулярной подвижности. Согласно дырочно-активационной модели

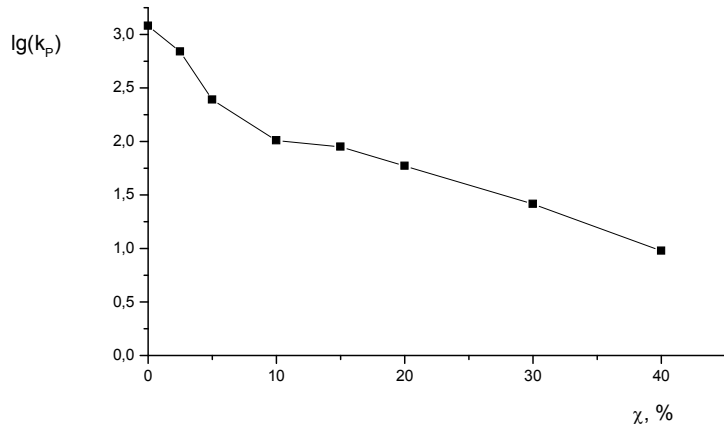


Рис. 2. Экспериментальная зависимость константы скорости роста от конверсии [3].

Френкеля движение отдельной кинетической единицы возможно при наличии близи достаточного свободного флуктуационного объема v_{h_i} .

В работе [8] для описания молекулярной подвижности в полимерных системах была предложена концепция распределения свободного объема. Учитывая, что размеры кинетических единиц могут быть различны, следует естественно предположить и образование флуктуационных дырок v_{h_i} различных объемов. Следовательно, такая система не может быть охарактеризована единственным значением объема дырки v_h , а значит и энергии образования дырки ε . Таким образом, требуется введение целого распределения энергий активации микропустот $F(\varepsilon)$, которое должно подчиняться условию нормировки:

$$\int_0^{\infty} F(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (17)$$

Мономер МГ представляет собой жидкость содержащую молекулы одного сорта, поэтому примем, что доля свободного флуктуационного объема, приходящаяся на мономер f_0 будет определяться микропустотами одного сорта. Таким образом, учитывая вклады всех элементов флуктуационного объема, запишем интегральное представление для константы роста:

Полагая, что нисходящее течение теплоносителя происходит с постоянной скоростью запишем уравнение импульсов:

$$\frac{dp^{(i)}}{dz} = -\rho_l^0 g + \frac{2\tau_c^{(-)}}{a_c^{(-)}} \quad (1)$$

здесь $p^{(i)}$ - давление в скважине, ρ_l^0 - плотность жидкости, $a_c^{(-)}$ - радиус внешней скважины, $\tau_c^{(-)}$ - сила гидравлического трения между потоком и стенкой скважины, отнесенная на единицу её площади.

Уравнение баланса тепла в этой колонне имеет вид:

$$m_l^{(-)} c_l \frac{dT^{(i)}}{dz} = 2\pi a_c^{(-)} q_c^{(-)}, \quad (2)$$

где $T^{(i)}$, $m_l^{(-)}$, $w^{(i)}$, c_l - температура, массовый расход, скорость и теплоемкость воды, $q_c^{(-)}$ - интенсивность теплопередачи, отнесенная к единице площади стенки скважины.

Газожидкостной поток в скважине будем описывать в квазиодномерном и квазистационарном приближении.

Запишем уравнения масс для жидкой и газовой фаз в односкоростном приближении, уравнение импульсов, уравнение притока тепла для двухфазного потока [3]:

$$\frac{dm_i}{dz} = 2\pi a j_i, \quad m_i = S w \rho_i^0 \alpha_i, \quad (i = g, l), \quad (3)$$

$$m \frac{dw}{dz} = -S \frac{dp}{dz} - S \rho g - 2\pi a \tau - 2\pi a j w, \quad (4)$$

$$(m_g c_g + m_l c_l) \frac{dT}{dz} = \frac{m_g}{\rho_g^0} \frac{dp}{dz} + 2\pi a j c (T_a - T) + 2\pi a q^{(-)}. \quad (5)$$

Здесь m_i , ρ_i^0 , α_i - соответственно массовый расход, истинная плотность, объемное содержание i -ой фазы ($i = g$ и $i = l$ относится к газовой и жидкой фазам); w - среднерасходная скорость; j_i - массовая интенсивность поступления i -ой фазы за счет смыва газогидрата тепловой водой со стенки скважины, отнесенная на единицу её площади, τ - сила трения между газожидкостным потоком и внешней стенкой скважины, T и T_a - температуры двухфазного потока в скважине и стенки скважины; $q^{(-)}$ - интенсивность теплообмена между двухфазным потоком в скважине и её внешней стенкой.

Определение режимов эксплуатации систем добычи газа из газогидратных месторождений

Чиглинцева А.С., Шагапов В.Ш.

БирГСПА, Бирск, changelina@rambler.ru

Аннотация

В работе анализируется принципиальная возможность извлечения газа из состава газогидратного массива посредством вымывания теплой водой. Изучено влияние различных режимов воздействия теплоносителем на интенсивность выхода газа. Также рассмотрены различные системы добычи газа из газогидратного массива.

Введение

В последнее время газогидраты привлекают все более нарастающий интерес исследователей. Это связано, прежде всего, с рассмотрением газогидратов как одного из основных источников энергии будущего.

Согласно современным геологическим данным огромные запасы углеводородного газа находятся в донных осадках морей и океанов в виде твердых газогидратных отложений. Потенциальные запасы метана в газогидратах оцениваются специалистами до $2 \cdot 10^{16}$ м³ [1, 2]. Представляется, что извлечение газа из состава газогидратных массивов, возможно, их растоплением. В работе рассматривается задача о вымывании газа из состава газогидрата посредством циркуляции теплой воды через систему скважин. Предполагается, что система добычи газа состоит из двух цилиндрических вертикальных каналов. Внешний канал предназначен для подвода теплоносителя на открытый участок скважины. Теплоноситель, поднимаясь по забоям, подвергается к диссоциации газогидрат. Вследствие этого в восходящий поток поступают газ и дополнительно вода. Далее этот двухфазный поток попадает на обсаженный участок.

Основные уравнения

Осевую координату будем отсчитывать от нижней границы забоя скважины.

$$k_p(\chi) = \int_{\varepsilon_{\min}}^{\varepsilon_{\max}} \frac{1}{k_p^0 + \frac{\exp\left\{v_p^* \cdot \left(\frac{1}{f^0 \cdot (1-\chi) + \exp\left(-\frac{\varepsilon}{RT}\right) \cdot \chi} - \frac{1}{f^0}\right)\right\}^{-1}}{k_{pd}^0}} F(\varepsilon) d\varepsilon \quad (18)$$

где $F(\varepsilon)$ – искомый спектр энергий образования флуктуационных дырок.

Расчетная часть

Уравнение (18) представляет собой интегральное уравнение Фредгольма первого рода. Задача отыскания вида $F(\varepsilon)$ является некорректной и требует наличия дополнительной информации о характере решения. В качестве априори была использована следующая информация:

- 1) решение $F(\varepsilon)$ принадлежит классу гладких функций интегрируемых с квадратом и имеющих первую производную на искомом отрезке;
- 2) норма невязки не превышает квадрата ошибки экспериментальных данных;
- 3) решение $F(\varepsilon)$ не отрицательно;
- 4) выполняется условие нормировки.

Экспериментальные данные, выражающие зависимость $k_p(\chi)$ приведены в работе [3]. На рис. 2 представлена экспериментальная зависимость для МГ при постоянной температуре $T = 298$ К.

Опираясь на экспериментальные измерения, нами была решена обратная задача (18) методом регуляризации Тихонова, со следующими модельными параметрами: $k_p^0 = 1,31 \cdot 10^6 \cdot \exp(-17300/RT)$ ($R = 1,98$ ккал/моль); $v_p^* = 0,3599$; $k_{pd}^0 = 3,35 \cdot 10^5$ л/моль·с [2]; $f^0 = f_{gM} + \Delta\alpha_M (T - T_{gM})$, где $f_{gM} = 0,025$ – доля свободного объема мономера при температуре стеклования $T_{gM} = 240$ К, $\Delta\alpha_M = 5 \cdot 10^{-4}$ – разность коэффициентов теплового расширения мономера выше и ниже температуры стеклования.

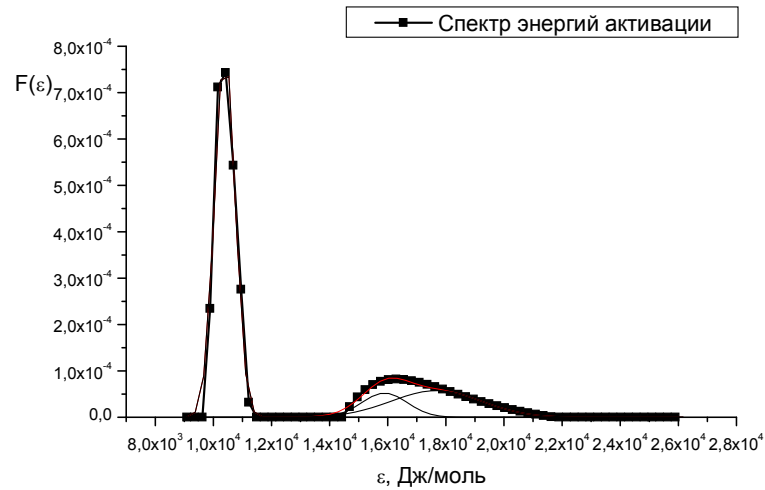


Рис. 3. Спектр распределения энергий образования флуктуационных микропуст-

При численном расчете параметр регуляризации составил $\alpha \approx 4,37 \cdot 10^{-4}$, невязки $\eta \approx 4,34 \cdot 10^{-3}$. На рис.2 представлен результат численного обратной задачи.

Полученный спектр энергий образования микропустот хорошо описывается суперпозицией трех гауссовых функций (на рис. 3 обозначены пунктиром) с максимумами в точках: 10,4 кДж/моль, 15,9 кДж/моль, 17,7 кДж/моль. Наличие трех максимумов можно объяснить на основе микрогетерогенной модели радикально-иницированной трехмерной полимеризации описанной в работе [9]. Данная модель по сути заключается в следующем: уже на малых степенях превращения ОЭА формируются дискретные полимерные частицы (клубки, микрообразования, микрочастицы, микрогели) с густосетчатым ядром и редкосетчатым приповерхностным слоем (рис.4). Они играют роль микрореакторов, в которых полимеризация происходит в основном на активных приповерхностных слоях с ростом густосетчатых ядер. Пока изолированные полимерные структурные образования не достигают размеров, при которых их активные зоны перекрываются, происходит увеличение суммарного объема приповерхностных слоев. При дальнейшей полимеризации имеет место уменьшение суммарного объема приповерхностных слоев.

$$Nu = 0,021 Re_v^{0,8} Pr^{0,43}; Pr = \frac{\mu_v c_v}{\lambda_v}$$

$$\frac{dw_v}{dz} = \frac{1}{m_v} \left(-S \rho_v^0 R_v \frac{dT}{dz} + \rho_v^0 g S - 2\pi\tau + \frac{dm_v}{dz} (w_{v_0} - w_v) \right) \quad (10)$$

$$\frac{dw_l}{dz} = \frac{1}{m_l} \left(-(S_0 - S) \rho_l^0 R_l \frac{dT}{dz} + \rho_l^0 g (S_0 - S) + 2\pi a \tau + \frac{dm_l}{dz} (w_{l_0} - w_l) \right) \quad (11)$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{1}{m_v (c_v - R_v)} \left(-\frac{dm_v}{dz} c_v (T - T_a) - 2\pi a q^- \right) \quad (12)$$

$$\delta = \frac{-\frac{\tau}{2\mu_l} + \sqrt{\left(\frac{\tau}{2\mu_l}\right)^2 + \frac{4}{3} \frac{g w_l}{v_l}}}{\frac{2}{3} \frac{g}{v_l}} \quad (13) \text{ где}$$

$$\tau = \rho_v^0 \frac{(w_v - w_l)^2}{8} \xi; \quad \xi = \frac{0,3164}{Re_v^{0,25}}; \quad Re = \frac{2aw_v \rho_v^0}{\mu_v}$$

Начальные условия

$$z = 0, T = T_0, w_v = w_{v_0}, w_l = 0, \delta = 0, m_v = m_{v_0}$$

Граничные условия

$$T_a = T(P), \quad T = \frac{T_y}{\ln\left(\frac{P_y}{P}\right)}$$

Полученную систему уравнений решаем методом Эйлера.

Литература

Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Т. 1. М.: Наука, 1987. –464.

Запишем основные уравнения, описывающие движение пара в трубчатом канале сопровождаемая конденсацией на её стенках

Уравнение сохранения массы для пара:

$$\frac{dm_v}{dz} = -2\pi a_0 j \quad (1)$$

Уравнение сохранения массы для тонкой пленки жидкости:

$$\frac{dm_l}{dz} = 2\pi a j \quad (2)$$

Уравнение импульсов для пара:

$$m_v \frac{dw_v}{dz} = -S \frac{dP}{dz} + \rho_v^0 g S - 2\pi a \tau + \frac{dm_v}{dz} (w_{v_0} - w_v) \quad (3)$$

Уравнение импульсов для тонкой пленки жидкости:

$$m_l \frac{dw_l}{dz} = -(S_0 - S) \frac{dP}{dz} + \rho_l^0 g (S_0 - S) - 2\pi a \tau - \frac{dm_l}{dz} (w_{l_0} - w_l) \quad (4)$$

Уравнение теплопроводности:

$$m_v c_v \frac{dT}{dz} = \frac{m_v}{\rho_v^0} \frac{dP}{dz} - \frac{dm_v}{dz} c_v (T - T_a) - 2\pi a q^- \quad (5)$$

Уравнение состояния идеального газа для единичного объёма:

$$P = \rho_v^0 R_v T \quad (6)$$

Уравнение теплового баланса на поверхности конденсата:

$$j l = -q^- + q^+ \quad (7)$$

Решая эти уравнения мы получаем следующую систему уравнений:

$$\frac{dm_v}{dz} = -2\pi a_0 \frac{q^+ - q^-}{l} \quad (8)$$

$$\frac{dm_l}{dz} = 2\pi a \frac{q^+ - q^-}{l} \quad (9)$$

где $q^+ = \frac{T_a - T_c}{\frac{\delta}{\lambda_l} + \frac{\delta_c}{\lambda_c}}$; $q^- = \frac{\lambda_v Nu_v}{2a} (T - T_a)$

где δ – толщина пленки, λ_l – теплопроводность жидкости, λ_c – теплопроводность стенки, T_c – внешняя температура

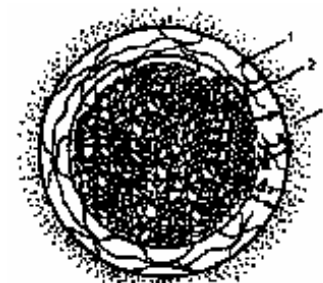


Рис. 4. Модель густосетчатой полимерной частицы: 1 – реакционная зона (оболочка частицы); 2 – полимер с предельной степенью полимеризации (ядро); 3 – исходный непрореагировавший мономер.

В работе [10] описана и развита концепция «локальных» свободных объемов, которая нашла прямое экспериментальное подтверждение в опытах по численному моделированию движения изолированной полимерной цепи [11], результатах релаксационной спектроскопии [12], в исследованиях по изучению трансляционной и вращательной подвижностью молекул мономера, концевых групп, звеньев и боковых структур макромолекул [13-14]. Согласно этим исследованиям, интенсивность теплового движения структурных элементов макромолекулы и связанные с ними «локальный свободный объем» располагаются в следующей последовательности: узлы < звенья < боковые группы < концевые группы < мономер [10].

При выполнении расчетов мы учитывали наличие спектра энергий только в полимерной среде системы. Вероятнее всего предположить, что более высокая подвижность в полимерной системе присуща концевым элементам растущих полимерных цепей, содержащих метильную и метиленовую атомные группы. На рис.3 проявление этого механизма выражено в виде интенсивного пика со значением энергии активации 10,4 кДж/моль. Эти элементы в основном могут находиться в реакционной зоне (рис.4) с невысокой степенью полимеризации.

Учитывая что в ходе реакции формируется жесткий трехмерный полимерный остов, подвижность которого обусловлена колебательно-вращательной подвижностью боковых элементов и отдельных звеньев макроцепи, логичнее всего было бы отнести более высокие значения энергии активации к зоне с высокой степенью полимеризации.

Заключение

Результаты расчетов по модельной задаче показали хорошее соответствие между точным и приближенным решениями. Разработанный программный пакет на основе метода регуляризации А.Н. Тихонова можно применять при расчетах экспериментальных зависимостей констант скоростей роста элементарных реакций от глубины полимеризации. Полученный спектр распределения энергий образования микропустот позволяет оценить доли флуктуационного объема и охарактеризовать жидкое состояние вещества.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ №08-01-97028-р_поволжье_а.

Список литературы

1. Багдасарян Х.С. Теория радикальной полимеризации. – М.: Наука, 1966. – 299 с.
2. Сивергин Ю.М., Киреева С.М., Гришина И.Н. // Пластические массы. – 1999. – № 11. – С.18.
3. Творогов Н.Н. / Дисс. на соискание канд. хим. наук. – ИХФ АН СССР, 1967.
4. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. – Л.: Наука, 1975.
5. Сангадиев С.Ш. / Дисс. на соискание уч. ст. канд. физ.-мат. наук. – Бурятский ГУ, 1999. –133 с.
6. Buback M., Macromol. Chem. 191, (1575) 1990.
7. Stickler M., Panke D., Hamielec A.E. // J.Polymer Science, 1984. – V.22. – P.2243 – 2253.
8. Turnbull D., Cohen M. //J. Chem. Phys., 34, 120 (1961).
9. Сивергин Ю.М., Усманов С.М. Синтез и свойства олигоэфир(мет)акрилатов. – М.: Химия, 2000, С. 295-296.
10. Чалых А.Е. Диффузия в полимерных системах. М.: Химия, 1987. – 312 с.
11. Гривцов А.Г., Мазо М.А., Чалых А.Е. Диффузионные явления в полимерах, РИИ, 1977. – Т.1. – С.47 – 51.
12. Баргеньев Г.М., Зеленов Ю.В. Релаксационные явления в полимерах. Л.: Химия, 1972. – 376 с.
13. Бойер Р.Ф. Переходы и релаксационные явления в полимерах. М.: Мир, 1968. – С.11 – 24.
14. Эммануэль Н.М., Бучаченко А.Л. Химическая физика старения и стабилизации полимеров. М.: Наука, 1983. – 359 с.
15. Williams M.L., Landell R.F., Ferry J. D. //J. Am. Chem. Soc., 77, 3701, (1955).
16. Kelly F.N., Bueche F. // J. Polym. Science, 1961. – Vol. L. – P.549 – 556.
17. Липатов Ю.С. // Успехи химии. – 1978. –Т. XLVII. – № 2. – С. 332.
18. Гришина И.Н., Сивергин Ю.М., Киреева С.М., Жильцова Л.А. // Пластические массы. – 2000. – № 1. – С.7.
19. Panke D. // Macromolec Theory Simul. – 1995. – V 4. – P. 759.
20. Marten F.L., Hamielec A.E. // Journal of Applied Polymer Science. – 1982. – V.27. – P. 489.
21. Dollittle A. // J.Appl. Phys., 22, 1471, (1951).
22. Сандитов Д.С., Сангадиев С.Ш. // Высокомолек. соед. Серия А. – 1999. – Т.41. – №6. – С.977 – 1000.

Математическое моделирование процесса движения пара в трубчатом реакторе

Шагиева Ф.И., Шагапов В.Ш.

Бирская государственная социально-педагогическая академия, ShagFI@mail.ru

Аннотация

Рассмотрена задача о движении пара в вертикальном трубчатом канале сопровождаемая ее конденсацией.

Постановка задачи

Рассмотрим задачу о движении пара в трубчатом канале сопровождаемое её конденсацией на стенках канала. Для простоты возьмем канал расположенный вертикально. В процессе движения пара будет происходить конденсация пара на стенки этого канала, за счет разницы температур пара и стенки канала. В процессе конденсации будет происходить образование тонкой пленки жидкости, которая будет стекать по стенке канала вниз под действием сил тяжести. С увеличением длины трубки толщина пленки будет возрастать. Также с увеличением длины трубки масса пара будет уменьшаться, а масса жидкости увеличиваться.

a_0 – радиус канала

a – живой радиус канала

$a_0 - a$ – толщина конденсата

T_0 – температура исходного пара

T_a – температура стенки конденсата

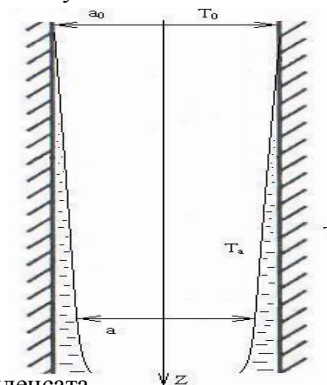
T – внешняя температура

$$S = \pi a^2$$

$$S_0 = \pi a_0^2$$

$$m_v = \pi a^2 \rho_v w_v - \text{расход пара}$$

$$m_l = \pi \left(a_0^2 - a^2 \right) \rho_l w_l - \text{расход конденсата}$$



Литература

Smirnov N.N., Nikitin V.F., Legros J.C. Ignition and combustion of turbulent dust-air mixtures. // *Combustion and Flame*. – 2000. – V.123. – P. 46-67.

Многокомпонентный анализ результатов численного решения задач Хеле-Шоу

Шерыхалина Н.М., Зиннатуллина О.Р., Поречный С.С.

УГАТУ, Уфа, n_sher@mail.ru

Аннотация

Рассмотрены вопросы, связанные с определением и уточнением временных характеристик решений нестационарных задач Хеле-Шоу. Применены усовершенствованные методы фильтрации результатов численного эксперимента, что позволило уточнить решение на несколько порядков. Это дало возможность обнаружить неизвестные ранее эффекты и получить оценки погрешностей.

Введение

Задачи по решению уравнения Лапласа с подвижными границами, когда скорость движения границы пропорциональна градиенту потенциала, принято называть задачами Хеле-Шоу со свободными границами. Решения этих задач могут интерпретироваться как течения вязкой жидкости, как процессы растворения металлов при электрохимической обработке (ЭХО) и как многие явления другой природы. В данной работе постановка задачи связана с ЭХО.

Исследование формообразования свободной поверхности в особенности осложняет необходимость длительных расчетов процесса установления предельных конфигураций и параметров зависимостей по времени. В качестве примера отметим, что при расчете координат поверхности с точностью 12-14 значащих десятичных цифр, параметры экспоненциальной зависимости $a+be^{-\lambda t}$ кривизны поверхности в данной точке от времени могут иметь всего 1-2 точных знака.

О задаче Хеле-Шоу

Рассмотрим осесимметричную задачу Хеле-Шоу, решенную ранее в [1] методом коллокаций. Задачу можно рассматривать как модель электрохимической обработки точечным электродом-инструментом (ЭИ),

движущимся или покоящимся в некоторой точке C (рис. 1). Задача Хелл-Шоу заключается в нахождении потенциала в межэлектродном пространстве, удовлетворяющего уравнению Лапласа $\Delta\varphi=0$. На границе ADB $\varphi=\text{const}$. Скорость движения границы пропорциональна нормальной составляющей напряженности, т.е. $V_n = a \frac{\partial\varphi}{\partial n}$.

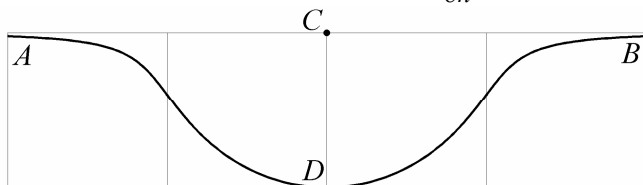


Рис.1 . Меридиональное сечение автомодельной осесимметричной поверхности.

При автомодельном режиме форма поверхности остается геометрически подобной самой себе (точка C совпадает с началом координат). Автомодельные решения представляют большой интерес, поскольку являются аттракторами, т.е. определяют асимптотическое решение при обработке неподвижным ЭИ, расположенным над поверхностью, имевшей вначале достаточно произвольную форму, возникает локально в сингулярных случаях и т. п.

При определении формы имеет интерес вычисление конкретных параметров, например, максимального по модулю значения кривизны. Вычисление кривизны требует вычисления второй производной от зависимостей координат от параметра, а это приводит к потере примерно половины значащих цифр исходной зависимости. Кроме того, определение максимума требует интерполяции, а это приводит к появлению нерегулярной погрешности, связанной с переменностью положения точки максимума кривизны от ближайших узлов интерполяции при измельчении шага сетки.

В [1] были получены численные данные, фильтрация которых обычными способами [2] показала наличие большой нерегулярной составляющей (рис. 2,а). Даже применение специальных способов фильтрации [3] не привело к существенному уменьшению нерегулярной погрешности.

На первом этапе происходит перемешивание облака пропана с окружающим воздухом, на втором этапе – горение образовавшейся смеси. Расчитаны поля температур и давлений для времени загорания 20, 25, 30, 35 секунд в разных участках (рис. 2). С увеличением времени загорания пиковые значения давления и температуры уменьшаются, т.е. разрушительная сила будет слабее.

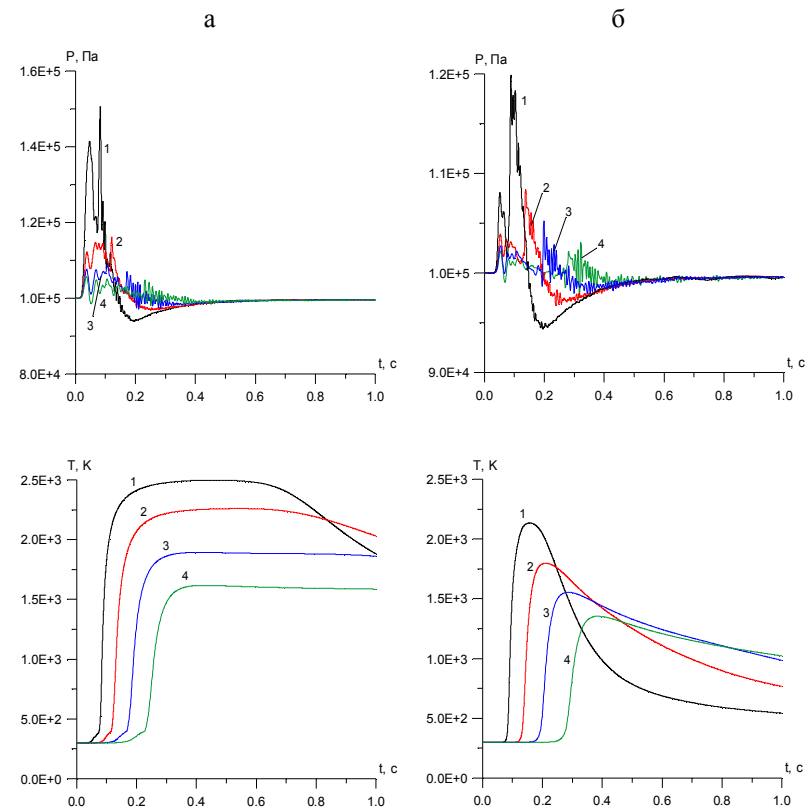


Рис.2 Значения давлений и температуры на датчиках 1 (а) и 2 (б) при различных временах загорания (1 – 20 с, 2 – 25 с, 3 – 30 с, 4 – 35 с).

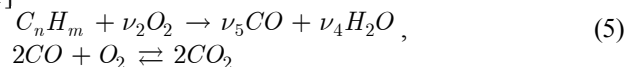
$$\rho c \frac{dT}{dt} = \nabla^k \left(\rho \frac{v_i}{\sigma_i} \nabla^k T \right) + q_1 R_1 + q_5 R_5 - Q_r, \quad (4)$$

где ρ – плотность, T – температура, p – давление, v^k – скорость, k_i – массовые концентрации компонент смеси, R_i – скорости изменения концентраций в результате химической реакции, q_1, q_5 – удельные теплоты сгорания углеводорода и окиси углерода, Q_r – тепловой вклад диссоциации продуктов сгорания, c – удельная теплоемкость смеси.

Облако выброса рассмотрим как смесь газов, которая принимается за гомогенную среду состоящую из смеси углеводорода, кислорода, углекислого газа, водяного пара, окиси углерода и азота ($C_n H_m, O_2, CO_2, H_2O, CO, N_2$).

Для более полного описания процессов тепломассопереноса к данной системе уравнений (1)-(4) добавляются дополнительные уравнения $k\varepsilon$ – модели для определения энергии турбулентных пульсаций K , диссипации ε и для коэффициента кинетической турбулентной вязкости ν_t .

Согласно схеме горения учитываются процессы образования монооксида углерода [1]



Также учитывается диссоциация молекул воды и азота при высокой температуре согласно следующим схемам



Скорость реакции горения углеводорода определяется согласно соотношению Аррениуса.

Результаты расчетов

Расчетная область представляет собой ровную поверхность. На ней находятся два здания и облако пропано-воздушной смеси (рис. 1).

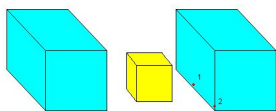


Рис.1 Конфигурация зданий и облака выброса в начальный момент времени (размеры зданий 8*20*10 м, расстояние между ними 26 м, облако кубической формы размером 6*6*6 м находится посередине между ними).

Применение дополнительной фильтрации

В данной работе применялась предварительная фильтрация на этапе интерполяции. В основе метода фильтрации заложена математическая модель погрешности, которая имеет вид суммы

$$P_m(x) - f(x) = c \prod_{l=k}^{k+m} (x - x_l) + \sum_{i=k}^{k+m} \Delta_i \prod_{\substack{l=k \\ l \neq i}}^{k+m} \frac{x - x_l}{x_i - x_l} + \Delta(m), \quad (1)$$

где $P_m(x)$ – интерполяционный многочлен степени m ; $f(x)$ – искомая функция; c – неизвестная константа; x_l – узлы сетки; Δ_i – погрешности узловых значений функции; $\Delta(m)$ – остаточная погрешность, содержащая погрешность округления; k – номер начального узла интерполяционного многочлена.

Идея фильтрации заключается в построении другого интерполяционного многочлена той же степени (например, путем изменения номера первого узла k) и составлении линейной комбинации значений двух многочленов с суммой коэффициентов равной 1, такой, чтобы уничтожилось первое слагаемое погрешности (1).

Результаты обычной фильтрации [2], примененные к отфильтрованным, как было указано выше, данным, приведены на рис. 2,б в виде зависимости $y = -\lg \delta$ (δ – относительная погрешность) от $\lg n$, где n – общее число узлов сетки. Видно, что предварительная фильтрация позволила существенно уменьшить нерегулярную погрешность и увеличить обоснованную точность с 4 значащих цифр до 8.

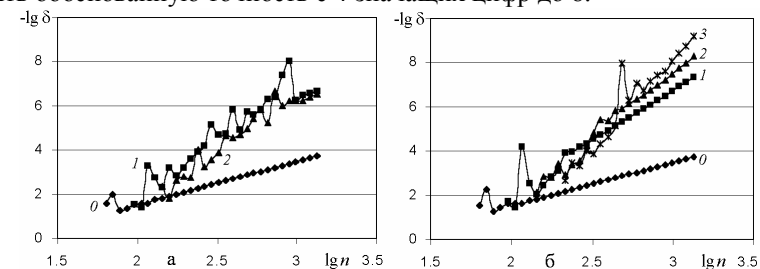


Рис.2 Фильтрация результатов вычисления максимальной кривизны автомодельной поверхности: а – без предварительной фильтрации; б – с предварительной фильтрацией.

При решении нестационарной задачи Хеле-Шоу ограничения ресурсов существенно более жесткие, чем при решении автомодельной задачи, так как требуется многократное решение систем линейных алгебраических уравнений большой размерности. В связи с этим потеря точности

Зависимость разрушительной силы взрыва пропано-воздушной смеси от времени зажигания

Баянов И.М., Хамидуллин И.Р.

БурГСПА

e-mail: bim1966@mail.ru, ildar_kh_r@rambler.ru

Аннотация

В работе представлены результаты численных расчетов горения облака пропано-воздушной смеси в атмосфере. Исследованы поля давлений и температур, которые оказывают основное разрушительное действие при взрывах.

Введение

В настоящее время применение природных газов как источников энергии только возрастает. Это связано с более дешевой добычей, переработкой и транспортировкой по сравнению с нефтепродуктами. При определенных условиях смесь газа с воздухом представляет собой взрывоопасное вещество. Поэтому необходимо глубокое изучение закономерностей распространения выбросов углеводородных соединений в последующем возгорании.

Математическая модель

Математическая модель построена на системе уравнений записанных на основе ряда принятых предположений, описывающую динамику облака газов, в которую входят уравнения неразрывности, диффузии, импульсов для всей смеси и уравнение теплового баланса.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla^k \rho v^k = 0, \quad (1)$$

$$\rho \frac{dk_i}{dt} = -\nabla^k \left(\rho \frac{\nu_t}{\sigma_d} \nabla^k k_i \right) + R_i, \quad (2)$$

$$\rho \frac{dv^k}{dt} = -\nabla^k p + \rho g^k + \nabla^n \tau^{kn}, \quad (3)$$

при вычислении кривизны более значима. Кроме того, как показывают численные исследования, с течением времени происходит установление значения максимальной кривизны на некотором предельном (стационарном или финальном) значении. Интерес представляет как определение приближенного значения этого предела, так и закономерности установления предельного значения. На рис. 3,а представлены зависимости десятичного логарифма разности вычисленного значения кривизны в центре с приближенным значением предела, соответствующего стационарному значению $y = -\lg \delta$, $\delta = |\Delta K/K|$ от времени τ (цифрой 0 обозначена исходная зависимость, цифрой 1 – отфильтрованная). Погрешность этой зависимости можно оценить как

$$\Delta y = \left| -\lg \left| \frac{z_n - z - \Delta_{\text{int}}}{z} \right| + \lg \left| \frac{z_n - z}{z} \right| \right| \approx \frac{1}{\ln 10} \frac{\delta_{\text{int}}}{\delta} = 10^{-k},$$

$$\delta = \left| \frac{z_n - z}{z} \right|, \Delta_{\text{int}} = \sum_{i=k}^{k+m} \Delta_i \prod_{\substack{l=k \\ l \neq i}}^{k+m} \frac{x - x_l}{x_i - x_l}, \delta_{\text{int}} = \left| \frac{\Delta_{\text{int}}}{z} \right|.$$

Исходный уровень погрешности округления $-\lg \delta$ (порядка 8-и значащих цифр) отмечается колебательным хаотическим характером кривой при $\tau > 3,5$. Для получения результатов с заданным числом значащих цифр k приходится ограничить исследуемую часть кривой ниже уровня $-\lg \delta \approx -\lg |\delta_{\text{int}}| - k + \lg \ln 10$. На рис. 3,б видно, что при $\tau > 0,17$ возрастающие хаотической погрешности ограничивает точность расчета.

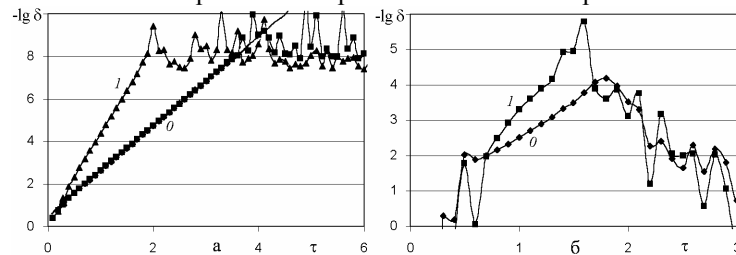


Рис.3 Зависимости от времени: а – погрешности кривизны нестационарной поверхности; б – углового коэффициента λ .

При исследовании установления финальной формы интерес представляет определение максимальной по модулю кривизны. Для этого необходимо использовать интерполяцию, в результате возникает нерегулярная погрешность. Высокий уровень нерегулярной погрешности

вольно значительное снижение проницаемости. И как следствие этого происходит снижение конвективного переноса тепла.

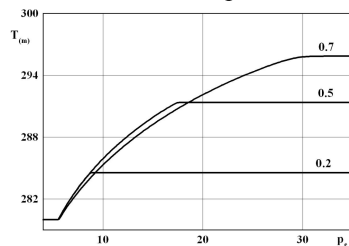


Рис.2 Зависимость величины максимальной температуры в пористой среде от давления нагнетания для различных исходных водонасыщенностей пористой среды

На рис.2 иллюстрируется влияние исходной водонасыщенности пористой среды на величину максимальной температуры, которая может реализоваться в пористой среде. Таким образом, из-за гидратообразования в объемных областях, нагнетаемый во влажную пористую среду, газ становится своеобразным теплоносителем. Хотя при этом его температура может быть ниже исходной температуры пористой среды.

Литература

Истомин В.А., Якушев В.С. Газовые гидраты в природных условиях. М.: Недра, 1992. 236 с.
 Бык С.Ш., Макогон Ю.Ф., Фомина В.И. Газовые гидраты. М: Химия, 1980. 296 с.
 Нигматулин Р.И., Шагапов В.Ш., Сыртланов В.Р. Автомодельная задача о разложении газогидратов в пористой среде при депрессии и нагреве // ПМТФ. 1998. Т.39. № 3. С. 111-118.
 Васильев В.И., Попов В.В., Цыпкин Г.Г. Численное исследование разложения газовых гидратов, сосуществующих с газом в природных пластах// Изв. РАН. МЖГ. 2006. № 4. С. 127-134.
 Лейбензон Л.С. Движения природных жидкостей и газов в пористой среде. М.-Л.: ОГИЗ, 1947. 244 с.

приводит к невозможности фильтрации по числу узлов n . Не улучшает результат и предварительная фильтрация, рассмотренная выше. Это объясняется тем, что при применении метода коллокаций возникает дополнительная погрешность интерполяции, вызванная переменной погрешностью Δ_i значений кривизны в узловых точках (1).

Для уменьшения влияния этой составляющей погрешности было предложено изменить способ вычисления кривизны. Если до этого узловые значения кривизны вычислялись при решении задачи, и далее по узловым значениям кривизны строился интерполяционный многочлен [1], то в предложенном способе интерполяционный многочлен строится по узловым значениям координат, а кривизна вычисляется с помощью дифференцирования интерполяционного многочлена. Выигрыш заключается в более высокой скорости убывания погрешностей Δ_i в узловых точках (эксперимент показывает 4-й порядок точности против 2-го в первом способе). Это позволило провести фильтрацию по числу узлов n , что еще больше увеличило точность (примерно до 4 значащих цифр, см. рис. 4,б, 5,а по сравнению с 2-мя, рис. 4,а).

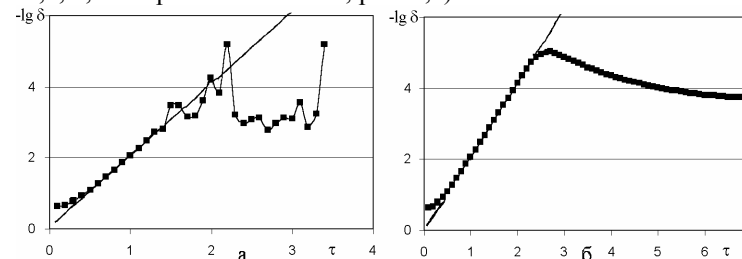


Рис.4 Исследование процесса установления максимальной кривизны финальной формы: а – без дополнительной фильтрации; б – с дополнительной фильтрацией.

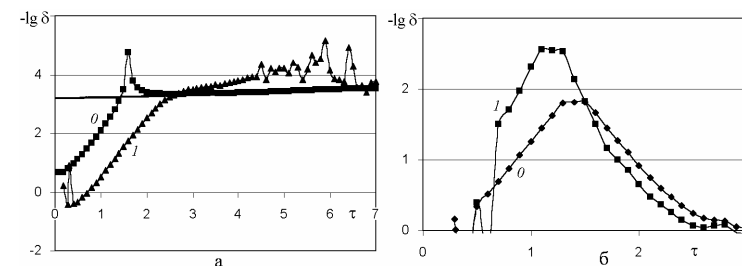


Рис.5 Зависимости от времени: а – погрешности кривизны нестационарной поверхности; б – углового коэффициента λ .

Увеличение точности позволило обнаружить новый эффект, который был не виден за погрешностью ранее: кривизна вначале растет по модулю примерно до -15.073 , а затем убывает до -15.065 (рис. 4,б). При этом характерная скорость убывания существенно меньше, чем возрастания (угловой коэффициент около 0.05 против 2.08).

Уменьшение погрешности округления

Еще один интересный факт связан с влиянием закона накопления погрешности округления на общий результат. На рис. 6 показаны результаты работы двух алгоритмов решения плоской задачи Хеле-Шоу, в одном из которых погрешность округления уменьшается за счет использования искусственно удлиненного машинного слова (рис 41,б). Однако как видно из сравнения рис. 6,а и 6,б, общая погрешность от этого уточнения не уменьшается, а увеличивается. Это объясняется тем, что погрешность численного метода имеет в данном случае меньшую величину, чем исходная (не уменьшенная) погрешность округления, но ее накопление при совершении шагов по времени пропорционально количеству шагов. Погрешность округления возмущает общую погрешность. Она имеет нерегулярный характер, накапливается медленнее (по статистическому закону пропорционально квадратному корню числа шагов). В связи с этим общая погрешность уменьшается.

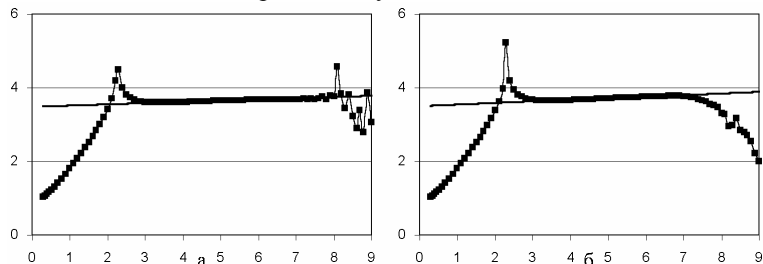


Рис.6 Установление максимальной кривизны: *a* – расчет без уменьшения погрешности округления; *б* – с уменьшением погрешности округления.

Таким образом, фильтрация помогла обнаружить слабые места алгоритмов и методов обработки численных результатов, которые увеличивают нерегулярную часть погрешности. Устранение этих причин позволило на несколько порядков уменьшить общую погрешность результатов. При применении фильтрации при интерполяции эмпирический анализ порядков точности различных компонент погрешности позволил

Анализ численных расчетов

На основе уравнений решений были проведены численные расчеты. Для параметров, определяющих свойства пористой среды (если специально не оговорено), воды, газа и гидрата приняты следующие величины: $m = 0.1$, $k_0 = 10^{-13} \text{ м}^2$, $\rho c = 2.5 \cdot 10^6 \text{ Дж}/(\text{К} \cdot \text{кг})$, $\lambda = 2 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$, $\rho_l = 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$, $R_g = 520 \text{ Дж}/(\text{К} \cdot \text{кг})$, $\mu_g = 10^{-5} \text{ кг}/(\text{м} \cdot \text{с})$, $\rho_h = 900 \text{ кг}/\text{м}^3$, $L_h = 5 \cdot 10^5 \text{ Дж}/\text{кг}$, $T_0 = 280 \text{ К}$, $T_* = 10 \text{ К}$, $p_{s0} = 5.5 \text{ МПа}$.

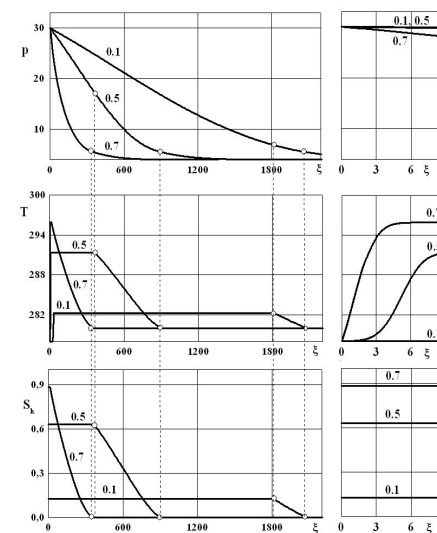


Рис.1 Зависимость гидродинамических и температурных полей от исходной водонасыщенности

Зависимость полей давления, температуры и гидратонасыщенности от начального содержания влаги иллюстрируется на рис.1. Числа на кривых соответствуют исходной водонасыщенности пористой среды S_{i0} . Видно, что максимальная температура в пористой среде реализуется при исходной водонасыщенности $S_{i0} = 0.7$. Это связано с тем, что при фиксированном значении коэффициента проницаемости пористой среды k_0 , с увеличением исходной водонасыщенности происходит до-

$$T = T_0 + T_* \ln\left(\frac{p}{p_{s0}}\right) \quad (3)$$

где T_0 – исходная температура системы, p_{s0} – равновесное давление, соответствующее исходной температуре, T_* – эмпирический параметр, зависящий от вида газогидрата.

При нагнетании газа с образованием газогидрата в пористом пласте в общем случае могут возникнуть три характерные области. В области, находящейся вблизи границы $x = 0$, поры заполнены газом и гидратом или газом и водой. Во второй (промежуточной) области происходит образование газогидрата, поэтому здесь поры заполнены газом, водой и гидратом. В третьей (дальней) области присутствуют газ и вода. На границах этих областей должны выполняться условия баланса массы и тепла [3]:

$$\begin{aligned} [m(S_h \rho_h (1-G) + S_l \rho_l) \dot{x}_{(i)}] &= 0, \\ [m(\rho_g S_g (v_g - \dot{x}_{(i)}) - \rho_h S_h G \dot{x}_{(i)})] &= 0, \\ \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right] &= [m \rho_h L_h S_h \dot{x}_{(i)}] \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $[\psi]$ – скачок параметра ψ на границе $x = x_{(i)}$ ($i = n, d$) между областями; $\dot{x}_{(i)}$ – скорость движения этой границы; $i = n$ – относится к границе между ближней и промежуточной областями, $i = d$ – относится к границе между промежуточной и дальней областями. Температуру и давление на этих границах будем полагать непрерывными.

Граничные условия

Будем полагать, что пласт в начальный момент времени насыщен газом ($S_g = S_{g0}$) и водой ($S_l = S_{l0}$):

$$t = 0: \quad S_l = S_{l0} \quad (S_g = 1 - S_{l0}, S_h = 0), \quad T = T_0, \quad p = p_0 \quad (x \geq 0) \quad (5)$$

Пусть через границу $x = 0$ закачивается газ:

$$x = 0: \quad T = T_e, \quad p = p_e \quad (t > 0) \quad (6)$$

Сформулированная задача имеет автомодельное решение. Введем автомодельную переменную $\xi = x / \sqrt{\aleph^{(T)} t}$ ($\aleph^{(T)} = \lambda / \rho c$), где $\aleph^{(T)}$ – температуропроводность пласта.

выбрать наиболее удачную комбинацию метода вычисления и фильтра, что было подтверждено экспериментально.

Это позволило обнаружить неизвестный ранее эффект смены увеличения максимального модуля кривизны при возрастании времени убыванием.

В результате исследований временных характеристик процессов установления параметров форм к стационарным и финальным значениям показано, что постоянная времени λ одинакова во всех случаях в пределах достигнутой точности. Точность расчета финальной формы несколько хуже, чем стационарной, поэтому разброс значений λ больше. Тем не менее, можно утверждать, что отличия λ для переходного процесса к стационарной и финальной форме не обнаружено. Инвариантность этой величины для различных условий установления стационарного процесса вопросов не вызывает. Но то, что эта величина определяет скорость установления финальной формы, заранее предсказать было трудно.

Литература

1. Житников В.П., Зиннатуллина О.Р. Моделирование нестационарных процессов электрохимического формообразования точечным электродом-инструментом // Вестник УГАТУ (сер. Управление, вычислительная техника и информатика). – 2007. – Т. 9. – №4 (22). – С. 95 – 103.
2. Шерыхалина Н.М. Методы обработки результатов численного эксперимента для увеличения их точности и надежности // Вестник УГАТУ (сер. Управление, вычислительная техника и информатика). – 2007. – Т. 9. – №2 (20). – С. 127 – 137.
3. Шерыхалина Н.М., Ошмарин А.А. Численная фильтрация данных, искаженных нерегулярной погрешностью // Вестник УГАТУ. – 2006. – Т. 8. – №1 (17). – С. 138 – 141.

Информационно-аналитическая система обобщенной кинетической модели циркониевого катализа

Губайдуллин И.М., Спивак С.И.

ИНК УНЦ РАН, Уфа, irekmars@mail.ru

Аннотация

Систематизированы кинетические модели реакции цикло-, гидроалюминирования олефинов в присутствии катализатора Cr_2ZrCl_2 . Показана необходимость разработки систем управления информацией по мере углубления знаний о механизмы реакции. Применение информационно-аналитических систем (ИАС) обратных задач химической кинетики на базе многопроцессорных вычислительных систем позволило сократить в десятки раз время изучения механизмов сложных многостадийных каталитических систем металлокомплексного катализа.

Введение

В Институте нефтехимии и катализа РАН, возглавляемым членом-корр. РАН У.М.Джемилевым, особое внимание уделяется исследованию механизмов действия катализаторов Циглера-Натта.

Для установления механизмов реакций задействованы самые разные методы: низкотемпературная ЯМР ^1H и ^{13}C спектроскопия, методы ЭПР, хромато-масс-спектрометрия, кинетические, математические и квантово-расчетные методы в химии.

В лаборатории математической химии (зав.лаб. д.ф.-м.н., профессор Спивак С.И.) разработан системный подход по математической обработке экспериментальной информации сложных механизмов металлокомплексного катализа. Под системой общего механизма циркониевого катализа понимается целостное множество взаимодействующих и взаимосвязанных реакций (рис.1.).

Данная декомпозиция общего механизма не является универсальной и принята для решения конкретной задачи – построение кинетических моделей максимально возможных реакций на основе решения обратных задач химической кинетики.

ный, т.е. температуры пористой среды и насыщающего вещества (газа, гидрата или воды) совпадают. Гидрат является двухкомпонентной системой с массовой концентрацией газа G . Кроме того, скелет пористой среды, газогидрат и вода несжимаемы и неподвижны, пористость постоянна, газ является калорически совершенным.

В рамках отмеченных допущений запишем для плоскоодномерной задачи уравнения сохранения массы, закон Дарси, уравнения состояния газа и притока тепла [3,4]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(mS_g\rho_g) + \frac{\partial}{\partial x}(mS_g v_g \rho_g) &= -mG\rho_h \frac{\partial S_h}{\partial t}, \\ \frac{\partial}{\partial t}(mS_l\rho_l) &= -m(1-G)\rho_h \frac{\partial S_h}{\partial t}, \\ mS_g v_g &= -\frac{k_g}{\mu_g} \frac{\partial p}{\partial x}, \quad p = \rho_g R_g T, \\ \rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_g c_g mS_g v_g \frac{\partial T}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + m\rho_h L_h \frac{\partial S_h}{\partial t} \\ \left(\rho c = (1-m)\rho_{sk}c_{sk} + m \sum_{j=g,l,h} S_j \rho_j c_j, \right. \\ \left. \lambda = (1-m)\lambda_{sk} + m \sum_{j=g,l,h} S_j \lambda_j, \quad S_g + S_l + S_h = 1 \right) \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь m – пористость, p – давление, T – температура, ρ_j и S_j – истинная плотность и насыщенность пор j -ой фазой ($j = sk, h, l, g$); индексы g, l, h и sk относятся к параметрам газа, воды, гидрата и скелета пористой среды соответственно; v_g, k_g и μ_g – скорость, проницаемость и динамическая вязкость газовой фазы; L_h – удельная теплота гидратообразования; c_j и λ_j – удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности фаз; ρc и λ – удельная объемная теплоемкость и коэффициент теплопроводности системы.

Зависимость коэффициента проницаемости для газа k_g от «живой» пористости mS_g будем задавать на основе формулы Козени [5]:

$$k_g = k_* \frac{(mS_g)^3}{(1-mS_g)^2} \approx k_0 S_g^3 \quad (k_0 = k_* m^3) \quad (2)$$

Значения температуры и давления в области образования гидрата связаны условием фазового равновесия [2]:

Управление нагревом влажной пористой среды при нагнетании газа

Нурисламов О.Р., Шагапов В.Ш.

Бирская государственная социально – педагогическая академия, nuris_o_r@mail.ru

Аннотация

В плоскоодномерной автомодельной постановке изучен процесс нагнетания газа во влажную пористую среду. Показано, что из-за образования газогидратов в объемных областях при нагнетании холодного газа может происходить значительный нагрев пористой среды. Проанализировано влияние параметров пористой среды, давления нагнетания на значения максимальных температур и протяженности прогретых зон.

Введение

Интерес к газогидратам связан прежде всего как главного источника углеводородного сырья будущего, а также с разработкой безопасных и экономичных способов консервации природных газов. Дело в том, что в газогидратном состоянии одну и ту же массу газа можно хранить при гораздо меньших давлениях и объемах [1,2]. Кроме того, как это показано в данной работе, процесс гидратообразования в объемных зонах влажной пористой среды может быть использовано для ее нагрева. Содержание влаги порядка нескольких процентов от общей массы пористой среды позволяет увеличить ее температуру на десятки градусов. За счет гидратообразования в объемных областях нагнетаемый газ становится своеобразным теплоносителем, хотя его температура может быть ниже, чем исходная температура пористой среды. Представляется, что этот эффект может быть использован в некоторых технологических процессах связанных с термическим размягчением сред, таких как твердые асфальтены или смолы, например.

Основные уравнения

Для описания процессов тепломассопереноса при закачке газа в пористый пласт примем следующие допущения. Процесс однотемператур-

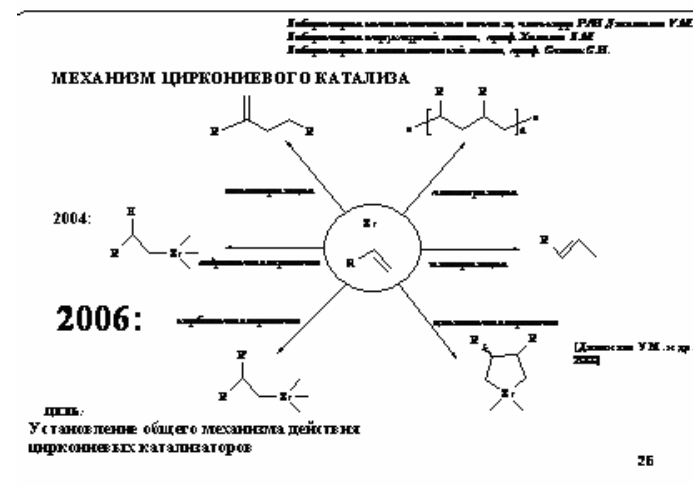


Рис.1. Декомпозиция общего механизма циркониевого катализа на отдельные реакции.

Техническими средствами обработки системного анализа являются одно и многопроцессорные вычислительные комплексы (МВК). Появление МВК позволило изучать более сложные математические модели (ММ), полнее учитывающие, отражающие реальные химические системы.

При анализе и моделировании экспериментальных каталитических процессов используются ММ обычно 6 иерархических уровней: 1) квантово-химической; 2) атомно-молекулярной (наноуровень - <100 нм); 3) частицы, капли, пузыри (микроуровень - <1мм); 4) зерно катализатора (мезоуровень - < 100см); 5) неподвижный слой катализатора и экспериментальный реактор – (например, трехгорлая колба, снабженная магнитной мешалкой), (макроуровень – 100 см -10 м); 6) экспериментальная установка в целом (мегауровень, окружающая среда, лаборатория, институт) [1].

О первом уровне ММ сложных химических систем говорится в работе [2]. Цель математического моделирования на наноуровне – исследование и познание механизма реакций металлокомплексного катализа. Определение количественных характеристик – констант скоростей и энергий активаций реакций цикло-, и гидроалюминирования. Уровень наших знаний о механизме обеспечивает физико-химическую обосно-

ванность кинетической модели, что, в конечном итоге открывает возможность управления химическим превращением циркониевого катализа.

Кинетические модели реакций цикло- и гидроалюминирования олефинов на основе итоговых стехиометрических уравнений

На первом этапе (1997-2000 г.г.), методами математического моделирования была разработана кинетическая модель (КМ) циклоалюминирования [3] (Рис.2).

Разработанная обобщенная кинетическая модель реакции позволила установить обратимый характер начальной стадии реакции и определить стадии, регулирующие суммарную скорость всего процесса циклометаллирования, а именно стадии образования пятичленного биметаллического комплекса 5.

Количественные характеристики КМ – константы скорости реакции и энергии активации, установлены в ходе проведения многочисленных вычислительных экспериментов (ВЭ) на однопроцессорных компьютерах. Методом обработки информации являлся пакет последовательных программ, включающий явный численный метод решения математического описания в виде систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ).

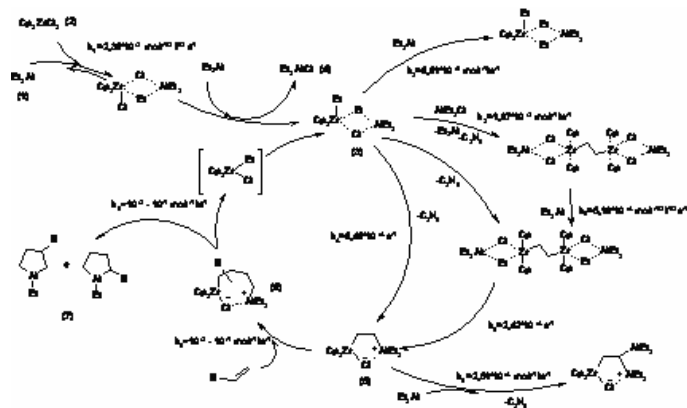


Рис.2. Схема химических превращений реакции циклометаллирования олефинов триэтилалюминием в алюмоциклопентаны в присутствии Cp_2ZrCl_2 с константами скоростей итоговых и элементарных стадий.

$$\theta = \theta_{(n)} + (\theta_e - \theta_{(n)}) \frac{\int_{\xi}^{\xi(n)} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} - \frac{\alpha_{(n)} P^2}{2}\right) d\xi}{\int_0^{\xi(n)} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} - \frac{\alpha_{(n)} P^2}{2}\right) d\xi}$$

при $\xi(d) < \xi < \infty$:

$$P^2 = 1 + (P(d)^2 - 1) \frac{\int_{\xi}^{\infty} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4\eta(d)}\right) d\xi}{\int_{\xi(d)}^{\infty} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4\eta(d)}\right) d\xi}$$

$$\theta = 1 + (\theta(d) - 1) \frac{\int_{\xi}^{\infty} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} - \frac{\alpha(d) P^2}{2}\right) d\xi}{\int_{\xi(d)}^{\infty} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} - \frac{\alpha(d) P^2}{2}\right) d\xi}$$

На основе полученных решений можно исследовать закономерности распределения давления, температуры и гидратонасыщенности в ближней и дальней областях. Анализ показывает, что наиболее полное разложение гидратов осуществляется при более высоких температурах инжектируемого газа, лежащих выше фазовой кривой.

Литература

- Истомин В. С., Якушев В. С. Газовые гидраты в природных условиях. - М.:Недра,1992. – 236с
- Макогон Ю. Ф. Гидраты природных газов. - М.:Недра,1974. – 274с
- Бык С. Ш., Макогон Ю. Ф., Фомин В. И. Газовые гидраты. - М.:Химия,1980. – 296с
- Шагапов В. Ш., Мусакаев Н.Г., Хасанов М. К. Нагнетание газа в пористый резервуар, насыщенный газом и водой.// Теплофизика и аэромеханика. – 2005. – Т.12, №4. – С. 645-656

Для описания процессов тепломассопереноса при закачке газа в пористый пласт принимаем следующие допущения. Процесс однотемпературный, т.е. температуры пористой среды и насыщающего вещества совпадают. Гидрат является двухкомпонентной системой с массовой концентрацией газа G . Кроме того, скелет пористой среды, газогидрат и вода несжимаемы и неподвижны; пористость постоянна; газ является калорически совершенным.

В рамках данных допущений записываем для плоскоодномерной задачи уравнения сохранения массы, закон Дарси, уравнения состояния газа и притока тепла (без учета баротермического эффекта). Зависимость коэффициента проницаемости для газа от «живой» пористости будем задавать на основе формулы Козени.

Значения температуры и давления в области разложения гидрата связаны условием фазового равновесия [1,2]:

$$T = T_0 + T_* \ln \left(\frac{p}{p_{s0}} \right)$$

На границах областей должны выполняться условия баланса массы и тепла.

Решение для ближней и дальней областей.

Сформулированная задача имеет автомодельное решение. Вводя автомодельную переменную, пренебрегая изменениями плотности за счет изменения температуры и используя линеаризацию Лейбензона для безразмерных давления $p = p/p_0$ и температуры $\theta = T/T_0$ в ближней и дальней областях получим следующие решения

при $0 < \xi < \xi_{(n)}$:

$$p^2 = p_{(n)}^2 + (p_e^2 - p_{(n)}^2) \frac{\int_{\xi}^{\xi_{(n)}} \exp \left(-\frac{\xi^2}{4\eta_{(n)}} \right) d\xi}{\int_0^{\xi_{(n)}} \exp \left(-\frac{\xi^2}{4\eta_{(n)}} \right) d\xi}$$

Из 13 участвующих в реакции веществ, наблюдаемыми являлись 6 веществ. Недостаточную информативность химического эксперимента дополняли следующим образом.

Математическую обработку проводили в два этапа. Сначала, обратную кинетическую задачу для системы ($\text{AlEt}_3 + \text{Cr}_2\text{ZrCl}_2$) решали в отсутствие олефинов. То есть определяли численные значения всех кинетических констант, кроме k_6 и k_7 . Далее, обрабатывали экспериментальные данные для системы ($\text{AlEt}_3 + \text{Cr}_2\text{ZrCl}_2 + \text{CH}_2\text{CH}_2\text{R}$, где $\text{R}=\text{n-Bu, Ph, SiEt}_3$) и определяли константы k_6 и k_7 . При этом, для каждого варианта рассматривали следующие начальные мольные соотношения $\text{AlEt}_3 - \text{Cr}_2\text{ZrCl}_2$: 1:1, 2:1, 5:1, 10:1, 15:1, 20:1. Экспериментальные данные получены в лабораторном реакторе с магнитной мешалкой. Для каждой системы и для каждого соотношения начальных данных, каталитическую реакцию циклоалюминирования олефинов трэтилалюминием в присутствии Cr_2ZrCl_2 проводили для разных (в среднем 6 вариантов) температур (0 - 25°C) [4].

Таким образом, входная информационная база данных состоит из $2*6*6=72$ блоков. Каждый блок несет в себе изменение концентраций наблюдаемых (6) реагентов через определенные промежутки времени. В среднем 7 замеров.

На втором этапе (2001-2004 г.г.) была построена кинетическая модель реакции гидроалюминирования олефинов с алюминийорганическими соединениями (АОС) различной структуры - HAlBu_2^i и AlBu_3^i , на основе итоговых (неэлементарных предполагаемых гипотетических схем) [5]. Входная информационная база данных увеличилась до 2160 блоков.

Сроки разработки двух выше приведенных КМ сравнимы, хотя информационная база для второй КМ в 30 раз превышает первую.

Этот результат получен благодаря разработке информационно-аналитической системы обратных задач химической кинетики [6] и применения технологии распределенного программирования [7,8].

В работах [9,10,11] рассматривались системы частных моделей, каждая из которых передает наиболее важные черты реакций гидроалюминирования олефинов АОС в заданных условиях.

Кинетическая модель реакции гидроалюминирования олефинов диизобутилхлоридом (ДИБАХ) на основе элементарных стехиометрических уравнений

Совместными усилиями с химиками экспериментаторами и специалистами в области квантово-химических расчетов предложена перво-

начальная гипотетическая элементарная схема реакции гидроалюминирования олефинов АОС ДИБАХ.

- | | |
|---|---|
| 1) $X1 + X2 \leftrightarrow X3 + X4$ | $X1 = Cp_2ZrCl_2$; $X2 = ClAlBu_2$; |
| 2) $X3 + X2 \rightarrow X5 + X6$ | $X3 = Cp_2ZrClBu$; $X4 = Cl_2AlBu$; |
| 3) $X5 + X2 \rightarrow X7 + X6 + X4$ | $X5 = Cp_2ZrHClClAlBu_2$; |
| 4) $2X7 \leftrightarrow X8$ | $X6 = C_4H_8$; $X7 = Cp_2ZrH_2ClAlBu_2$; |
| 5) $X7 + X2 \rightarrow X9 + X5$ | $X8 = [Cp_2ZrH_2ClAlBu_2]_2$; |
| 6) $X7 + X9 \leftrightarrow X10$ | $X9 = HAlBu_2$; $X11 = CH_2CHR$; |
| 7) $X7 + X11 \rightarrow X12 + X9$ | $X10 = Cp_2ZrH_2HAlBu_2ClAlBu_2$; |
| 8) $X7 + X11 \rightarrow X13 + X14$ | $X12 = Cp_2Zr(CH_2CH_2R)Cl$; |
| 9) $X14 + X9 \rightarrow X7$ | $X13 = Bu_2Al(CH_2CH_2R)$; $Cp = C_5H_5$; |
| 10) $X13 + X4 \leftrightarrow X15 + X2$ | $X14 = Cp_2ZrHCl$; $Bu = C_4H_9$; |
| 11) $X14 + X2 \leftrightarrow X9 + X1$ | $X15 = ClBuAl(CH_2CH_2R)$; |

Заключение

Таким образом, информационно-аналитические системы позволяют рассматривать сложные каталитические реакции металлокомплексного катализа с разной степенью детализации. ИАС обобщенного механизма циркониевого катализа включает в себя ММ реакции на основе итоговых стехиометрических уравнений, которые в свою очередь содержат ММ частных реакций. Более высокий уровень влияет на предыдущие уровни. Что в итоге позволяет разрабатывать детальную кинетическую модель многостадийного процесса.

Литература

1. Слинько М.Г. Основы и принципы моделирования каталитических процессов.– Новосибирск: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН, 2004.– 488 с
2. Валиева О.И., Губайдуллин И.М., Хурсан С.Л., Спивак С.И. Стехиометрический анализ стадии алкилирования Ti (IV) в каталитической системе $TiCl_4/Al(CH_3)_3$, Всероссийская научно-практическая конференция “Обратные задачи в приложениях”. 19–20 июня 2008 г.-Бирск.
3. А.В.Балаев, Л.В.Парфенова, И.М.Губайдуллин и др. //Доклады академии наук. – 2001. – Том 381. – № 3. – С.364 - 367.
4. Халилов Л.М. и др., Изв. АН, Сер.хим., 2000, №12, с.2086.
5. Parfenova L.V., Balaev A.V., Gubaidullin I.M., Pechatkina S.V., Abzalilova, L.R., Spivak S.I., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Kinetic Model of Olefins Hydroalumination by $HAlBu_2$ and $AlBu_3$ in Presence of Cp_2ZrCl_2 Catalyst, Int. J. Chem. Kinet., 2007, v.39, No 6, p.333-339.
6. Губайдуллин И.М., Спивак С.И. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики// Системы управления и информационные технологии. – 2008. - №1.1(31). - С. 150-153.

Управление температурой инжектируемого газа для обеспечения наиболее полного разложения гидрата в пористой среде

Запивахина М. Н., Шагапов В.Ш.

БурГСПА, Бурск, zapivakhina-marina@rambler.ru

Аннотация

В данной работе рассматривается процесс разложения гидратов в пористой среде при инъекции теплого газа одноименного исходному. Исследуется влияние температуры инжектируемого газа на разложение газогидратов.

Введение

Согласно современным геологическим исследованиям огромные запасы углеводородного газа находятся на дне океана в виде твердых газогидратных отложений [1-3]. Потенциальные запасы метана в газогидратах оцениваются специалистами до $2 \cdot 10^{16}$ м³ [2]. При этом в одном кубометре природного газогидрата содержится до 180 м³ газа и 0,78 м³ воды [3].

Разложение гидрата в замкнутом объеме сопровождается значительным повышением давления. Процесс разложения газогидрата происходит с поглощением тепла. На разложение природных гидратов в пласте необходимо затратить от 6 до 12 % энергии, содержащейся в гидратированном газе [1].

Представляется, что извлечение газа из состава газогидратных массивов возможно путем инъекции теплого газа или воды в пористый пласт.

Постановка задачи

В плоскоодномерном приближении рассмотрим задачу о разложении газогидрата при нагнетании в пористую среду газа, одноименного исходному.

В представленной работе анализируется влияние осадочных пород на выход газа из газогидратного массива

Литература

Макогон Ю.Ф. Гидраты природных газов. - М.: Недр, 1974. - 274с.

Истомин В.С., Якушев В.С. Газовые гидраты в природных условиях. - М.: Недр, 1992. - 236с

Нигматуллин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч.2. - М.: Наука, 1987

7. Линд Ю.Б., Губайдуллин И.М., Парфенова Л.В., Рамазанов М.Д., Спивак С.И. О применении параллельных вычислительных технологий при нахождении кинетических параметров общего механизма Zr катализа в реакциях карбо-, гидро- и циклометаллирования олефинов в присутствии катализатора $\text{Cr}_2\text{ZrCl}_{12}$ // Сб. трудов Международной научной конференции "Параллельные вычислительные технологии 2007". Челябинск, 2007. С. 128-133.
8. И.М. Губайдуллин, Ю.Б. Линд, Э.Р. Ахматсафина, С.И.Спивак. Реляционная система управления базой данных для реакции гидроалюминирования олефинов в присутствии циркониевого катализатора, реализующая динамическое распределение данных между процессорами многопроцессорной вычислительной системы. Труды международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2008)» (Санкт-Петербург, 28 января –1 февраля, 2008г). Челябинск: Изд-ЮУрГУ, 2008 г.
9. К.Ф.Коледина, И.М.Губайдуллин. Кинетическая модель частной реакции гидроалюминирования олефинов триизобутилалюминием // Обозрение прикладной и промышленной математики. (отправлено в печать).
10. Коледина К.Ф. Определение кинетических параметров частной реакции гидроалюминирования олефинов диизобутилалюминийхлоридом (ClAlBu_2) в каталитических условиях. // Сб. научных трудов Международной научной конференции «Дифференциальные уравнения и смежные проблемы», 24 – 27 июня 2008, г. Стерлитамак.
11. Губайдуллин И.М., Спивак С.И. Математическое моделирование реакции гидроалюминирования олефинов алкилаланами, катализируемое $\text{Cr}_2\text{ZrCl}_{12}$. Сб. научных трудов Международной научной конференции «Дифференциальные уравнения и смежные проблемы», 24 – 27 июня 2008, г. Стерлитамак.

Оценка параметров гетерогенного высвечивания Tb^{3+*} по изотопному эффекту при сонолюминесценции водных растворов TbCl₃

Шарипов Г. Л.¹, Абдрахманов А.М.¹, Мигранов Н.Г.²

¹ Институт нефтехимии и катализа Российской академии наук, ink@anrb.ru ² Башкирский государственный педагогический университет, theorphys@mail.ru

Аннотация

Рассмотрена обратная задача в сонолюминесценции водных растворов, состоящая в оценке среднего времени жизни возбужденных частиц в кавитационных пузырьках до их перехода в раствор (t_b) и коэффициента тушения этих частиц на границе пузырьков (χ) по измерениям изотопного эффекта – изменения интенсивности свечения при дейтерировании растворителя. На примере растворов TbCl₃ показано, что аномально низкий эффект при максимальном дейтерировании (рост в 4 раза), по сравнению с эффектом при фотолуминесценции (рост в 10 раз), может быть объяснен в рамках предложенной двухэкспоненциальной модели высвечивания ионов Tb^{3+*} в гетерогенной пузырьковой жидкости. Из анализа литературных и собственных экспериментальных данных по изотопному эффекту на основе данной модели получены оценки $t_b = 300$ мкс и $\chi = 0,38$.

Введение

Сонолюминесценция (СЛ) – свечение в кавитационных пузырьках, возникающих при действии ультразвука на жидкости. При многопузырьковой кавитации эмиттерами СЛ в водных растворах являются возбужденные молекулы воды, радикалы ОН, молекулы и атомы растворенных газов и металлов [1–3]. Среднее время жизни этих частиц τ порядка 10^{-8} с, однако для возбужденных ионов лантанидов, СЛ которых обнаружена в растворах LnCl₃ (Ln = Ce, Gd, Tb, Dy, Eu) [4], τ может достигать до миллисекунд [5]. Величина τ зависит от соотношения скоростей реакций излучательной (спонтанной) и безызлучательной дезактивации возбужденных состояний. В газовой фазе пузырьков, где возникают возбужденные частицы, и вероятность столкновений их с частица-

Описание интенсивности вымывания газогидрата.

Температура стенки скважины T_a равна равновесной температуре разложения газогидрата T_s , т.е. $T_a = T_s(p)$ Зависимость равновесной температуры описываем с помощью выражения:

$$T_s(p) = T_{h0} + T_* \ln\left(\frac{p}{p_{h0}}\right)$$

Массовая интенсивность смыва газогидрата, отнесенная к единице площади поверхности скважины, запишется в виде

$$j = \frac{q^- + q^+}{l^m G^m}, \quad q^+ = -\lambda^{(m)} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right),$$

где массовая концентрация чистого газогидрата в составе массива определяется по следующей формуле:

$$G^m = \frac{\rho_h^0}{\rho^m},$$

а плотность массива $\rho^m = \rho_h^0 \alpha_h + \rho_s^0 (1 - \alpha_h)$,

Здесь q^+ – интенсивность теплового потока от стенки скважины. Скорость изменения радиуса скважины определяется уравнением:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{j}{\rho^m}$$

Описание температурных полей вблизи газогидратного массива

При достаточно медленных темпах изменения температуры вокруг скважины широко используется метод, основанный на допущении об ограниченности радиуса теплового влияния скважины. Тогда температура вокруг скважины будет описываться выражением:

$$T^m = C_1 \ln(r/a) + C_2 r + C_3,$$

удовлетворяющим граничным условиям на поверхности стенки скважины и на поверхности теплового влияния скважины следующего вида:

$$T^m = T_a(r=a), T^m = T_{h0}, \frac{\partial T^m}{\partial r} = 0(r=a_*)$$

Закон изменения радиуса a_* вблизи скважины $a < r < a_*$ записывается в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^{a_*} 2\pi c^m \rho^m (T^m - T_{h0}) dr = -2\pi \lambda^m \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right) \Big|_{r=a}$$

T_{h0} . Давление равновесия, при данной температуре, будет равно $p_{h0} = p_s(T_0)$

Для описания процесса разложения газогидрата принимаем следующие допущения. В газогидратном массиве, с содержанием осадочных пород, находится скважина, стенка которой представляет собой осесимметричную поверхность, с радиусом, зависящим от координаты и времени. Жидкость считаем несжимаемой, а газ калорически совершенным. Трехфазный поток описываем с помощью квазиодномерного и квазистационарного приближения.

Основные уравнения

С учетом принятых допущений запишем в квазиодномерном приближении уравнения массы, тепла, импульсов для трехфазного потока. [3]

$$\frac{dm_i}{dz} = 2\pi r_j G_i^m, \text{ где } m_i = S\rho_i^0 w\alpha_i, i=l, g, s$$

$$m \frac{dw}{dz} = -S \frac{dp}{dz} - S\rho g - 2\pi a\tau - 2\pi r_j n$$

$$(m_g c_g + m_e c_e + m_s c_s) \frac{dT}{dz} = \frac{m_g}{\rho_g^0} \frac{dp}{dz} + 2\pi r_j c(T_a - T) - 2\pi a q^-,$$

где $m_i, \rho_i^0, \alpha_i, w$ - соответственно массовый расход, истинная плотность, объемное содержание i -ой фазы, T и T_a - температуры трехфазного потока в скважине и стенки скважины, q^- - интенсивность теплообмена между трехфазным потоком в скважине и стенкой, отнесенной к единице ее площади.

Будем считать жидкость несжимаемой, газ калорически совершенным:

$$\rho_e^0 = const, p = \rho_g^0 R_g T$$

Для описания силы трения и интенсивности между водой, которая используется в качестве теплоносителя, и скважиной используются уравнения:

$$\tau = \frac{\rho w^2}{8}, \xi = \frac{0,3164}{Re^{0,25}}, Re = \frac{2a\rho w}{\mu}$$

$$q^- = \beta^- (T - T_a), \beta^- = \frac{\lambda Nu}{2a}, Nu = 0,021 Re^{0,8} Pr^{0,43}, Pr = \frac{\mu c}{\lambda},$$

где коэффициенты динамической вязкости и теплопроводности соответственно равны:

$$\mu = \mu_g \alpha_g + \mu_l \alpha_l (1 + \frac{5}{2} \alpha_s) \quad \lambda = \lambda_g \alpha_g + \lambda_l \alpha_l + \lambda_s \alpha_s,$$

ми – тушителями меньше, чем в жидкости, она близка к естественному пределу, определяемому спонтанным испусканием. Тушение можно минимизировать и в жидкости. В растворах Tb^{3+} , Dy^{3+} , Eu^{3+} это достигается дейтерированием [6]. Замена молекул H_2O на D_2O в первой координационной сфере данных ионов, образующих в растворах неорганических солей аквакомплексы, снижает вероятность безызлучательной дезактивации. Она обусловлена индуктивно-резонансным переносом энергии электронного возбуждения Lp^{3+} на обертоны высокочастотных колебаний молекул воды. Для связей O–D ($\nu = 2250 \text{ см}^{-1}$) перенос менее эффективен, чем для связей O–H ($\nu = 3400 \text{ см}^{-1}$) [7].

Достаточно большое τ , небольшие размеры кавитационных пузырьков (радиус 4–80 мкм [2]), а также ограниченность собственного времени жизни этих пузырьков, предопределяют возможность перехода ионов Lp^{3+*} из пузырьков в объем раствора. По некоторым данным, время жизни пузырьков t_b до их расщепления или окончательного схлопывания при многопузырьковой кавитации ограничивается 5–7 колебаниями [8]. При частоте ультразвука 20 кГц это время составляет ~ 300 мкс. За примерно то же время возбужденные ионы могут сместиться из центра пузырька к его границе и вследствие диффузии. Так, диффузионное смещение $l = (D \cdot t_b)^{1/2}$, при типичной величине коэффициента диффузии $D \sim 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$, составит ~ 50 мкм.

Переход из пузырьков в объем жидкости неизбежно повлияет на дезактивацию возбужденных частиц, а, следовательно, отразится на величине изотопного эффекта – изменении τ , или интенсивности свечения при стационарном возбуждении, в результате дейтерирования растворителя. Из изложенного следует, что изотопный эффект при СЛ Lp^{3+} , происходящей в гетерогенной пузырьковой среде, будет меньше, чем при фотолюминесценции (ФЛ) этих ионов, возбуждаемой в гомогенном растворе. Очевидно, степень уменьшения изотопного эффекта будет напрямую зависеть от параметров гетерогенного высвечивания лантанидов, прежде всего от t_b , под которым мы далее понимаем среднее время существования ионов Lp^{3+*} внутри пузырьков.

Таким образом, изменение изотопного эффекта при СЛ по сравнению с эффектом при ФЛ можно использовать для оценки параметров гетерогенного высвечивания в пузырьковых жидкостях. Настоящая работа представляет собой первую попытку постановки и решения данной задачи.

Модель гетерогенного высвечивания

Как известно, кинетика высвечивания возбужденных состояний в гомогенной среде, возникших после короткого (по сравнению с τ) импульса возбуждения, подчиняется экспоненциальному закону:

$$I = I_0 \exp(-t/\tau), \quad \tau = (k_e + k_{nr})^{-1},$$

где I и I_0 – текущая и начальная интенсивности свечения, пропорциональные концентрациям возбужденных состояний, k_e и k_{nr} – константы скорости реакций соответственно излучательной и безызлучательной дезактивации этих состояний [7]. Интегральная интенсивность свечения за импульс (а также пропорциональная ей интенсивность свечения при стационарном возбуждении), очевидно, определится при этом выражением $I_u = I_0\tau$.

При рассмотрении изотопного эффекта важнейшим параметром является k_{nr} . Установлено, что для ионов Ln^{3+} k_{nr} линейно зависит от мольной доли H_2O в смеси $\text{H}_2\text{O}-\text{D}_2\text{O}$ [7]. Это связано с независимостью тушащего действия каждого (O–H)-осциллятора, находящегося возле иона Ln^{3+} , от действия других осцилляторов. В связи с этим k_{nr} можно записать в следующем рациональном виде:

$$k_{nr} = mk_{\text{H}_2\text{O}} + nk_{\text{D}_2\text{O}},$$

где m , n – число молекул воды или тяжелой воды, находящихся в первой координационной сфере иона лантанида, $k_{\text{H}_2\text{O}}$, $k_{\text{D}_2\text{O}}$ – константы скорости безызлучательного тушения одной молекулой H_2O или D_2O соответственно. Величины m , n можно оценить, исходя из известных координационных чисел соединений Ln^{3+} . В частности, для Tb^{3+} ближайшее окружение в водном растворе состоит из 8 молекул растворителя [9]. Таким образом, m и n меняются от 0 до 8 в зависимости от состава смеси так, что $m + n = 8$.

Используя эти представления, из экспериментальных данных для τ и квантового выхода ФЛ Tb^{3+} ($\varphi = \tau/\tau_e$, где $\tau_e = 1/k_e$) в смесях $\text{H}_2\text{O}-\text{D}_2\text{O}$ можно оценить константы скорости $k_{\text{H}_2\text{O}}$, $k_{\text{D}_2\text{O}}$ и k_e , в предположении, что последняя константа одинакова во всех растворах. Кроме того, для зависимости изотопного эффекта при ФЛ от содержания D_2O в смеси $\text{H}_2\text{O}-\text{D}_2\text{O}$ можно записать следующее выражение:

$$\left(\frac{I_{\text{H},\text{D}}}{I_{\text{H}}} \right)_{\text{PL}} = \frac{\tau_{\text{I}}^{\text{H},\text{D}}}{\tau_{\text{I}}^{\text{H}}} = \frac{k_e + 8k_{\text{H}_2\text{O}}}{k_e + mk_{\text{H}_2\text{O}} + nk_{\text{D}_2\text{O}}}, \quad (1)$$

где выражение в скобках представляет собой отношение интенсивностей ФЛ при стационарном возбуждении частично или полностью дей-

Влияние осадочных пород при разработке газогидратных массивов

Гильмиярова Л. Ф., Чиглицева А.С., Шагапов В.Ш.

БурГСПА, Бурск, larisa.gilmiyova@rambler.ru, changelina@rambler.ru

Аннотация

В данной работе рассматривается процесс разложения газогидрата при инъекции теплой воды. Исследуется влияние осадочных пород на выход газа из газогидратного массива.

Введение

Традиционные ресурсы на Земле ограничены и распределены неравномерно. При современном уровне потреблении энергоресурсов нефти достаточно на 40 лет, а природного газа - на 60-100 лет. В такой ситуации проблема энергетического характера может быть решена за счет использования газовых гидратов. Природные газогидраты более равномерно распределены по планете, чем источники газа и нефти. Для их освоения не требуются сверхглубокие скважины, сложные и транспортирования добываемой продукции. [1]

Газовые гидраты- соединения включения, в которых молекулы газа заключены в кристаллические ячейки, состоящие из молекул воды, удерживаемых водородной связью. Природные газогидраты представляют собой метастабильный минерал, образование и разложение которых зависит от давления и температуры, состава газа, воды и твердой фазы [2].

Постановка задачи

Рассмотрим процесс диссоциации газогидратного массива при инъекции теплой воды. Предположим, что газогидрат содержит осадочные породы, и извлечение газа из состава таких газогидратных массивов возможно растоплением.

Будем считать, что газогидратный массив, содержащий твердую породу, находящийся вдали от скважины, имеет постоянную температуру

В результате численных экспериментов установлено, что коэффициент теплопроводности углеводородной жидкости, как и для многих веществ, линейно зависит от температуры:

$$k_f(T) = k_{f0} [1 + b(T - T_0)]$$

Здесь k_{f0} – коэффициент теплопроводности при температуре $T = T_0$; b – температурный коэффициент теплопроводности.

Таким образом, задача сводится к определению неизвестных параметров: коэффициента объемного расширения и температурного коэффициента, которые для описанной выше физической модели соответственно равны: $\beta = 2,1 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$; $b = 0,0095 \text{ K}^{-1}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 08-01-97032.

Литература

17. Ковалева Л.А., Насыров Н.М., Максимочкин В.И., Суфьянов Р.Р. Изучение теплопроводности высоковязких углеводородных систем методом экспериментального и математического моделирования // ПМТФ. 2005. Т. 46, №6. С. 96 – 102.
18. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости, – М.: Наука, 1972. – 392 с.
19. Патанкар С. В. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости: Пер. с англ. – М., Энергоатомиздат, 1984, – 152 с.

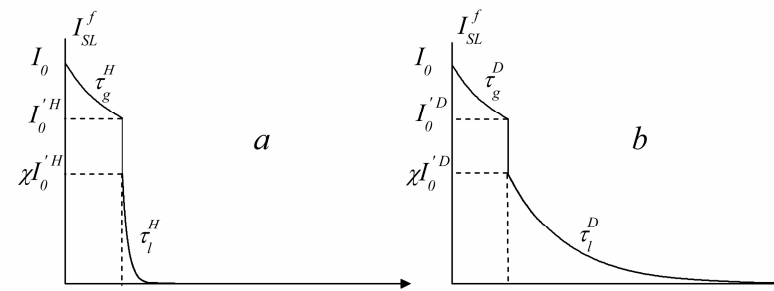


Рис.1. Кинетика затухания вспышки СЛ Tb³⁺ в H₂O (а) и D₂O (б).

терированных растворов ($I_{H,D}$) к интенсивности ФЛ раствора Tb³⁺ в воде (I_H), $\tau_l^{H,D}$, τ_l^H – время жизни ионов Tb^{3+*} в жидкости, т. е. в смеси H₂O–D₂O или воде соответственно.

Для описания вспышек свечения, возникающих при СЛ в кавитационных пузырьках, рассмотрим следующую простую модель [10], основанную на высвечивании ионов Tb^{3+*} в двухфазной гетерогенной среде, которую качественно иллюстрируют кривые на рис. 1 для крайних случаев водного (H) и полностью дейтерированного раствора (D). На первом этапе, от 0 (момент возбуждения) до t_b , происходит экспоненциальное высвечивание с характерным для газовой фазы растворителя в пузырьке временем τ_g^H или τ_g^D . При переходе через границу раздела «газ–жидкость» возможно резкое тушение (скачок интенсивности), затем происходит экспоненциальное высвечивание с характерным для жидкой фазы растворителя временем τ_l^H или τ_l^D .

Таким образом, кинетику затухания вспышки характерной СЛ Tb³⁺ в воде, D₂O или смеси H₂O–D₂O можно представить в виде следующей суперпозиции двух экспонент:

$$I_{SL}^f = \begin{cases} I_0 \exp(-t/\tau_g), & 0 < t < t_b \\ \chi I_0' \exp\left(-\frac{t-t_b}{\tau_l}\right) = \chi I_0 \exp(-t_b/\tau_g) \exp\left(-\frac{t-t_b}{\tau_l}\right), & t \geq t_b \end{cases}$$

Здесь I_{SL}^f – интенсивность вспышки СЛ, I_0' – интенсивность при $t = t_b$, χ – коэффициент тушения («выживания») возбужденных ионов при переходе через границу раздела «газ–жидкость».

Высвечиваемая за вспышку светосумма СЛ (S) равна:

$$S = \int_0^{\infty} I_{SL}^t dt = I_0 \left[\tau_g + (\chi \tau_l - \tau_g) \exp(-t_b / \tau_g) \right].$$

Применяя эту формулу для оценки общей интенсивности $I_{SL} = N \cdot S$ (N – число вспышек в единицу времени), отношение интенсивности СЛ частично или полностью дейтерированного раствора к интенсивности СЛ водного раствора можно представить как:

$$\left(\frac{I_{H,D}}{I_H} \right)_{SL} = \frac{\tau_g^{H,D} + (\chi \tau_l^{H,D} - \tau_g^{H,D}) \exp(-t_b / \tau_g^{H,D})}{\tau_g^H + (\chi \tau_l^H - \tau_g^H) \exp(-t_b / \tau_g^H)}. \quad (2)$$

Параметры t_b и χ , входящие в эту формулу, определяют уменьшение изотопного эффекта при СЛ по сравнению с эффектом при ФЛ, вычисляемым по формуле (1). Эти параметры задают вклад в него первой – газофазной стадии высвечивания, почти одинаковой для всех растворов, в силу слабости тушения молекулами растворителя. На второй стадии изотопный эффект будет таким же, как при ФЛ, а суммарное его значение для двух стадий будет меньше.

Экспериментальная проверка модели и оценка параметров t_b и χ .

Использовалось экспериментальное оборудование, подробно описанное

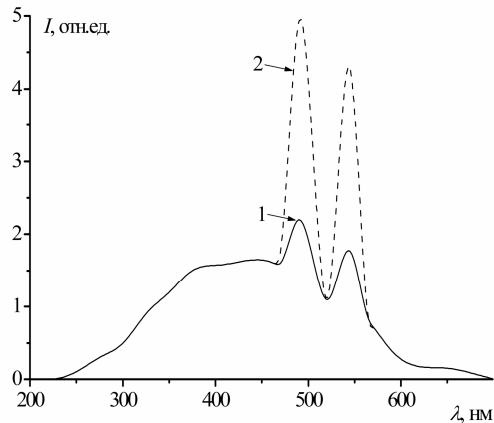


Рис. 2 Спектры СЛ растворов $TbCl_3$ в H_2O (1) и D_2O (2). $C = 0,1$ моль/л.

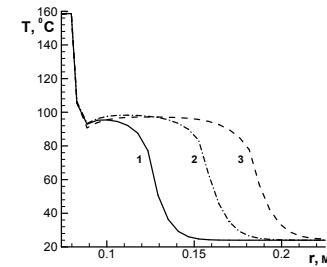


Рис.3 Распределение температуры в центральном горизонтальном сечении в моменты времени: 1 – 50 мин; 2 – 100 мин; 3 – 150 мин.

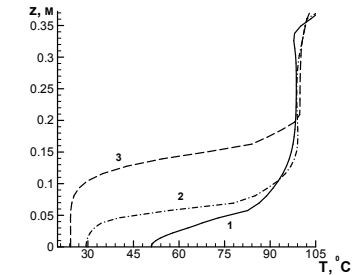


Рис.4 Формирование температурного поля в вертикальных сечениях модели: 1 – $r = 0,1$; 2 – $r = 0,15$; 3 – $r = 0,2$.

периментальных и расчетных кривых динамики изменения температуры жидкости в процессе нагрева.

Результаты расчетов показали, что в течение достаточно длительного времени после начала индукционного нагрева перенос тепла в жидкости происходит только за счет молекулярной теплопроводности. Это объясняется тем, что в начальный момент времени температура углеводородной жидкости такова, что она имеет высокую вязкость и является практически нетекучей. По мере роста температуры жидкости ее вязкость уменьшается и в верхней части емкости возникает зона конвективного течения.

Наглядное представление о динамике распространения температурного фронта в жидкости дает рис. 3, на котором показано распределение температуры в центральном горизонтальном сечении в различные моменты времени. Вблизи стенки трубы индуктора температура резко падает в тонком пограничном слое. Это можно объяснить наличием у стенки трубы индуктора вихревого конвективного течения, которое уносит тепло вглубь емкости и одновременно способствует притоку к стенке более холодной жидкости.

Термограммы в вертикальных сечениях, находящихся на разных расстояниях от оси емкости, приведены на рис. 4. Из рисунка видно, что из-за обильного конвективного перемешивания жидкости в верхней части емкости температура во всех сечениях практически одинакова, тогда как в нижней части сохраняется значительный градиент температур.

$$\alpha_v(T(R_1, z, t) - T_0) = -k_m \frac{\partial T(R_1, z, t)}{\partial r}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial T(R_3, z, t)}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T(r, 0, t)}{\partial z} = 0. \quad (13)$$

Здесь α_h , α_v – коэффициенты теплоотдачи вдоль горизонтальной и вертикальной стенок; T_0 – первоначальная температура среды и температура воздуха, окружающей экспериментальную установку.

На остальных границах слоев принимается равенство температур и тепловых потоков – граничные условия четвертого рода.

Результаты вычислений

Система уравнений (1–6) с краевыми условиями (7–13) решалась численно методом контрольного объема с использованием алгоритма SIMPLE [3]. При вычислениях приняты следующие параметры среды и постоянные физической модели: $k_f = 0,125$ Вт/(м·К); $c_f = 1864$ Дж/(кг·К); $\rho_f = 954$ кг/м³; $k_m = 45$ Вт/(м·К); $c_m = 461$ Дж/(кг·К); $\rho_m = 7900$ кг/м³; $k_b = 0,279$ Вт/(м·К); $c_b \rho_b = 2,6 \cdot 10^6$ Дж/(м³·К); $k_a = 0,02896$ Вт/(м·К); $c_a \rho_a = 1065$ Дж/(м³·К); $\mu_a = 1,897 \cdot 10^6$ м²/с; $Z_1 = 0,04$ м; $Z_2 = 0,29$ м; $Z_3 = 0,39$ м; $R_1 = 0,074$ м; $R_2 = 0,08$ м; $R_3 = 0,225$ м; $N_0 = 1224$ Вт; $T_0 = 24$ °С.

Вычисления проводились варьированием неизвестных параметров до достижения максимального совпадения результатов расчетных и экспериментальных исследований. На рис. 2 приведено сопоставление экс-

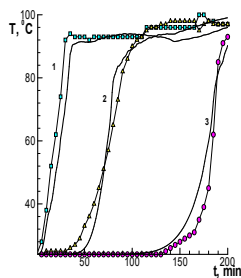


Рис.2 Динамика изменения температуры жидкости в модели: точки – эксперимент; сплошные линии – расчет; линия 1 соответствует положению первой термпары, 2 – второй, 3 – третьей.

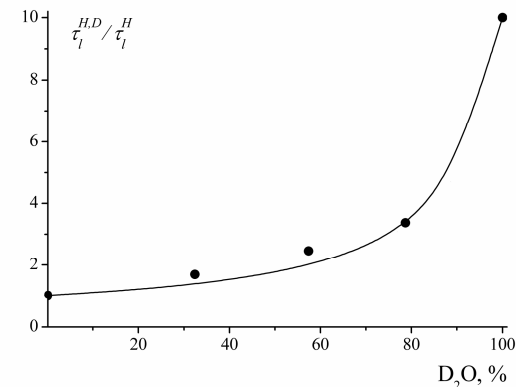


Рис.3. Зависимость изотопного эффекта от содержания D₂O в смеси H₂O–D₂O при ФЛ Tb³⁺. Точки – эксперимент, кривая – расчет.

в работах [3, 4]. Регистрация спектров СЛ и ФЛ с разрешением $\Delta\lambda = 20$ нм проводилась на спектрофлуориметре Aminco Bowman J4-8202. Среднее время жизни Tb^{3+*} при ФЛ измеряли на тауметрической установке с использованием импульсного азотного лазера ЛГИ-21 ($\lambda = 337,1$ нм). Многопузырьковая СЛ возбуждалась в стальном термостатируемом реакторе с рабочим объемом 25 мл, снабженном боковым кварцевым окошком. Титановый волновод длиной 130 мм, диаметром 6 мм, с рабочей частотой 20 кГц, подключенный к генератору ультразвука фирмы ACE GLASS, погружался непосредственно в раствор, обеспечивая мощность сонооблучения 25 Вт. Температура при регистрации спектров поддерживалась на уровне 4 ± 2 °С, время записи одного спектра составляло 1 мин. Использовались бидистиллированная H₂O, D₂O с обогащением 99,8 % и хлорид тербия марки «хч».

На рис. 2 приведены спектры СЛ растворов TbCl₃ в H₂O и D₂O. Характерные линии иона Tb³⁺ с максимумами при 488 и 545 нм наблюдаются на фоне континуума растворителя. Неизменность континуумов в H₂O и D₂O говорит об однотипности условий возбуждения в этих растворителях и о том, что изменение интенсивности в линиях лантанида, вызвано, как и при ФЛ, только изменением условий безызлучательной дезактивации Tb^{3+*}. На рис. 3 и 4 приведены зависимости изотопного эффекта при ФЛ и СЛ от состава растворителя в смесях H₂O–D₂O. Изотопный эффект представлен в виде отношения интенсивности СЛ при 488 нм в смеси определенного состава к интенсивности СЛ в водном

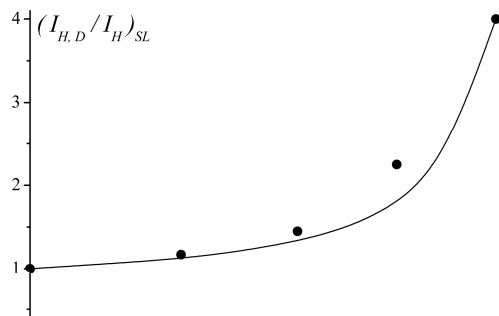


Рис.4. Зависимость изотопного эффекта от содержания D₂O в смеси H₂O–D₂O при СЛ Tb³⁺. Точки – эксперимент, кривая – расчет.

растворе, или же отношения измеренных значений времени жизни ионов Tb^{3+*} в этих же растворах при ФЛ. Наряду с экспериментальными значениями приведены также теоретические кривые, полученные расчетами по формулам (1) и (2).

Расчет изотопного эффекта при ФЛ проведен с использованием значений параметров гомогенного высвечивания ионов Tb^{3+*}, приведенных в табл. 1. Эти значения приняты как базовые на основе собственных измерений и анализа литературных данных о τ и квантовом выходе ФЛ растворов TbCl₃. Как видно из рис. 3, для ФЛ наблюдается удовлетворительное соответствие экспериментальных результатов с теоретической кривой.

Таблица 1

Параметры фотолюминесценции в растворах TbCl₃

τ_{H_2O} , мкс	τ_{D_2O} , мкс	φ_{H_2O}	k_{H_2O} , с ⁻¹	k_{D_2O} , с ⁻¹	k_e , с ⁻¹
400	4000	0,08	287,5	6,25	200

Параметры k_{H_2O} , k_{D_2O} и k_e , приведенные в табл. 1, были использованы также для вычисления значений времени жизни ионов Tb^{3+*} в газовой фазе кавитационных пузырьков, необходимых для проведения расчетов по формуле (2). При этом использовали формулы, аналогичные формулам для определения τ в жидкости, а именно:

$$\tau_g^H = (k_e + lk_{H_2O})^{-1}, \quad \tau_g^{H,D} = (k_e + mk_{D_2O} + nk_{D_2O})^{-1},$$

Полагается, что коэффициент теплопроводности углеводородной жидкости в уравнении (5) является функцией температуры:

$$k_f = f(T).$$

Вязкость углеводородной жидкости также зависит от температуры: использовалась аппроксимированная зависимость вязкости от температуры в виде двух экспонент, полученная экспериментальным путем [1]:

$$\eta(T) = \begin{cases} \eta_{01} \exp(-\gamma_1(T-35,5)), & 35,5 \text{ } ^\circ\text{C} < T < 54,2 \text{ } ^\circ\text{C}, \\ \eta_{02} \exp(-\gamma_2(T-54,2)), & 54,2 \text{ } ^\circ\text{C} < T < 75 \text{ } ^\circ\text{C}, \end{cases}$$

где $\eta_{01} = 1460$ Па·с – вязкость углеводородной жидкости при температуре 35,5 °С; $\eta_{02} = 0,228$ Па·с – вязкость углеводородной жидкости при температуре 54,2 °С; $\gamma_1 = 0,497$ К⁻¹ – температурный коэффициент в диапазоне $T = 35,5 \div 54,2$ °С; $\gamma_2 = 0,031$ К⁻¹ – температурный коэффициент в диапазоне $T > 54,2$ °С.

Краевые условия

В начальный момент времени жидкость покоится и установка имеет постоянную температуру, равную температуре окружающей среды:

$$u(x, y, 0) = v(x, y, 0) = 0 \quad (7)$$

$$T(r, z, 0) = T_0 \quad (8)$$

Для скоростей на всех твердых стенках задаются условия прилипания:

$$u|_G = v|_G = 0 \quad (9)$$

индексом «G» обозначены все внутренние границы емкости.

На верхней поверхности емкости задается условие теплообмена с окружающей средой по закону свободной конвекции в неограниченном пространстве. Внешняя стенка емкости и ее нижнее основание теплоизолированы. На внутренней поверхности трубы индуктора задается условие теплообмена с воздухом в замкнутом пространстве. Соответствующие граничные условия имеют вид:

$$\alpha_h(T(r, Z_3, t) - T_0) = -k_m \frac{\partial T(r, Z_3, t)}{\partial z}, \quad (10)$$

$$\alpha_h(T(r, Z_3, t) - T_0) = -k_f \frac{\partial T(r, Z_3, t)}{\partial z}, \quad (11)$$

$$q = \begin{cases} \frac{N_0}{\pi(R_2^2 - R_1^2)}, & Z_1 < z \leq Z_2, \\ 0, & Z_2 < z \leq Z_3, \end{cases}$$

где ρ_m , c_m , k_m – плотность, удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности металла; q – плотность распределенных источников тепла; N_0 – мощность индуктора; R_1 , R_2 – внутренний и внешний радиусы трубы индуктора; l – высота индуктора; Z_1 – толщина слоя бетона; Z_2 , Z_3 – расстояния от основания емкости до верхней поверхности индуктора и поверхности жидкости, соответственно.

В слое бетона уравнение теплопроводности имеет вид:

$$\rho_b c_b \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_b}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + k_b \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad \begin{matrix} R_1 < r \leq R_3 \\ 0 \leq z \leq Z_1 \end{matrix} \quad (2)$$

Здесь ρ_b , c_b , k_b – плотность, удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности бетона; R_3 – радиус емкости.

Конвективное движение углеводородной жидкости описывается системой уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска [2]:

$$\rho_f \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(ruu)}{\partial r} + \frac{\partial(vu)}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \eta_f \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta_f \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{\eta_f u}{r^2}, \quad (3)$$

$$\rho_f \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(ruv)}{\partial r} + \frac{\partial(vv)}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \eta_f \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta_f \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \beta \rho_f g T, \quad (4)$$

$$\rho_f c_f \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(ruT)}{\partial r} + \frac{\partial(vT)}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_f \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_f \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (5)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru) + \frac{\partial v}{\partial z} = 0, \quad \begin{matrix} R_2 < r \leq R_3 \\ Z_1 < z \leq Z_3 \end{matrix}, \quad (6)$$

где ρ_f , η_f , c_f , k_f – плотность, коэффициент динамической вязкости, удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности углеводородной жидкости; u , v – компоненты скорости теплового движения жидкости вдоль осей r и z соответственно; P – давление; β – коэффициент объемного расширения жидкости; g – ускорение свободного падения; T – температура.

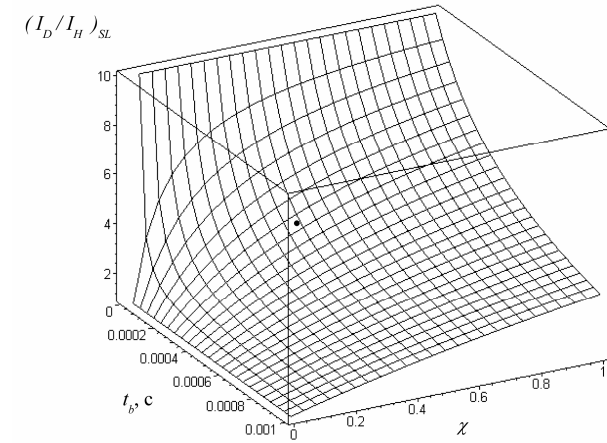


Рис. 5 Зависимость I_D/I_H при СЛ от параметров гетерогенного высвечивания.

$$\tau_g^D = (k_e + lk_{D_2O})^{-1},$$

в которых число тушащих молекул растворителя $l = m+n$ в ближайшем окружении иона Tb^{3+} выбирали, используя условие понижение плотности растворителя от значения 1 г/см^3 в жидкой фазе ($l = 8$) до $10^{-1} - 10^{-3} \text{ г/см}^3$ в газовой фазе ($l = 0,8 - 0,008$). Расчеты подтвердили, что для плотности 10^{-3} г/см^3 , примерно соответствующей плотности газа (пара растворителя) при нормальных условиях (давлении 1 атм и комнатной температуре), можно пренебречь тушением тербия молекулами растворителя, т. к. $\tau_g^H \approx \tau_g^D \approx \tau_e$.

Однако при колебаниях кавитационных пузырьков внутри них кратковременно возникают условия далекие от нормальных. Плотность, в частности, может приближаться к плотности жидкой фазы [2], и пренебрегать тушением молекулами растворителя в пузырьках, по крайней мере, для растворов с большим содержанием H_2O , нельзя. Все приведенные далее результаты получены с использованием значений τ в газовой фазе, вычисленных для среднего, из приведенного интервала, значения плотности $\sim 10^{-2} \text{ г/см}^3$. На рис. 5 представлена поверхность решений уравнения (2) для зависимости максимального изотопного эффекта при СЛ от t_b и χ , полученная с использованием математического пакета Maple, версии 6.0. Изотопный эффект на приведенном графике меняется от 1 (отсутствие эффекта) до почти 10 (максимальное значение при ФЛ), время t_b – от 40 мкс до 1 мс, коэффициент χ – от 0 до 0,95. Точкой обо-

значено оптимальное решение, соответствующее максимальному изменению значению изотопного эффекта при СЛ, равному $4,0 \pm 0,4$, уже упоминавшемуся, и взятому из анализа литературных данных, значению $t_b = 300$ мкс, и значению параметра $\chi = 0,38$. Расчетная кривая на рис. 4 получена с использованием приведенных значений параметров.

Таким образом, результаты измерений изотопного эффекта при СЛ в растворах $TbCl_3$ не противоречат предложенной модели высвечивания ионов Tb^{3+*} в пузырьковой среде и свидетельствуют о том, что часть возбужденных ионов (по полученной оценке – до 40 %) может сохранять возбуждение при переходе через границу «газ-жидкость».

Литература

1. Taylor K. J., Jarman P. D. // *Austr. J. Phys.* – 1970. – V. 23. – P. 319-334.
2. Маргулис М. А. // *УФН.* – 2000. – Т. 170. – № 3. – С. 263-287.
3. Шарипов Г.Л., Абдрахманов А.М., Гайнетдинов Р.Х. // *Изв. АН. Сер. хим.* – 2003. – № 9. – С. 1863-1865.
4. Шарипов Г.Л., Гайнетдинов Р.Х., Абдрахманов А.М. // *Изв. АН. Сер. хим.* – 2003. – № 9. – С. 1866-1869.
5. Полуэктов Н.С., Кононенко Л.И., Ефрюшина Н.П., Бельтюкова С.В. *Спектрофотометрические и люминесцентные методы определения лантаноидов.* – Киев: Наукова думка, 1989. – 256 с.
6. Kropp J. L., M. W. Windsor. // *J. Chem. Phys.* – 1965. – V. 42. – P. 1599-1608.
7. Ермолаев В.Л., Свешникова Е.Б. // *Успехи химии.* – 1994. – Т. 63. – № 11. – С. 962-980.
8. Маргулис М.А. *Звукохимические реакции и сонолюминесценция.* – Москва: Химия, 1986. – 288 с.
9. Morgan L.O. // *J. Chem. Phys.* – 1963. – V. 38. – P. 2788-2789.
10. Шарипов Г.Л., Гайнетдинов Р.Х., Абдрахманов А.М. // *Письма в ЖЭТФ.* – Т. 83. – № 11. С. 584-587.

Математическая модель

Рассматривается замкнутая металлическая емкость, основание которой покрыто слоем бетона, а в центре расположена труба индуктора. Пространство между трубой индуктора и внешней стенкой емкости заполнено высоковязкой углеводородной жидкостью. С помощью индукционного нагревателя на части стенки трубы индуктора выделяется тепло, за счет которого происходит нагрев жидкости. Схема расчетной области, соответствующая описанной физической модели, приведена на рис. 1. Задача решается в аксиально-симметричной постановке в цилиндрической системе координат, начало которой находится в центре нижнего основания емкости, а ось z направлена вверх по оси емкости. С точки зрения математического моделирования физическая модель представляет собой многослойную систему (рис. 1): труба индуктора (2), слой бетона (4), углеводородная среда (3). В каждом слое рассчитывается поле температур, а в слое 3, кроме этого, определяется поле скоростей конвективного течения жидкости.

В стенке трубы индуктора тепло, возникающее за счет энергии вихревых токов, создаваемых катушкой индуктивности, моделируется как внутренние распределенные источники тепла. Уравнение теплопроводности в стенке трубы индуктора имеет вид:

$$\rho_m c_m \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_m}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + k_m \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + q, \quad \begin{matrix} R_1 < r \leq R_2 \\ Z_1 < z \leq Z_3 \end{matrix}, \quad (1)$$

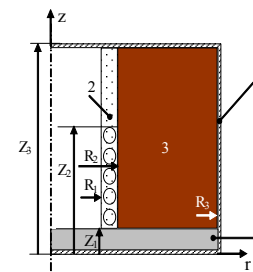


Рис.1 Геометрия расчетной области: 1 – металлическая емкость; 2 – труба индуктора; 3 – углеводородная жидкость; 4 – слой бетона.

К задаче определения теплофизических параметров тяжелых углеводородов по результатам экспериментальных исследований

Ковалева Л. А., Мусин А. А.

Башкирский государственный университет,
e-mail: liana@ic.bashedu.ru, mus-airat@yandex.ru

Аннотация

Приведены результаты математического моделирования тепловой конвекции углеводородной жидкости. Определены температурный коэффициент теплопроводности и коэффициент объемного расширения.

Введение

Экспериментальное определение теплофизических параметров сложных углеводородных систем в поле изменяющейся температуры – весьма сложная задача, т. к. они, как известно, сами являются функциями температуры. При этом первостепенной задачей становится адекватное математическое моделирование физического эксперимента. Примером такой системы являются нефтяные шламы – при комнатной температуре практически нетекучие жидкости с очень низкой теплопроводностью. При попытке нагрева такой среды, например, индукционным нагревателем возникают очаги интенсивного конвективного перемешивания. И, хотя они носят локальный характер, пренебрежения этими явлениями при математическом моделировании процесса, позволяют определить лишь некие интегральные эффективные коэффициенты [1]. Настоящая работа посвящена определению температурного коэффициента теплопроводности и коэффициента объемного расширения жидкости из сопоставления математического и физического моделирования процесса индукционного нагрева тяжелых углеводородов, с учетом возникающих в жидкости конвективных течений.

Анализ влияния неопределенности в кинетических константах на результаты теоретической оптимизации в равновесном случае

Антонова О. А., Муштафина С. А.

Стерлитамакская государственная педагогическая академия, Antonova_Olga22@mail.ru

Аннотация

В работе проведено исследование влияния неопределенности в константах равновесия на расчет оптимальных температурных условий для одной модельной схемы с применением аппарата интервального анализа.

Всякое экспериментальное измерение включает в себя некоторую неопределенность, количественно выражаемую интервалом. Тогда значение измерения является объектом интервального анализа. Далее, если все вычисления, осуществляемые ранее для той или иной инварианты, повторить в интервальной арифметике, то результирующий интервал будет обладать двумя важными свойствами: гарантированности и независимости от закона распределения случайной величины [1].

Возьмем одну из модельных схем химического равновесия – обратимую реакцию первого порядка:



Схема (1) лежит в основе модели реакции каталитического окисления двуокиси серы, разработанной в известной монографии академика РАН Г.К. Борескова [2], где r_1 и r_2 , в зависимости от лимитирующей стадии, представимы в виде:

$$r_1 = k_1 \left(\frac{x_1}{x_2} \right)^\alpha, \quad r_2 = k_2 \left(\frac{x_1}{x_2} \right)^{\alpha-2}, \quad (2)$$

$$r_1 = k_1 \frac{x_1}{x_2^\alpha}, \quad r_2 = k_2 x_2^{1-\alpha}, \quad (3)$$

$$r_1 = k_1 \frac{x_1^{1-m}}{x_2^n}, \quad r_2 = k_2 \frac{x_2^{1-n}}{x_1^m}, \quad (4)$$

где α – поправочный множитель, учитывающий необходимость определенной ориентации сталкивающихся молекул для осуществления реакции; m, n – показатели, определяющие степенную зависимость скорости обратной реакции от концентрации соответствующих веществ ($0 < n, m < 1$). На температуру наложим следующие ограничения:

$$T_{min} \leq T(t) \leq T_{max}.$$

В качестве критерия оптимизации будем рассматривать максимум выхода целевого продукта X_2 . Сформулируем задачу вычисления оптимальной температуры. Найти

$$\max_T x_2(t_k), \quad (5)$$

при ограничениях

$$k_1 \frac{x_1}{x_2^\alpha} - k_2 x_2^{1-\alpha} = 0, \quad (6)$$

$$x_1 + x_2 = 1. \quad (7)$$

Уравнения (5) – (7) есть математическая модель процесса, составленная на базе уравнений закона действующих масс и материального баланса, где x_1 и x_2 – равновесные концентрации соответственно продуктов X_1 и X_2 ; r_1 и r_2 – скорости прямой и обратной стадий химического процесса; $k_i(T)$ выписаны в соответствии с зависимостью Аррениуса:

$$k_i = k_i^0 e^{\frac{-E_i}{RT}}, \quad (8)$$

где k_i^0 – предэкспоненты; E_i^0 – энергии активации; R – универсальная газовая постоянная; T – температура.

Решим задачу (5) – (7). Выразим из уравнения (6) x_1 :

$$x_1 = \sqrt{\frac{k_2}{k_1}} x_2,$$

и, подставив его в уравнение (7), получим выражение для x_2 :

$$x_2 = \frac{1}{\sqrt{\frac{k_2}{k_1}} + 1}. \quad (9)$$

Введем обозначения:

$$k_p^2 = \frac{k_1}{k_2}, \quad (10)$$

тогда

Литература

- Рамазанов А.Ш. Теоретические основы термогидродинамических исследований нефтяных пластов / Дис. ... докт. техн. наук. – Уфа, 2005.
- Филиппов А.И. Сквацинная термометрия переходных процессов / Автореф. дис. ... докт. техн. наук. – Тверь, 1996.
- Филиппов А.И. Сквацинная термометрия переходных процессов. - Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1989.
- Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М: Наука. – 1990. – 232 с.
- Тихонов А.Н., Арсенин В. Методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука. – 1986. – 287 с.

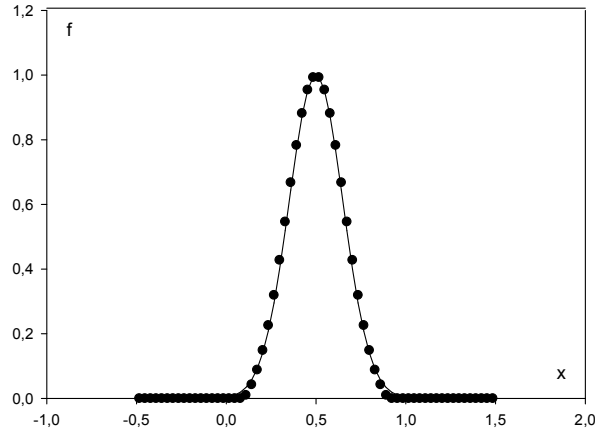


Рис.1. Распределение температуры в скважине

Достоверность расчетных значений контролировали, рассчитывая среднеквадратичную ошибку искомого решения:

$$\delta_f = \left[\frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N (f_\alpha(x_i) - f_T(x_i))^2 \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Приближенное решение уравнения (3) проводилось методом регуляризации Тихонова и при этом были получены следующие результаты:

погрешность правой части $\delta^2 = 10^{-6}$;

погрешность оператора $h^2 = 10^{-8}$;

невязка 0.00000131520546;

параметр регуляризации 0.00000197482152;

среднее квадратичное отклонение решения 0.132730576.

Численные результаты приведены на рисунке (1), где сплошной линией отмечено точное решение, а точками – приближенное решение.

Вывод

В задаче термометрии, связанной с распределением температуры в скважине, приводимой к обратной некорректной задаче, использование регуляризирующих алгоритмов А.Н. Тихонова позволяет получить вполне согласующиеся с практикой решения.

$$x_2 = \frac{k_p}{1 + k_p}. \quad (11)$$

Аналогично (8) константу равновесия k_p можно выписать в виде:

$$k_p = g e^{-\frac{Q}{RT}}, \quad g = \sqrt{\frac{k_1^0}{k_2^0}}, \quad Q = \frac{E_1 - E_2}{2}$$

В силу непрерывной зависимости k_p от температуры получаем:

$$\frac{dx_2}{dT} = \frac{k_p Q}{RT^2 (1 + k_p)^2}. \quad (12)$$

Пусть $T \in [T_{min}, T_{max}]$, $0 < T_{min} \leq T_{max}$. Рассмотрим случаи:

а) $Q < 0$. Тогда константа равновесия k_p , как функция температуры, всегда строго положительна. Следовательно,

$$\frac{dx_2}{dT} = \frac{k_p Q}{RT^2 (1 + k_p)^2} < 0 \Rightarrow \max_{[T_{min}, T_{max}]} x_2 = T_{min}.$$

б) $Q > 0$. По причине строгой положительности температуры, константы равновесия и других величин, входящих в выражение производной, получаем

$$\frac{dx_2}{dT} = \frac{k_p Q}{RT^2 (1 + k_p)^2} > 0 \Rightarrow \max_{[T_{min}, T_{max}]} x_2 = T_{max}.$$

с) $Q = 0$. В этом случае $k_p \equiv g$ и не зависит от температуры. Отсюда

$$\frac{dx_2}{dT} \equiv 0 \Rightarrow b - \frac{g}{1 + g} \Rightarrow \max_{[T_{min}, T_{max}]} x_2 = [T_{min}, T_{max}].$$

При подобном анализе задачи определения оптимальной температуры можно выделить три ситуации:

$$а) \quad Q < 0 \Rightarrow OT = T_{min},$$

$$б) \quad Q > 0 \Rightarrow OT = T_{max},$$

$$Q = 0 \Rightarrow OT = [T_{min}, T_{max}].$$

В ситуациях а) и б) оптимальная температура принимает постоянные значения, следовательно, целесообразно на практике применять реакторы идеального смешения. А в ситуации с) наблюдается изменение оптимальной температуры на некотором интервале. В этом случае экономически выгодно применять реактор идеального вытеснения.

Проведем анализ влияния неопределенности в кинетических параметрах на расчет оптимальной температуры. Пусть кинетические константы находятся в условиях неопределенности:

$$\underline{E}_i = E_i^{cp} - \Delta E_i \leq E_i \leq E_i^{cp} + \Delta E_i = \overline{E}_i,$$

$$\underline{k}_i^0 = (k_i^0)^{cp} - \Delta(k_i^0)^{cp} \leq k_i \leq (k_i^0)^{cp} + \Delta(k_i^0)^{cp} = \overline{k}_i^0.$$

Выведем условия на разброс в константах, позволяющие однозначно говорить о присутствии только одной из ситуаций а) – с). С этой целью проведем анализ неопределенности на качественную неизменность. Выделим два качества [3]:

- 1) оптимальная температура находится внутри интервала;
- 2) оптимальная температура находится только на границах интервала.

Введение качества эквивалентно введению следующих отношений эквивалентности:

$$V_1 \sim V_2 \Leftrightarrow \max_{V_1} \lambda(T) = \max_{V_2} \lambda(T),$$

$$V_1 \sim V_2 \Leftrightarrow \max_{V_1} \lambda(T) + \min_{V_1} \lambda(T) = \max_{V_2} \lambda(T) + \min_{V_2} \lambda(T).$$

Проведем исследование на качественную неизменность. Анализ случаев а) – с) показывает существование трех типов аргументов, доставляющих $\max x_2$:

$$V_1 = T_{\min}, \quad V_2 = T_{\max}, \quad V_3 = [T_{\min}, T_{\max}].$$

Отсюда следует, что все возможные значения оптимальной температуры являются качественно неизменными, так как ни один из возможных ответов задачи теоретической оптимизации не содержит внутренние точки температурного отрезка. Все множества V_i эквивалентны между собой в смысле качества, когда оптимальная температура находится внутри интервала. Тогда:

а) всякие интервальные значения кинетических констант являются множеством качественной неизменности;

б) при анализе местоположения температурного экстремума (на границе или внутри отрезка) точность определения несущественна.

Рассмотрим второе качество, когда оптимальная температура находится только на границах интервала. Исследуем множество значений минимумов функций $\lambda(T)$:

$$\min \lambda(T) \begin{cases} 1, & \text{если } V_1 = \{T_{\min}\} \text{ или } V_2 = \{T_{\max}\}, \\ 0, & \text{если } V_3 = [T_{\min}, T_{\max}]. \end{cases}$$

Отсюда,

$$\begin{aligned} \max_{V_1} \lambda(T) + \min_{V_1} \lambda(T) &= 2, \\ \max_{V_2} \lambda(T) + \min_{V_2} \lambda(T) &= 2, \end{aligned} \quad (16)$$

Для средней по объему датчика температуры T уравнение баланса тепла может быть записано в виде.

$$v \frac{dT}{dz} = \frac{\alpha S}{C} [f(z) - T(z)], \quad (1)$$

где

$f(z)$ – истинное распределение температуры по глубине z ;

v – скорость движения термометра, м/с;

α – коэффициент теплообмена между датчиком и средой, Вт/м²К;

S – площадь поверхности контакта датчика со средой, м²;

C – теплоемкость датчика, Дж/К.

Решение уравнения (1) при условии $T(0) = T_0$ имеет вид

$$T(z) = T_0 e^{-\frac{z}{v\tau}} + \frac{e^{-\frac{z}{v\tau}}}{v\tau} \int_0^z f(x) e^{\frac{x}{v\tau}} dx, \quad (2)$$

где $\tau = \frac{C}{\alpha S}$ – постоянная времени датчика температуры, с.

При известных v и τ выражения (1) и (2) можно использовать для решения обратных задач.

Уравнение (2) можно представить в виде

$$T(z) - T_0 e^{-\frac{z}{v\tau}} = \int_0^z f(x) K(z-x) dx, \quad (3)$$

здесь

$$K(z-x) = \frac{1}{v\tau} e^{-\frac{z-x}{v\tau}}.$$

Уравнение (3) представляет собой уравнение Вольтерры 1 рода типа свертки. Полученная обратная задача решается методом регуляризации Тихонова для интегрального уравнения типа свертки [3]. Для проверки и анализа описанной модели была использована программа. Для тестового расчета был рассмотрен частный случай, когда точное решение $f_\tau(x)$ задается нормированным распределением Гаусса:

$$f_\tau(x) = \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}} \exp[-\lambda^2 x^2],$$

где λ – параметр, характеризующий ширину распределения.

Расчет функции распределения температуры скважины

Бодулев²А.В., Усманов²А.С., Рамазанов¹А.Ш., Валиуллин¹Р.А.

Башкирский государственный университет, Россия (1)
Бирская государственная социально-педагогическая академия, Россия (2)

Аннотация

В статье рассматриваются постановка и решение обратной задачи скважинной термометрии. Она связана с распределением температуры в скважине в зависимости от глубины.

Введение

Для обеспечения рациональной разработки нефтяного месторождения требуется своевременная и достоверная диагностика нефтяных пластов и скважин на этапах их закачивания, эксплуатации и ремонта.

Обратные задачи скважинной термометрии являются некорректными по Тихонову. Физически неустойчивость решения объясняется тем, что при сильно различающихся параметрах пласта и около скважинного пространства можно получить слабо отличающиеся распределения температуры в стволе скважины. Поэтому при решении обратных задач скважинной термометрии используются различные способы регуляризации.

Измеренное и истинное распределение температуры в скважине

В настоящее время на практике при термических исследованиях скважины используются два способа измерения. По первому способу датчик температуры перемещается вдоль ствола скважины, при этом получают информацию об изменении температуры по глубине в определенном интервале. По второму - термометр устанавливается на определенной глубине и регистрируется изменение температуры во времени.

При регистрации нестационарного распределения температуры в точке и при регистрации термограммы вдоль ствола скважины при движении термометра за счет собственной теплоемкости температура датчика всегда будет отличаться от температуры жидкости вокруг датчика.

$$\max_{V_3} \lambda(T) + \min_{V_3} \lambda(T) = 1,$$

Из (16) следует, что множества V_1 и V_2 качественно неизменны по отношению к (14). Как видно из (16), не всякий интервальный ответ определяет множество качественной неизменности. Решением задачи этапа качественной неизменности является следующее утверждение:

Для того, чтобы $E_1^I \times E_2^I \times (k_1^0)^I \times (k_2^0)^I$ являлось множеством качественной неизменности, необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие:

$$|E_1^{cp} - E_2^{cp}| \geq \Delta E_1 + \Delta E_2, \quad (17)$$

причем, если

$$E_1^{cp} - E_2^{cp} \geq \Delta E_1 + \Delta E_2, \text{ то } OT = T_{max}, \quad (18)$$

$$E_2^{cp} - E_1^{cp} \geq \Delta E_1 + \Delta E_2, \text{ то } OT = T_{min}. \quad (19)$$

На самом деле, пусть $E_1^I \times E_2^I$ – множество качественной неизменности. Отображение φ в случае реакции $X_1 \rightleftharpoons X_2$ есть $\varphi: R^2 \rightarrow U$,

$$(E_1, E_2) \rightarrow V \in U = \{V_1, V_2, V_3\}.$$

Отношение (13) – (14) порождает два класса эквивалентности:

$$A_1 = \{V_1, V_2\}, A_2 = \{V_3\}.$$

Пусть $\varphi(E_1^I \times E_2^I) \subset A_1$. Если $\varphi(E_1^I \times E_2^I) = V_2$, то при всех значениях энергий активации $Q \neq 0$. Значит, это верно и для наименьших возможных значений:

$$Q = E_1^{cp} - E_2^{cp} - \Delta E_1 - \Delta E_2.$$

Отсюда вытекает неравенство (18). Соотношение (19) получится аналогичным путем в случае $\varphi(E_1^I \times E_2^I) = V_1$. Обобщением этих неравенств является неравенство (18).

Пусть выполняется условие (17). Рассмотрим условие (18)/ Так как $\Delta E_1 > 0, \Delta E_2 > 0$, то $\forall E_1 \in E_1^I, \forall E_2 \in E_2^I$:

$$E_1 - E_2 > E_1^{cp} - E_2^{cp} - \Delta E_1 - \Delta E_2 = (E_1^{cp} - E_2^{cp}) - (\Delta E_1 + \Delta E_2) > 0.$$

Учитывая таблицу значений оптимальной температуры в зависимости от $Q = E_1 - E_2$, получим:

$$OT = T_{max} \Rightarrow \varphi(E_1^I \times E_2^I) = V_2 \in A_1.$$

Рассмотрим выполнение условия (19):

$$E_1 - E_2 > E_1^{cp} - E_2^{cp} + \Delta E_1 + \Delta E_2 = (E_1^{cp} - E_2^{cp}) + (\Delta E_1 + \Delta E_2) < 0$$

$$\Rightarrow OT = T_{\min} \Rightarrow \varphi(E_1^I \times E_2^I) = V_1 \in A_1.$$

Тогда, если выполняется условие, являющееся объединением условий (18) – (19), то $OT(E_1^I \times E_2^I) = A_1$ находится в условиях качественной неизменности.

Второй этап неопределенности в рассматриваемом случае очевиден. Пусть $E_1 - E_2 < 0$. Тогда $OT(E_1, E_2) = T_{\max}$. Если же $E_1 - E_2 > 0$, то $OT(E_1, E_2) = T_{\min}$.

Таким образом, независимо от размеров области неопределенности по кинетическим параметрам, но в зависимости от местоположения разности энергий активаций, могут существовать лишь два интервальных решения:

$$Q^I > 0 \Rightarrow OT^I = [T_{\max}, T_{\max}],$$

$$Q^I < 0 \Rightarrow OT^I = [T_{\min}, T_{\min}].$$

Литература

1. Шокин Ю.И. Интервальный анализ. – Новосибирск: Наука, 1981. – 112 с.
2. Боресков Г.К. Катализ в производстве. – М.: Госхимиздат, 1954. – 348 с.
3. Мустафина С.А. Оптимизация равновесных процессов в условиях неопределенности по константам равновесия. // Труды Средневолжского математического общества. – 2006. – Т.8. – №1. – С. 282–287.

Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука. – 1990. – 232 с.

Тихонов А.Н., Арсенин В. Методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука. – 1986. – 287 с.

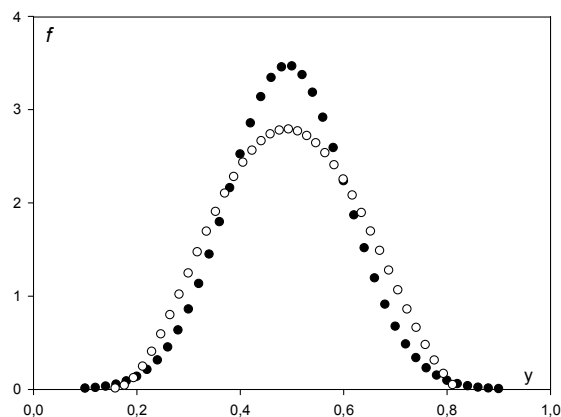


Рис.1. Дроссельный разогрев, ● – точное решение, ○ – приближенное решение

обратная задача нахождения приближенного решения $f_\alpha(y)$. Достоверность расчетных значений контролировали, рассчитывая среднеквадратичную ошибку искомого решения:

$$\delta_f = \left[\frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N (f_\alpha(y_i) - f_T(y_i))^2 \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Также были рассчитаны значения параметра регуляризации $\alpha = 1,88 \cdot 10^{-6}$ и значение невязки $1,53 \cdot 10^{-5}$.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ №08-01-97028-р_поволжье_a.

Литература

- Рамазанов А.Ш. Теоретические основы термогидродинамических исследований нефтяных пластов / Дис. ... докт. техн. наук. – Уфа, 2005.
 Филиппов А.И. Скважинная термометрия переходных процессов / Автореф. дис. ... докт. техн. наук. – Тверь, 1996.
 Филиппов А.И. Скважинная термометрия переходных процессов. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1989.

Расчет оптимального управления процесса димеризации α -метилстирола в каскаде реакторов

Байтимерова А.И., Мустафина С.А., Спивак С.И.

ИНК УНЦ РАН, Уфа, alb_bai@rambler.ru

Аннотация

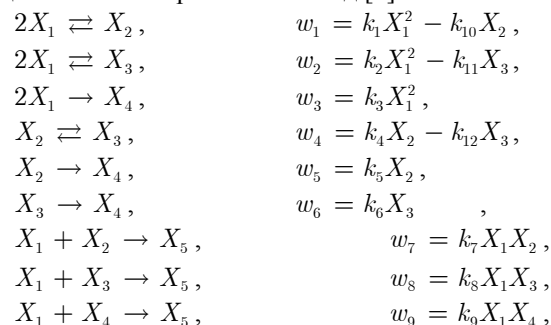
Построена математическая модель процесса димеризации α -метилстирола, учитывающая изменение реакционного объема в ходе химического превращения. Сформулирована задача оптимального управления химическим процессом в каскаде реакторов. Разработан вычислительный алгоритм и программа для расчета основных показателей процесса и управления.

Введение

Каталитический процесс димеризации α -метилстирола привлекает внимание исследователей тем, что его продукты являются ценным нефтехимическим сырьем. Наибольший интерес представляют димеры α -метилстирола. Линейные димеры – 4-метил-2,4-дифенилпентен-1 (α -димер) и 4-метил-2,4-дифенилпентен-2 (β -димер) – используются в качестве регуляторов роста полимерных цепей при получении пластификаторов полистирола и в качестве основы для синтетических смазочных масел [1]. Циклический димер (1,1,3-триметил-3-фенилпентан) используется как компонент реактивного топлива и сцинтилляторов, а также как пластификатор оргстекла. В ходе реакции образуется большое количество побочных соединений (триммеры), а в виду ее высокой экзотермичности при отсутствии соответствующего управления происходит коксование продуктов, что может привести в негодность действующий реактор. Поэтому актуальным является поиск оптимального управления процесса в каскаде реакторов с целью получения максимального выхода целевых продуктов.

Математическая модель процесса димеризации α -метилстирола

Схема химических превращений и уравнений скоростей стадий реакции димеризации α -метилстирола имеют вид [2]:



где X_i – концентрация i компонента, кмоль/м³ (индексы: 1– α -метилстирол, 2– α -димер, 3– β -димер, 4– циклический димер, 5– тримеры); константы скоростей k_i , $i = \overline{1,12}$ зависят от температуры T , исходя из уравнения Аррениуса.

Процесс протекает с изменением количества молей реакционного объема, согласно закону сохранения массы суммарный материальный баланс в этом случае имеет вид:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{d(Cx_i)}{dt} = \sum_{j=1}^n \nu_{ij} w_j, \quad i = \overline{1,5}, \quad (1)$$

с начальными условиями:

$$x_i(0) = x_i^0, \quad C(0) = C_0, \quad (2)$$

где $x_i = \frac{C_i}{C}$ – концентрация i -го компонента в мольных долях, $i = \overline{1,m}$, w_j – скорость j реакции, определяемая по закону действующих масс.

Поскольку реакция протекает в жидкой фазе, то систему уравнений (1) замыкает условие нормировки по компонентам жидкой фазы:

$$\sum_{i=1}^m x_i = 1. \quad (3)$$

Начальная мольная плотность жидкости (начальная суммарная концентрация) C_0 постоянна при любых температурах. Тогда можно разделить (1) на C_0 . Получим систему дифференциальных уравнений

друг от друга функции $f(r)$ могут дать близкие распределения температуры в скважине $T(z)$.

Уравнение (1) относится к интегральным уравнениям Фредгольма первого рода. Наиболее развитым и эффективным методом решения уравнения Фредгольма первого рода является метод регуляризации Тихонова [4]. В связи с этим в данной работе была предпринята попытка применить метод регуляризации Тихонова для восстановления профиля дроссельного разогрева.

Для более точного решения обратной задачи был применен переход к логарифмическим координатам, т.е. произведена замена переменной $s = \log(z)$, $y = \log(x)$. В результате преобразований получено следующее интегральное уравнение

$$T(0, s) = \int_0^{\infty} f(y) \frac{10^{2y+s} \ln(10)}{(10^{2y} + 10^{2s})^{\frac{3}{2}}} dy,$$

$$\text{где } K(s, y) = \frac{10^{2y+s} \ln(10)}{(10^{2y} + 10^{2s})^{\frac{3}{2}}}$$

Для решения обратной задачи использованы алгоритмы численного решения интегральных уравнений Фредгольма первого рода на ЭВМ, разработанные на основе метода регуляризации Тихонова. При этом в качестве приближенного решения применяется регуляризованное решение $f_\alpha = R(\alpha, T_\delta(s))$, то есть функция $f_\alpha(y)$, на которой достигается минимум сглаживающего функционала А.Н. Тихонова

$$M_\alpha[f] = \int_c^d \left[\int_a^b f(y) K(s, y) dy - T_\delta(s) \right]^2 ds + \alpha \int_a^b \left[f^2 + \left(\frac{df}{dy} \right)^2 \right] dy$$

где α – параметр регуляризации, $\alpha > 0$.

Для проверки и анализа описанной модели была использована программа. Для тестового расчета был рассмотрен частный случай, когда точное решение $f_T(y)$ задается нормированным распределением Гаусса:

$$f_T(y) = \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}} \exp[-\lambda^2 y^2],$$

где λ – параметр, характеризующий ширину распределения.

Затем с учетом погрешности конечно-разностной аппроксимации (для правой части $\delta^2 = 10^{-5}$, для ядра уравнения $h^2 = 10^{-8}$) решается

Численное решение обратной задачи термозондирования пласта

А.В. Бодулев², А.С. Усманов², А.Ш. Рамазанов¹, Р.А. Валиуллин¹

Башкирский государственный университет, Россия (1)

Бирская государственная социально-педагогическая академия, Россия (2)

Аннотация

В статье рассматриваются постановка и решение обратной задачи скважинной термометрии.

Задача термозондирования пласта

В зумпфе скважины ниже работающих пластов на термограммах фиксируется зона нарушения геотермы. Дроссельный разогрев значительно изменяет температуру пласта только вблизи призабойной зоны. Максимальная величина разогрева приходится на стенку скважины и разогрев убывает в пласте с удалением от скважины. Часть потока тепла от пласта в результате уходит в радиальных направлениях. Тогда распределение температуры в зумпфе скважины должно быть связано с характером дроссельного разогрева в самом пласте [1].

Между распределением температуры в пласте и распределением температуры в подстилающих пласт породах существует взаимосвязь, выражающаяся интегральным уравнением Фредгольма первого рода:

$$T(z) = \int_0^{\infty} f(x) \frac{zx}{(z^2 + x^2)^{\frac{3}{2}}} dx, \quad (1)$$

где ядро интегрального уравнения (1) $K(z, x) = \frac{zx}{(z^2 + x^2)^{\frac{3}{2}}}$.

Решение обратной задачи (1) может быть использовано, для восстановления профиля дроссельного разогрева $f(r)$ в ближней к скважине зоне пласта по распределению температуры в зумпфе скважины $T(z)$. Очевидно, что задача эта является некорректной [4], неустойчивость решения обратной задачи обусловлена тем, что сильно различающиеся

$$\frac{d(Nx_i)}{dt} = \sum_{j=1}^9 \nu_{ij} W_j, \quad i = \overline{1,5}, \quad (4)$$

где $N = \frac{C}{C_0}$ – относительное изменение числа молей реакционной среды; $W_j = \frac{w_j}{C_0}$ – приведенные скорости химических реакций, $j = \overline{1,9}$.

Обозначим

$$F_i = \sum_{j=1}^n \nu_{ij} W_j, \quad i = \overline{1,5}. \quad (5)$$

Преобразуем левую часть системы уравнений (4), применив правило дифференцирования произведения функций:

$$\frac{d(Nx_i)}{dt} = N \frac{dx_i}{dt} + x_i \frac{dN}{dt}. \quad (6)$$

С учетом (5) и (6) система (4) примет вид:

$$N \frac{dx_i}{dt} + x_i \frac{dN}{dt} = F_i. \quad (7)$$

Отсюда с учетом условия нормировки (3) получим

$$\frac{dN}{dt} = F_n, \quad F_n = \sum_{j=1}^n \gamma_j W_j.$$

Выразим $\frac{dx_i}{dt}$ из выражения (7). Тогда система уравнений (1) примет вид системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{F_i - x_i F_n}{N}, \quad i = \overline{1,m}, \quad (8)$$

$$\frac{dN}{dt} = F_n(x, T)$$

с начальными условиями:

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1,m}, \quad N(0) = 1. \quad (9)$$

Функции F_n, F_i выписываются с учетом матрицы стехиометрических коэффициентов.

Полученная система уравнений (8) с начальными условиями (9) является кинетической моделью сложной реакции, учитывающей изменение числа молей в ходе ее проведения, которая определяет систему уравнений материального баланса. Для математического описания процесса в конкретном реакторе необходимо систему уравнений материального баланса дополнить уравнениями теплового баланса.

Таким образом, математическая модель процесса димеризации а-

метилстирола в реакторе идеального смешения (РИС) представляется системой:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \frac{F_i - x_i F_N}{N}, \quad i = \overline{1, 5}, \quad F_i = \frac{G_k}{V_r} \sum_{j=1}^9 \nu_{ij} W_j, \\ \frac{dN}{dt} &= F_N, \quad F_N = \frac{G_k}{V_r} \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^9 \nu_{ij} W_j, \\ C_p \frac{dT}{dt} &= \frac{G_k}{V_r} \sum_{j=1}^9 Q_j W_j + \frac{\alpha_x S_x}{C_0} (T_x - T), \end{aligned} \quad (10)$$

с граничными условиями при $t = 0$: $x_i = x_i^0, N = N^0, T = T^0, T_x = T_x^0$, где G_k – насыпной вес катализатора, %; V_r – объем реакционного пространства, м³.

Математическая модель процесса в реакторе идеального вытеснения (РИВ) представляется системой:

$$\begin{aligned} \frac{\vartheta dx_i}{S dl} &= \frac{F_i - x_i F_N}{N}, \quad i = \overline{1, 5}, \\ \frac{\vartheta dN}{S dl} &= F_N, \\ \frac{C_p \vartheta dT}{S dl} &= \frac{G_k}{V_r} \sum_{j=1}^9 Q_j W_j + \frac{\alpha_x S_x}{C_0} (T_x - T), \end{aligned} \quad (11)$$

с граничными условиями при $l = 0$: $x_i = x_i^0, N = N^0, T = T^0, T_x = T_x^0$.

Экспериментально получено [2], что температура в реакторе должна находиться в ограничениях от 30°C до 130°C.

Формулировка задачи оптимизации

Математическая модель каталитического процесса с переменным реакционным объемом в каскаде из R реакторов представляется системой уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i^j}{d\xi^j} &= f_i^j(x, T, T_x), \quad i = \overline{1, N+1}, \quad 0 \leq \xi^j \leq \Xi^j, \\ \frac{dT^j}{d\xi^j} &= f_{N+2}^j(x, T, T_x), \quad j = \overline{1, R}, \\ x_i^1(0) &= x_i^0, \quad T^1(0) = T^0, \\ x_i^{j+1}(0) &= x_i^j(\Xi^j), \quad T^{j+1}(0) = T^j(\Xi^j), \end{aligned} \quad (12)$$

11. Нигматулин Р.И., Саяхов Ф.Л., Ковалева Л.А. Перекрестные явления переноса в дисперсных системах, взаимодействующих с высокочастотным электромагнитным полем // ДАН. 2001. – Т.377. – №3. – С.340–343.
12. Саяхов Ф.Л., Ковалева Л.А., Насыров Н.М. Изучение особенностей тепло-массообмена в призабойной зоне скважин при нагнетании растворителя с одно-временным электромагнитным воздействием // ИФЖ. 1998. – Т.71. – №1. – С.161–165.
13. Abernethy E.R. Production in ease of heavy oils by electromagnetic heating // J. Can. Petrol. Technol. 1976. – 15. – №3. – P.91–97.
14. Саяхов Ф.Л., Ковалева Л.А., Насыров Н.М., Галимбеков А.Д. Влияние высо-кочастотного электромагнитного поля на перекрестные эффекты переноса в многокомпонентных системах // Магнитная гидродинамика. 1998. – Т.34. – №2. – С.148–157.
15. 6. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. –336 с.

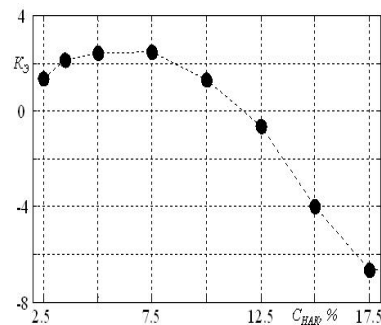


Рис. 2. Изменение коэффициента энергетического баланса от доли заполнения порового пространства на этапе закачки

заметно больше, чем первоначальный расход на этапе закачки. Это связано с отбором смеси маловязкого растворителя и нефти и, следовательно, большей подвижностью жидкости в околоскважинной зоне. Дебит добываемой нефти, который определялся соответственно из дебита жидкости и текущих массовых концентрации фаз [6].

Оценка энергетического баланса осуществляется в виде коэффициента $K_э$, равного отношению получаемой в результате ВЧ нагрева дополнительно добытой энергии и потребленной энергии из-за работы ВЧ генератора.

На рис. 2 приведены результаты оценки коэффициента энергетического баланса в зависимости от относительного порового объема, заполненного растворителем при различных вариантах воздействия. Проведенный расчетный анализ показал, что наиболее эффективной и рентабельной является циклическое воздействие с заполнением растворителем от 5 до 7.5% порового пространства.

В результате математического моделирования получены оценки оптимального объема смешивающегося агента, длительностей этапов воздействия; показана эффективность и рентабельность технологии с точки зрения энергетического баланса.

Список литературы

- Саяхов Ф.Л., Ковалева Л.А., Фатыхов М.А., Халиков Г.А. Способ добычи по-лезных ископаемых. Патент РФ № 1824983 // Б.И. 1997. – № 29.

где x_i^j – мольная доля i реагента в j реакторе, $i = \overline{1, N}$, $j = \overline{1, R}$; x_{N+1}^j – относительное изменение числа молей реакционной среды в j реакторе; ξ^j – время пребывания в j реакторе для реактора идеального смешения или длина j реактора для реактора идеального вытеснения; T^j – температура реакционной смеси в j реакторе; $T_x = T_x(\xi^j)$ – температура хладагента. Ограничения на температуру реакционной смеси и температуру хладагента могут иметь вид:

$$T_*^j \leq T(\xi^j) \leq T^{*j}, \quad (13)$$

$$T_{x*}^j \leq T_x(\xi^j) \leq T_x^{*j}, \quad (14)$$

где $T_{x*}^j, T_x^{*j}, T_*^j, T^{*j}$ – нижняя и верхняя допустимые границы температур хладагента и смеси соответственно, которые могут быть заданы из технологических соображений.

В качестве критерия оптимизации рассматривается функция

$$Q(x, T, T_x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i x_i, \quad (15)$$

выражающая максимальный выход целевых продуктов или минимальное содержание примесей в зависимости от коэффициентов λ_i (положительных или отрицательных). Тогда задачу оптимального управления сформулируем следующим образом. Для системы уравнений (12) с фазовыми ограничениями (13) найти оптимальное управление T_x с учетом (14), доставляющее экстремум целевой функции (15).

Одним из методов решения поставленной задачи является метод динамического программирования [3], который сводит исходную задачу к задаче нахождения оптимального режима в каждом отдельном реакторе с различными начальными данными и режимными параметрами. Решение задачи оптимизации в отдельном реакторе проведем на основе принципа максимума Понтрягина [4].

Для каждого реактора (при фиксированном j) последовательно составляем гамильтониан

$$H(y(\xi), \psi(\xi), u(\xi)) = \sum_{i=1}^{N+2} \psi_i(\xi) f_i(y, u) \quad (16)$$

и систему канонических уравнений

$$\frac{d\psi_i}{d\xi} = -\frac{\partial H(y, \psi, u)}{\partial y_i}, \quad i = \overline{1, N+2} \quad (17)$$

с краевыми условиями

$$\psi(\Xi) = \psi^\Xi. \quad (18)$$

Решение двухточечной краевой задачи (12)-(18) определяется из условия максимума функции $H(y, \psi, u)$.

Вычислительный эксперимент

По результатам теоретической оптимизации процесса на основе кинетической модели выявлено, что на входе в реактор следует подать подогретый хладагент и затем значительно снизить температуру хладагента (Рис.1). Для реализации полученного температурного режима эффективнее использовать комбинации реакторов, поскольку при такой организации не потребуются больших затрат на изменение температуры хладагента.

Расчеты проводились для различных каскадных схем, составленных из реакторов смешения и вытеснения, поскольку теплосъем в этих реакторах осуществляется различными способами. Результаты вычислительного эксперимента показали, что целесообразно использовать каскад из реакторов смешения, вытеснения и комбинацию РИС+РИВ. Именно эти каскады позволяют регулировать температуру реакционной среды в пределах технологических ограничений и обеспечивают высокий выход целевых продуктов, по сравнению с результатами в одиночных реакторах (Рис.2-4).

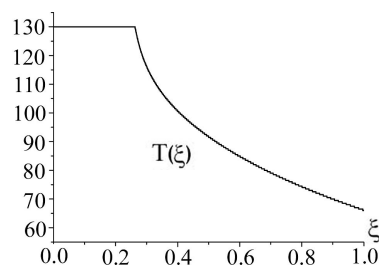


Рис.1. Теоретический оптимальный температурный режим.

ды» и осуществляемым воздействием в соответствии с описанной выше технологией.

Анализ результатов расчетов

Система уравнений (1) – (6) решалась численно методом конечных разностей по неявной схеме.

В качестве иллюстрации на рис. 1 приведена динамика изменения температуры на забое скважины; расхода растворителя, отбора жидкости и нефти на соответствующих этапах воздействия при заполнении растворителем 5% от общего порового пространства. Наблюдается монотонный рост температуры на забое скважины на протяжении всего времени воздействия, т.к. из-за низкой подвижности пластовой нефти и приемистости пласта невозможно добиться высоких скоростей движения флюида в скважине. На этапе выдержки в скважине отмечается снижение температуры на забое и устье вследствие потерь тепла в окружающие породы. На этапе отбора происходит частичный «вынос» тепла из пласта вместе с добываемым флюидом, т.к. к скважине подходит холодная нефть из непрогретой части пласта.

В начальный момент отбора дебит жидкости быстро снижается (рис. 1б), затем снижение замедляется и продолжает снижаться в течение всего времени отбора. Расход отбираемой жидкости в этом случае

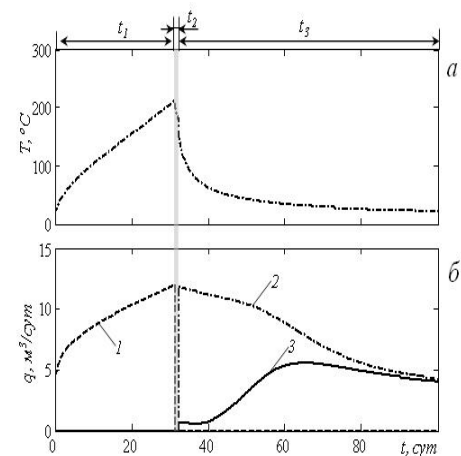


Рис. 1. Динамика изменения температуры на забое скважины, расхода растворителя (1), отбора смеси нефти с растворителем (2) и нефти (3)

$$\omega = \frac{Q}{\pi \cdot R_1^2} \quad \begin{array}{l} 0 \leq r \leq R_1, \\ 0 \leq z \leq Z_1 \end{array} \quad (5)$$

Здесь $j = 1, 2$ – индексы компонентов для растворителя и нефти, соответственно; P, T, C_j – давление, температура, концентрация компонентов смеси; r_e – граница залежи по координате r ; ρ_f, \tilde{n}_f – плотность и удельная теплоемкость смеси компонентов; α, λ – объёмная теплоемкость и теплопроводность среды; m – пористость продуктивного пласта; k_r, k_z – проницаемость продуктивного пласта по оси r и z ; β_f, β_m – коэффициенты сжимаемости смеси компонентов и скелета породы; D_0, D_r, D_z – коэффициенты молекулярной диффузии, конвективной диффузии по оси r и z ; l_r, l_z – параметры рассеивания пористой среды вдоль и поперек напластования; v – скорость фильтрации в пласте; ω – скорость течения жидкости в НКТ; α_r, α_r^e – параметры термодиффузии и электротермодиффузии; μ_f – вязкость смеси компонентов.

При решении задачи полагается, что продуктивный пласт изотропен по оси z поэтому уравнение (1) и (2) принимаются в одномерной постановке. В этом случае, как показали тестовые расчеты, распределение давления и концентрации по координате z на результаты вычислений существенного влияния не оказывают. В то же время учет переноса тепла в кровлю и подошву оказывает существенное влияние на распределение температуры в пласте. Поэтому уравнение (3) решается в двухмерной постановке.

Энергетическое взаимодействие ЭМ поля со средой обуславливает возникновение распределенных по объему пласта источников тепла. Выражение для плотности источников тепла в пласте и в скважине в виде экспоненциальной зависимости [3].

Расход закачиваемого агента Q может быть определен по выражению [4]:

$$Q = \sum_k Q_k, \quad Q = Q_0 \frac{\mu_{20} \left(\ln \frac{r_e}{r_w} - \frac{1}{2} \frac{(r_e^2 - r_w^2)}{r_e^2} \right)}{\int_{r_w}^{r_e} \frac{\mu_f(r)}{r} dr - \int_{r_w}^{r_e} \frac{r \cdot \mu_f(r)}{r_e^2} dr}, \quad (6)$$

где Q_0 – первоначальный, до ВЧ воздействия, расход флюида в k -ом пропластке; μ_{20}, μ_f – первоначальная вязкость нефти и текущая вязкость смеси компонентов.

Начальные и граничные условия определялись с учетом согласования системы «скважина – пласт – окружающие скважину и пласт поро-

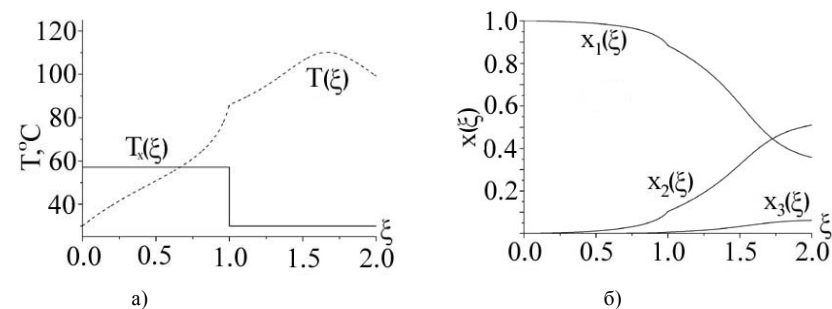


Рис.2 Решение задачи оптимизации с критерием – максимальный выход X_2 в каскаде реакторов РИС+РИС: а) температурный режим; б) изменение концентраций реагентов.

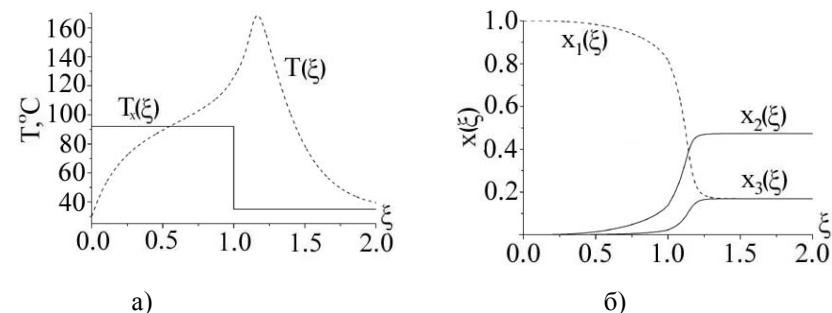


Рис.3 Решение задачи оптимизации с критерием – максимальный выход X_2 в каскаде реакторов РИВ+РИВ: а) температурный режим; б) изменение концентраций реагентов.

Расчеты проводились для различных каскадных схем, составленных. Для расчета оптимального температурного профиля в каскаде реакторов разработана программа, позволяющая: по механизму реакции генерировать кинетическую модель; задавать каскадную схему реакторов и режимные параметры; компилировать библиотеку dll-формата, содержащую математическую модель процесса в выбранном каскаде; производить расчет процесса различными явными и неявными методами решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений; находить оптимальный температурный режим методом итераций в пространстве управлений или методом Ньютона. Программа обладает удобным дружественным интерфейсом, написана на языке Pascal в среде программирования Borland Delphi 7.0.асчеты проводились для различных каскад-

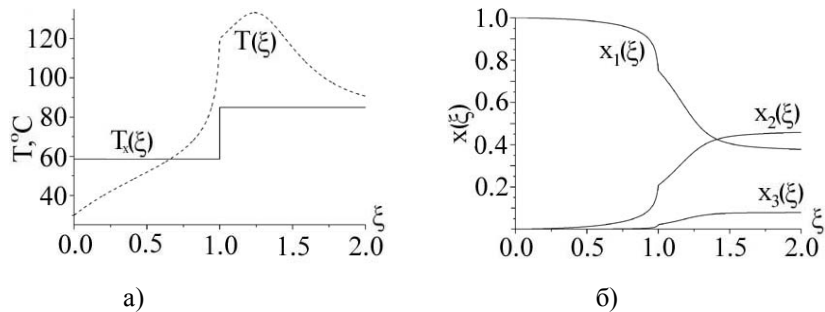


Рис.4 Решение задачи оптимизации с критерием – максимальный выход X_2 в каскаде реакторов РИС+РИВ: а) температурный режим; б) изменение концентраций реагентов.

ных схем, составленных из реакторов смешения и вытеснения, поскольку теплосъем в этих реакторах осуществляется различными способами. Результаты вычислительного эксперимента показали, что целесообразно использовать каскад из реакторов вытеснения. Именно этот каскад позволяет регулировать температуру реакционной среды в пределах технологических ограничений и обеспечивает высокий выход целевых продуктов, по сравнению с результатами в одиночных реакторах.

Литература

1. Isakov Ja., Litvin E., Minachev Ch. et al. Method of preparing unsaturated dimmers of α -methylstyrene // Stud. Surf. Sci. Catal. – 1994. – V. 84. – P.2005.
2. Григорьева Н.Г., Хазипова А.Н., Балаев А.В., Кутепов Б.И., Губайдуллин И.М. Кинетическая модель олигомеризации α -метилстирола в присутствии цеолита NaHY // Труды междунар. конф. – Уфа: Гилем, 2003. – Т.3. – С. 89-93.

для того или иного варианта расчета нефти сопоставляется все произведенные при использовании данной технологии затраты [3].

Математическая модель

При моделировании процесса нагнетания растворителя в добывающую скважину с одновременным ВЧ ЭМ воздействием используется цилиндрическая система координат с аксиальной симметрией относительно оси z , совпадающей с осью скважины и направленной сверху вниз. Скважина, продуктивный пласт и окружающие их породы представляют собой многослойную расчетную среду, включающую 6 слоев по координате r и 3 слоя по координате z .

Рассматривается нестационарная работа скважины, вскрывающей нефтяной пласт, состоящий из нескольких гидродинамических изолированных слоев с одинаковыми фильтрационными параметрами, процесс обработки призабойной зоны пласта ЭМ полем с одновременной закачкой смешивающегося агента (растворителя). При постановке задачи учитываются явления термодиффузии и электротермодиффузии (термодиффузии ЭМ происхождения), проявляющиеся в многокомпонентной системе при взаимодействии с внешним полем [2].

Рассматриваемые процессы в каждом в слое описываются следующей системой уравнений:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{k_r}{m\beta_f + \beta_m} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{\mu_f} \frac{\partial P}{\partial r} \right) + \frac{k_z}{m\beta_f + \beta_m} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\mu_f} \frac{\partial P}{\partial z} \right), \quad \begin{matrix} r_w \leq r \leq r_e, \\ Z_1 \leq z \leq Z_2; \end{matrix} \quad (1)$$

$$m \frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_r \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) - v \frac{\partial C_i}{\partial r} - \omega \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\alpha_r + \alpha_r^e) D_0 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left((\alpha_r + \alpha_r^e) D_0 \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad \begin{matrix} r_w \leq r \leq r_e, \\ Z_1 \leq z \leq Z_2; \end{matrix} \quad (2)$$

$$D_r = D_0 + l_r v, \quad D_z = D_0 + l_z v, \quad C_1 + C_2 = 1.$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\alpha \cdot r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - v \frac{\rho_f c_f}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial r} - \omega \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{q}{\alpha} \quad \begin{matrix} 0 \leq r \leq r_e, \\ 0 \leq z \leq Z_3; \end{matrix} \quad (3)$$

$$v = - \frac{k_r}{\mu_f} \frac{\partial P}{\partial r} \quad \begin{matrix} r_w \leq r \leq r_e, \\ Z_1 \leq z \leq Z_2; \end{matrix} \quad (4)$$

Оптимизация комбинированного воздействия на залежь высоковязкой нефти электромагнитным излучением со смешивающимся вытеснением

Ковалева Л.А., Давлетбаев А.Я.

БашГУ, Уфа, kafedraPF@rambler.ru

Введение

Одним из возможных методов интенсификации добычи при разработке месторождений с высоковязкой нефтью может быть закачка в скважину маловязкого растворителя в сочетании с воздействием на пласт ВЧ ЭМ поля [1]. Данная технология предполагает циклическое трехэтапное воздействие на добывающую скважину.

На первом этапе проводится ВЧ нагрев с одновременной закачкой маловязкого растворителя. При этом энергия распространяющихся ЭМ волн из-за диэлектрических потерь в среде преобразуется в тепловую энергию. В результате происходит повышение пластовой температуры и уменьшение вязкости пластовой жидкости в околоскважинной области. Между тем, при распространении ЭМ волн от устья скважины к забою в связи с конечной электропроводностью труб – обсадной колонны и насосно-компрессорной трубы (НКТ) – в них выделяется тепло. Поэтому с нагнетаемым растворителем в пласт попадает значительное дополнительное количество тепла. Таким образом, растворитель, который вытесняет углеводороды с забоя скважины в пласт и смешивается с ними, попадает в пласт в нагретом состоянии, а предлагаемый способ позволяет максимально использовать энергию расположенного на устье скважины ВЧ генератора. На втором этапе осуществляется выдержка скважины без нагрева для перераспределения давления в пласте, на третьем – отбор пластовой жидкости без воздействия.

В данной работе проведены многовариантные расчеты с целью выбора оптимального количества закачиваемого растворителя на первом этапе воздействия с помощью расчетов энергетического баланса, согласно которой энергетическому эквиваленту дополнительно добытой

Численное решение обратной задачи молекулярно-массового распределения полимеризатов диаллилизифталата

Исмаилов Р.Р., *Сивергин Ю.М., Усманов С.М.

Бирская государственная социально-педагогическая академия, г.Бирск
Институт химической физики им. А.Н. Семенова РАН, г.Москва
E-mail: EsmRauf@mail.ru

Аннотация

В работе проведено численное решение обратной задачи молекулярно-массового распределения в ходе трехмерной свободнорадикальной полимеризации диаллилизифталата. В качестве соответствующего интегрального уравнения Фредгольма первого рода использована кинетически обоснованная функция распределения Шульца-Флори.

В общем виде обратная задача молекулярно-массового распределения (ММР) сводится к интегральному уравнению Фредгольма первого рода:

$$q_w(M) = \int_0^{\infty} \varphi(\lambda) K(\lambda, M) d\lambda, \quad (1)$$

где ядро $K(\lambda, M)$ - есть функция, отражающая конкретный механизм полимеризационного процесса, λ - статистический параметр полимеризации Френкеля, $\varphi(\lambda)$ - искомая функция распределения центров полимеризации, $q_w(M)$ - экспериментальная кривая ММР изучаемого полимерного образца, определенная со среднеквадратичной ошибкой δ .

Восстановление функции распределения $\varphi(\lambda)$ по приближенным значениям экспериментальной кривой ММР $q_w(M)$ является признаком обратной задачи. Сложность численного решения интегрального

уравнения (1) относительно $\varphi(\lambda)$ заключается в том, что оно относится к классу некорректно поставленных задач [1,2], где малым возмущениям входного параметра $q_w(M)$ могут соответствовать как угодно большие отклонения решения $\varphi(\lambda)$.

В случае классической радикальной полимеризации гибель активных центров протекает по бимолекулярному механизму, т.е. с участием стадий реакции диспропорционирования и реакции рекомбинации. Кроме этого вносит свой вклад реакции передачи цепи на мономер или на другой низкомолекулярный агент. Если рассматривать частный случай – только одну реакцию рекомбинации полимерных радикалов, то не трудно получить, что ядро уравнения (1) описывается выражением [3]:

$$K(\lambda, M) = \lambda^3 M^2 \exp(-\lambda M). \quad (2)$$

Если одновременно действуют несколько механизмов обрыва цепи, то образовавшийся в ходе радикальной полимеризации макромолекул следует разбить на две группы:

- полимерные цепи, возникшие в результате любого обрыва цепи (кроме реакции рекомбинации). Пусть доля этих макромолекул в полимере составляет $-p$;
- полимерные цепи, возникшие в результате реакции рекомбинации, с долей $(1-p)$, соответственно.

Тогда ядро интегрального уравнения (1) в случае продуктов радикальной полимеризации описывается нормированной функцией распределения Шульца-Флори [1]:

$$K(\lambda, M) = \frac{p}{2-p} \lambda^2 M \exp(-\lambda M) + \frac{1-p}{2-p} \lambda^3 M^2 \exp(-\lambda M). \quad (3)$$

На практике обратную задачу ММР целесообразно рассматривать в логарифмических координатах, т.е. переходя к новым переменным $x = \ln M$ и $s = \ln \lambda$, интегральное уравнение (1) можно представить в виде:

$$q_w(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(s) K(s, x) ds, \quad (4)$$

где $K(s, x)$ - ядро интегрального уравнения (4).

Соответствующие функции распределения центров полимеризации $\varphi(\lambda)$ и $\psi(s)$ взаимосвязаны условием нормировки:

ние кинетики сорбции. Особенностью предложенной математической модели является учет в последнем уравнении тепловой и электромагнитной составляющих поля.

Результаты расчетов показали хорошее соответствие с экспериментальными данными, а именно: воздействие поля существенно интенсифицирует процесс десорбции поверхностно-активных компонентов нефти, причем это вызвано не только тепловым действием поля, но, в большей степени, его «силовым» взаимодействием с адсорбированными полярными компонентами нефти.

Таким образом, предлагаемый способ извлечения нефти будет способствовать ее более полному вытеснению из пласта. Результаты исследований могут найти применение при обосновании принципиально новых наукоемких технологий применения воздействия ВЧ ЭМ полей, в частности, в процессах добычи нефти с учетом адсорбционного взаимодействия ее поверхностно-активных компонентов с поверхностью породы.

Список литературы

- Галимбеков А.Д., Ковалева Л.А. Некоторые аспекты взаимодействия электромагнитных полей с поляризующимися средами. – Уфа: РИО БашГУ, 2004.
- Саяхов Ф. Л. Фатыхов М. А., Насыров Н.М. Исследование высокочастотного нагрева призабойной зоны битумного пласта. – Уфа: 1979. – 37 с. (Деп. Ао ВНИИОЭНГ, №636).
- Николаевский В.Н. и др. Движение углеводородных смесей в пористой среде. М.: Недра, 1968. 268 с.

Воздействие высокочастотного электромагнитного поля на процессы сорбции в многокомпонентных средах

Ковалева Л.А., Галиева Л.Н.

БаилГУ, Уфа, kafedraPF@rambler.ru

В настоящее время в значительной мере добывают нефти, обладающие высокой вязкостью, и содержащие, как правило, большое количество парафина и асфальтено-смолистых веществ (АСВ) с высокой сорбционной способностью. Для решения проблемы добычи таких нефтей предлагаются различные методы, в том числе воздействие высокочастотным электромагнитным полем [2].

С электродинамической точки зрения, нефти являются немагнитными диэлектриками со слабой проводимостью, причем дисперсия диэлектрической проницаемости этих материалов по частоте обуславливается ориентационной поляризацией входящих в их состав полярных молекул (АСВ). Особенностью взаимодействия ВЧ ЭМ полей с дисперсными системами является запаздывание поляризационных процессов по сравнению с изменением параметров быстропеременного поля. В результате процесс поляризации становится неравновесным и сопровождается интенсивным поглощением энергии поля и преобразованием его в тепло, что кроме понижения вязкости жидкости, способствует десорбции полярных компонентов нефти [1]. Еще большего эффекта можно добиться, комбинируя процесс ЭМ воздействия с закачкой растворителя.

Исходя из вышеизложенного, рассматривается модель фильтрации многокомпонентной среды в ВЧ ЭМ поле с учетом кинетики сорбции. При математическом моделировании предполагается, что в нефтяной пласт, насыщенный высоковязкой нефтью, осуществляется нагнетание растворителя с одновременным воздействием ВЧ ЭМ полем. При этом, как показали экспериментальные исследования, происходит не только интенсификация процессов диффузионного переноса вещества за счет электротермодиффузионных эффектов, но и дополнительная десорбция полярных асфальтено-смолистых компонентов нефти, вызванная их взаимодействием с накладываемым ВЧ ЭМ полем.

Общая система уравнений, описывающих этот процесс, включает в себя уравнение теплопроводности, уравнение переноса массы и уравне-

$$\int_0^{\infty} \varphi(\lambda) d\lambda = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(s) ds = 1, \quad (5)$$

где $\psi(s) = \lambda \varphi(\lambda)$.

Перевод переменных уравнения (1) к логарифмическим координатам обусловлен по ряду причин. Во-первых, экспериментальная кривая ММР определяется в координатах $q_w - \ln M$; во-вторых, что более важно, модальность кривых ММР наиболее отчетливо проявляется в логарифмических шкалах, а использование равномерной дискретизации при численном решении уравнения (1) приводит к потере информации в области низких молекулярных масс.

Переход к переменным $s = \ln \lambda$ и $x = \ln \lambda$ приводит в случае радикальной полимеризации к видоизмененной обратной задаче ММР:

$$q_w(p, x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(s) \cdot K(p, s, x) ds, \quad (6)$$

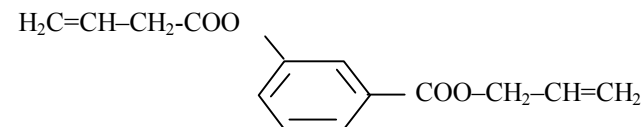
где нормированное ядро интегрального уравнения (6) имеет вид:

$$K(p, s, x) = \frac{p}{2-p} \exp[2(x+s) - \exp(x+s)] + \frac{1-p}{2-p} \exp[3(x+s) - \exp(x+s)], \quad (7)$$

где $\psi(s)$ – искомая функция распределения.

Подробная методика численного решения обратной задачи формирования ММР (6) с помощью алгоритмов метода регуляризации Тихонова приведена в работах [1,2]. Расчеты функции $\psi(s)$ проводились с использованием программного обеспечения, описанного в [4,6].

В качестве объектов исследования служил полимеризат диаллилзофталата (ДАИФ):



Полимеризацию ДАИФ проводили при температуре 80 °С в присутствии перекиси бензоила (ПБ) в качестве инициатора в количестве 0,5% по массе. Более детально синтез ПДАИФ представлен в работе [9].

В случае трехмерной радикальной полимеризации полимеризационноспособных олигомеров (олигоэфиракрилаты и др.) и тетрафункциональных мономеров (ПСО) формируется одна трехмерная макромолеку-

ла. В работах по изучению процесса полимеризации ПСО отсутствует информация о молекулярно-массовом распределении [9].

Отличительной особенностью процесса полимеризации диаллиловых соединений являются полимеры с низким молекулярным весом. Основной причиной этому служит деградиционная передача цепи на мономер: при атаке молекулы аллилового мономера активным радикалом наряду с присоединением по двойной связи с высокой вероятностью может произойти отрыв атома водорода от α -СН₂-группы. Это приводит к гибели исходного активного радикала и к образованию малоактивного аллильного радикала стабилизированного внутренним напряжением. Аллильные радикалы могут с достаточно высокой скоростью присоединяться к малоактивной двойной связи аллилового мономера при температурах выше 300-400^oС или под давлением в несколько килобар (5÷20). При обычных условиях вероятность продолжения кинетической цепи близка к нулю. В основном, они расходятся путем рекомбинации. Поэтому отрыв α -водорода растущим радикалом означает гибель как материальной, так и кинетической цепи [7,8]. Такой процесс носит название деградиционной передачи цепи.

Оценка параметра p в ходе радикальной полимеризации является достаточно сложной задачей, поскольку оба механизма обрыва цепи (реакции диспропорционирования и рекомбинации) кинетически неразличимы [3]. Реакции диспропорционирования и рекомбинации различаются лишь величиной энергии активации. Исходя из выше перечисленного в данной работе параметр p был принят равным 0.01, т.к. в системе преобладает только реакция обрыва по механизму рекомбинации (1-p=0.99). Помимо реакции рекомбинации незначительный вклад вносит деградиционная передача цепи (p=0.01).

На рис. 1 представлены исходная нормированная экспериментальная кривая ММР исследуемого образца ДАИФ и кривая ММР полученная в ходе численного эксперимента методом Монте-Карло. Численный эксперимент кинетики полимеризации ДАИФ методом Монте-Карло был проведен на кубической решетке 100x100x100. Метод Монте-Карло основан на случайном выборе протекания элементарных реакций радикальной полимеризации. На каждом этапе моделирования случайно выбиралось как направление реакции, так и сама элементарная реакция. Модель детально описана в работе [6].

Кривые находятся в хорошем согласии – максимальная относительная погрешность составляет 8%. Результаты численного эксперимента по кинетике полимеризации и топологии трехмерных полимеризатов существенно углубляют понимание особенностей формирования струк-

Список литературы

- Шагапов В.Ш. Влияние тепломассообменных процессов между фазами на распространение малых возмущений в пене// Теплофизика высоких температур. 1985. Т. 23, №1. С. 126 – 132.
- Шагапов В.Ш., Хусаинов И.Г., Дмитриев В.Л. Распространение линейных волн в насыщенных газом пористых средах с учетом межфазного теплообмена// ПМТФ. Т. 45. № 4. 2004. С. 114 – 120.
- Рейнер М. Деформация и течение. М.: 1963.
- Новиков В.В., Войцеховский К.В. Вязкоупругие свойства фрактальных сред// ПМТФ. Т. 41. №1. 2000. С. 162 – 172.
- Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. С. 464.

всех случаях считается равным $\alpha_{s0} = 0,2$. Видно, что наличие в порах жидкой фазы оказывает существенное влияние на затухание и скорость распространения как "медленной", так и "быстрой" волны.

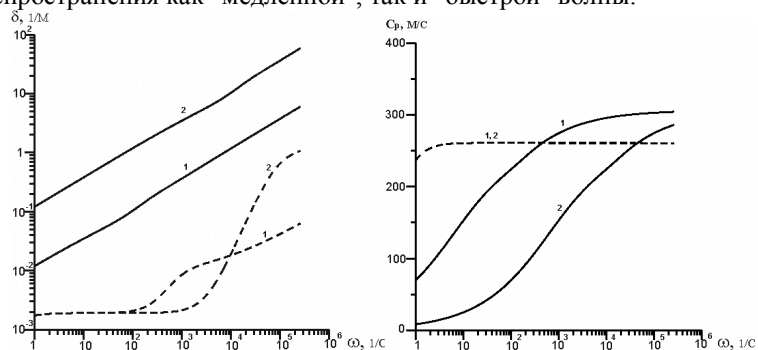


Рис. 3. Зависимость коэффициента затухания и фазовой скорости "быстрых" и "медленных" волн от частоты при различных размерах пор.

На рис. 3 показаны зависимости коэффициента затухания δ и фазовой скорости C_p "быстрой" и "медленной" волн от частоты ω для системы "резина – вода – воздух" при следующих содержаниях фаз: $\alpha_{y0} = 0,69$, $\alpha_{l0} = 0,11$, $\alpha_{s0} = 0,2$. Линии 1 и 2 соответствуют случаям $a_0 = 10^{-3}$ м и $a_0 = 10^{-4}$ м соответственно; сплошные линии относятся к параметрам "медленной" волны, пунктирные – к параметрам "быстрой".

Видно, что уменьшение размера пор приводит к затуханию и снижению фазовой скорости "медленной" волны, а также влияет на затухание "быстрой" волны.

Заключение

Учитывая межфазный теплообмен, исследовано влияние влагосодержания в порах среды на распространение в ней "быстрой" и "медленной" волн. Проведенные расчеты дают представление о процессах, проходящих в пористой звукоизолирующей перегородке в помещениях с повышенным влагосодержанием, способствующим образованию на стенках ее пор водной пленки в процессе возможной конденсации водяных паров.

туры реального трехмерного полимер, а также более детально рассмотреть процесс образования отдельных макромолекул, образовавшихся в результате передачи цепи на мономер.

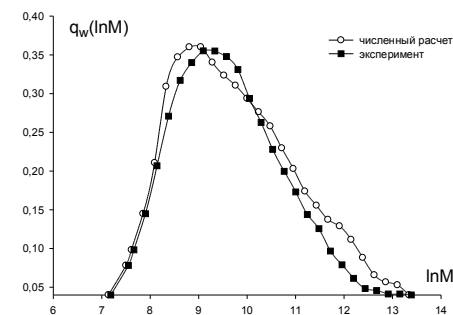


Рис.1. Численный расчет с помощью метода Монте-Карло и экспериментальная кривая ММР ДАИФ. Время полимеризации 2 часа.

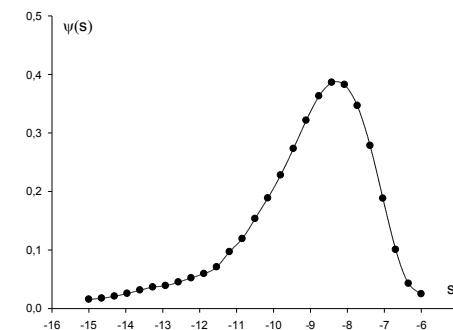


Рис.2. Функция распределения активных центров полимеризации $\psi(s)$ образца ПДАИФ, рассчитанная из экспериментальной зависимости $q_w(\ln M)$, представленной на рис. 1.

Путем численного решения обратной задачи ММР (6) процесса трехмерной свободнорадикальной полимеризации диаллизофталаата установлено существование в реакционной системе единственного механизма процесса полимеризации. Как видно из рис. 2 расчетная зависимость $\psi(s)$ изучаемого образца ПДАИФ одномодальна, однако она имеет ассиметричный вид. Минимум функционала Тихонова достигался

при оптимальном параметре α , равном $1.4 \cdot 10^{-2}$, и среднеквадратичной ошибке δ , равной 0,002, при этом невязка составила $4.5 \cdot 10^{-3}$. Нашей следующей задачей является более детальное изучение расчетной функции распределения $\psi(s)$.

Путем численного решения обратной задачи ММР процесса трехмерной свободно-радикальной полимеризации диаллилизифталата установлено существование в реакционной системе единственного механизма процесса полимеризации.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ №08-01-97028-р_поволжье_a.

Литература

1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. - М.: Наука, 1986. - 287 с.
2. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Регуляризующие алгоритмы и априорная информация. - М.: Наука, 1983. - 198 с.
3. Усманов Т.С., Спивак С.И., Усманов С.М. Обратные задачи формирования молекулярно-массовых распределений. - М.: Химия, 2004. - 252 с.
4. Усманов А.С., Исмаилов Р.Р., Усманов Т.С., Спивак С.И., Усманов С.М. // Башкирский химический журнал. - 2005. - Т.12, №2. - С.67-74.
5. Френкель С.Я. Введение в статистическую теорию полимеризации. М.: Наука, 1965. - 268 с.
6. Ю.М. Сивергин, Р.Р. Исмаилов, Ф.Р. Гайсин, С.М. Усманов //Высокомолек. соед. - А. - 2008. - Т. 50, № 1. - С. 111-119.
7. Насе // Macromol. React. Eng. - 2007. - Y. 1. - 391-404 p.
8. В.И. Володина, А.И. Тарасова, С.С. Спасский // Успехи химии. - 1970. - Т.39 - С.276-303
9. Берлин А.А. и др. // Высокомолек. соед. - Б. -1979. - Т. 21. -С. 172-176.

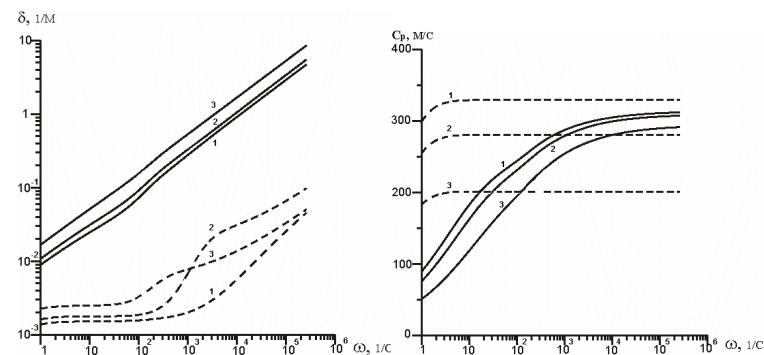


Рис. 2. Влияние объемного содержания жидкой фазы на коэффициент затухания δ и фазовую скорость C_p "медленной" (сплошные линии) и "быстрой" (пунктирные линии) волн.

Коэффициенты χ_V и χ_T учитывают влияние, соответственно, нестационарных сил межфазного взаимодействия и теплообмена между скелетом, газом и жидкостью на динамику "быстрой" и "медленной" волн. Коэффициент χ_μ учитывает влияние вязких свойств материала скелета пористой среды.

Результаты расчета

По дисперсионному соотношению (4) рассчитаны фазовая скорость и коэффициент затухания для обоих типов волн. Параметры фаз взяты при температуре среды 300 K. Для резины: $\rho_{s0}^0 = 920$ кг/м³, $E_s = 10^8$ Па, $\lambda_s = 0,15$ Дж/(м · с · К), $c_s = 1571$ Дж/(кг · К), $\mu_s = 10^8$ Па · с; для воздуха: $\rho_{g0}^0 = 1,29$ кг/м³, $c_g = 1006$ Дж/(кг · К), $\lambda_g = 0,025$ Дж/(м · с · К), $\gamma = 1,4$, $\mu_g = 1,86 \cdot 10^{-5}$ Па · с, для воды: $\rho_{l0}^0 = 1000$ кг/м³, $\lambda_l = 0,6$ Дж/(м · с · К), $c_l = 4200$ Дж/(кг · К).

На рис. 2 представлены зависимости коэффициента затухания δ и фазовой скорости C_p "медленной" и "быстрой" волн от частоты ω для системы "резина – вода – воздух".

Линии 1, 2, 3 характеризуют ситуации, когда объемное содержание жидкой и газовой фаз равны соответственно: 1 – среда полностью сухая (жидкая фаза отсутствует) $\alpha_{g0} = 0,8$; 2 – $\alpha_{g0} = 0,07$, $\alpha_{l0} = 0,73$; 3 – $\alpha_{l0} = 0,31$, $\alpha_{g0} = 0,49$. При этом объемное содержание твердой фазы во

Распространение линейных волн в пористой среде

Решение полученной системы уравнений (1), (2) будем искать в виде затухающих бегущих волн:

$$\rho_j^0, v_j, p_j, \alpha_j, \sigma_s \cong \exp[i \cdot (Kx - \omega t)], \quad (3)$$

$$T_j' = A_{T_j}(r) \exp[i \cdot (Kx - \omega t)], \quad K = k + i\delta, \quad C_p = \omega/k,$$

где ω – круговая частота, K – комплексное волновое число, C_p – фазовая скорость волны, δ – коэффициент затухания.

Из условия существования решения вида (3), после ряда преобразований, получаем следующее дисперсионное соотношение:

$$K = \pm \frac{\omega}{\sqrt{2} C_g} \sqrt{B_1 + B_2 C_{g,s}^2 \pm \sqrt{(B_1 + B_2 C_{g,s}^2)^2 - 4B_3 C_{g,s}^2}}, \quad (4)$$

$$B_1 = (1 + i\chi_V(1 - \alpha_{g0}))(1 + \chi_T), \quad B_2 = \frac{\alpha_{i0}\rho_{l,s} + \alpha_{s0} + i\chi_V\rho_{g,s}(1 - \alpha_{g0})}{\alpha_{s0}\chi_\mu},$$

$$B_3 = \frac{(\alpha_{i0}\rho_{l,s} + \alpha_{s0})(1 + i\chi_V(1 - \alpha_{g0})) + i\chi_V\alpha_{g0}\rho_{g,s}(1 - \alpha_{g0})}{\alpha_{s0}\chi_\mu}(1 + \chi_T),$$

$$\rho_{l,s} = \frac{\rho_{l0}^0}{\rho_{s0}^0}, \quad \rho_{g,s} = \frac{\rho_{g0}^0}{\rho_{s0}^0}, \quad C_g = \sqrt{\frac{\gamma p_0}{\rho_{g0}^0}}, \quad C_s = \sqrt{\frac{E_s}{\rho_{s0}^0}}, \quad C_{g,s} = \frac{C_g}{C_s},$$

$$\chi_\mu = \left(1 + \frac{iE_s}{\omega\mu_s}\right)^{-1}, \quad \chi_V = \frac{1}{\omega\tau^*}, \quad \chi_T = \frac{3(1 - \gamma^{-1})(y_g \operatorname{cth}(y_g) - 1)}{y_g^2} \cdot A_1,$$

$$A_1 = \left(\frac{\frac{\lambda_g h_0}{\lambda_l y_l a_0} (y_g \operatorname{cth}(y_g) - 1) \left(\frac{\lambda_l y_l b_0}{\lambda_s y_s h_0} \operatorname{cth}(y_s) + \operatorname{th}(y_l) \right)}{\frac{\lambda_l y_l b_0}{\lambda_s y_s h_0} \operatorname{cth}(y_s) \cdot \operatorname{th}(y_l) + 1} + 1 \right)^{-1},$$

$$y_g = \sqrt{-\frac{i\omega a_0^2}{\aleph_g}}, \quad y_s = \sqrt{-\frac{i\omega b_0^2}{\aleph_s}}, \quad y_l = \sqrt{-\frac{i\omega h_0^2}{\aleph_l}}$$

$$\tau^{*-1} = \frac{1}{2}(-i\omega)\eta_m + \frac{9}{2}\eta_\mu v_g a_0^{-2} + \frac{9}{4}(1-i)\eta_B a_0^{-1} \sqrt{2\omega v_g}, \quad v_g = \frac{H_g}{\rho_{g0}^0},$$

Стохастический метод решения обратных задач при построении кинетических моделей

Файзуллин М.Р., Балаев А.В

ИНК РАН, fayzullin@gmail.com

Аннотация

В работе рассмотрен стохастический метод решения обратных задач, основанный по принципу имитации физического процесса отжига металла. Приводится также сравнительный анализ с данными, полученными методом покоординатного спуска.

Введение

При решении обратных задач химической кинетики основными проблемами являются: возможная неединственность решения и выход из возникающих в ходе решения локальных минимумов. В работе предложен новый алгоритм стохастического типа для решения подобных задач, который обладает рядом преимуществ по сравнению с подобными алгоритмами, основанными на детерминистическом принципе [1,2,3], наиболее часто используемыми при решении обратных кинетических задач. Предлагаемый алгоритм является достаточно эффективным и позволяет решить проблему автоматического поиска кинетических констант.

Статическая механика

Рассмотрим физическую систему с множеством степеней свободы, которая может находиться в одном из большого количества возможных состояний. Обозначим через p_i вероятность нахождения системы в определенном состоянии i , где

$$p_i \geq 0 \quad \text{для всех } i \quad \text{и} \quad \sum_i p_i = 1 \quad (1)$$

Пусть E_i – энергия системы, когда она находится в состоянии i . В отношении численных методов под энергией подразумевается миними-

зируемые функционал, функция невязки. Статистическая механика утверждает, что если система находится в термальном равновесии с окружающей средой, то состояние i возникает с вероятностью

$$p_i = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \quad (2)$$

T – абсолютная температура в градусах Кельвина; k_B – константа Больцмана ($1,38 \times 10^{-23}$ Джоуля/Кельвин); Z – константа, не зависящая от конкретного состояния.

Подставляя условие нормализации (1) в (2), получим:

$$Z = \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \quad (3)$$

Нормализующая величина Z называется суммой по всем состояниям или функцией разбиения. Распределение вероятности (2) называется каноническим распределением Гиббса, которое обладает следующими свойствами:

- Состояние с низкой энергией более вероятно, чем состояния с высокой энергией.
- При понижении температуры T вероятность концентрируется на небольшом подмножестве состояний с низкой энергией.

В контексте численных методов параметр T можно рассматривать как псевдотемпературу, выступающую в качестве параметра управления. Точная шкала в данном случае неприменима и, следовательно, константу k_B принимаем равной единице. Перепишем формулы (2) и (3):

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_i}{T}\right) \\ Z &= \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{T}\right) \end{aligned} \quad (4)$$

Алгоритм Метрополиса

Этот алгоритм [4] представляет собой модификацию алгоритма Монте-Карло. Предположим, что случайная величина X_n , представляющую цепь Маркова [5,6], в момент времени i находится в состоянии x_i . Сгенерируем произвольным образом новое состояние x_j , представляющее собой реализацию другой случайной переменной Y_n .

$$\rho_g^0 = \frac{3}{4\pi a^3} \int_0^a \rho_g^0 4\pi r^2 dr, \quad \rho_j = \alpha_j \rho_j^0, \quad (1)$$

$$\alpha_g = \frac{a^3}{(a+h+b)^3}, \quad \alpha_l = \frac{(a+h)^3 - a^3}{(a+h+b)^3}, \quad \alpha_g + \alpha_l + \alpha_s = 1.$$

$$\rho_{g0}^0 c_g \frac{\partial T'_g}{\partial t} = \lambda_g r^{-2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T'_g}{\partial r} \right) + \frac{\partial p_g}{\partial t}, \quad (0 < r < a_0),$$

$$\rho_{l0}^0 c_l \frac{\partial T'_l}{\partial t} = \lambda_l \frac{\partial^2 T'_l}{\partial r^2}, \quad (a_0 < r < a_0 + h_0),$$

$$\rho_{s0}^0 c_s \frac{\partial T'_s}{\partial t} = \lambda_s \frac{\partial^2 T'_s}{\partial r^2}, \quad (a_0 + h_0 < r < a_0 + h_0 + b_0), \quad p_g = \rho_g^0 R T'_g$$

Здесь ρ_j и v_j – плотность и скорость j -й фазы, где p_g, p_l – давление в газовой и жидкой фазах, α_s, α_l и α_g – объемные содержания твердой, жидкой и газовой фаз, σ_s – напряжение, E_s и μ_s – модуль упругости и коэффициент динамической вязкости пористого скелета соответственно, F_m – сила присоединенных масс, вызванная инерционным взаимодействием фаз, F_μ – аналог силы вязкого трения Стокса, F_B – сила Бассэ, возникающая вследствие наличия нестационарных эффектов, μ_g – динамическая вязкость газа, η_m, η_μ, η_B – коэффициенты, зависящие от параметров пористой среды [2], λ_j и c_j – коэффициенты теплопроводности и удельной теплоемкости при постоянном давлении, R – приведенная газовая постоянная.

Нижний индекс $j = s, l, g$ будем относить к параметрам скелета, жидкости и газа в порах соответственно. Дополнительным индексом (0) внизу снабжены параметры, соответствующие невозмущенному состоянию; верхний индекс (0) соответствует истинному значению параметра.

Граничные условия для системы (1) имеют следующий вид:

$$\lambda_l \frac{\partial T'_l}{\partial r} = \lambda_g \frac{\partial T'_g}{\partial r}, T'_g = T'_l, (r = a_0)$$

$$\lambda_s \frac{\partial T'_s}{\partial r} = \lambda_l \frac{\partial T'_l}{\partial r}, T'_l = T'_s, (r = a_0 + h_0) \quad (2)$$

$$\frac{\partial T'_g}{\partial r} = 0, (r = 0); \quad \frac{\partial T'_s}{\partial r} = 0, (r = a_0 + h_0 + b_0).$$

Основные уравнения

Рассмотрим пористую среду, материал скелета которой полностью смачивается водой (стенки пор покрыты тонкой водной пленкой) и насыщены газом. Для описания распространения одномерных волн в такой среде примем следующие допущения. Значения длин рассматриваемых в среде волн намного больше размеров пор, все поровые включения имеют сферическую форму и одинаковый радиус, при распространении акустической волны скорости жидкой пленки и скелета равны. В качестве характерных размеров среды примем средний эффективный радиус пор – a_0 , среднюю толщину водной пленки – h_0 и среднюю полутолщину стенок пор – b_0 (рис. 1).

Запишем следующую систему уравнений [2, 3, 4]:

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t} + \rho_{j0} \frac{\partial v_j}{\partial x} = 0, \quad \rho_{g0} \frac{\partial v_g}{\partial t} + (\rho_{l0} + \rho_{s0}) \frac{\partial v_s}{\partial t} = \alpha_{s0} \frac{\partial \sigma_s}{\partial x} - \alpha_{g0} \frac{\partial p_g}{\partial x},$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{1}{E_s} \frac{\partial \sigma_s}{\partial t} + \frac{\sigma_s}{\mu_s}, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial v_s}{\partial x}, \quad \rho_{g0} \frac{\partial v_g}{\partial t} = -\alpha_{g0} \frac{\partial p_g}{\partial x} - \bar{F},$$

$$\bar{F} = F_m + F_\mu + F_B, \quad F_m = \frac{1}{2} \eta_m \alpha_{g0} (\alpha_{s0} + \alpha_{l0}) \rho_g^0 \left(\frac{\partial v_g}{\partial t} - \frac{\partial v_s}{\partial t} \right),$$

$$F_\mu = \frac{9}{2} \eta_\mu \alpha_{g0} (\alpha_{s0} + \alpha_{l0}) \mu_g (v_g - v_s) a_0^{-2},$$

$$F_B = 6\eta_B \alpha_{g0} (\alpha_{s0} + \alpha_{l0}) a_0^2 \sqrt{\pi \rho_g^0 \mu_g} \int_{-\infty}^t \frac{\partial}{\partial \tau} (v_g - v_s) \frac{d\tau}{\sqrt{t - \tau}},$$

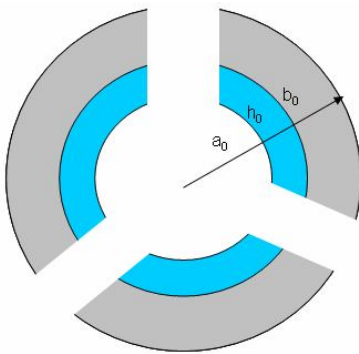


Рис. 1. Ячейка пористой среды.

Обозначим символом ΔE разницу в энергии, возникающую при переходе от состояния $X_n = x_i$ в состояние $Y_n = x_j$. Если эта величина отрицательна, то переход приводит в состояние с меньшей энергией и такой переход принимается. После этого новое состояние принимается в качестве точки старта для следующего шага алгоритма. Иначе, при положительной разнице энергии алгоритм продолжает работу по вероятностной схеме в этой же точке. Выбираем случайное ξ равномерно-распределенное на отрезке $[0; 1]$. Если

$$\xi < \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right) \quad (5)$$

где T – рабочая температура, переход принимается, при этом считается, что $X_{n+1} = Y_n$. В противном случае переход отвергается и $X_{n+1} = X_n$.

Метод моделирования отжига

Для поиска системы с низкой энергией, состояния которой упорядочены в цепь Маркова [5], использовалась комбинация двух связанных составляющих:

- Расписание, определяющее уровень на котором температуру следует понизить.
- Алгоритм, подобный алгоритму Метрополиса, итеративно определяющий равновесное распределение для каждой новой температуры из расписания, используя конечное состояние системы при предыдущей температуре в качестве точки начала работы с более низкой температурой.

Расписание отжига

Алгоритм Метрополиса, лежащий в основе процесса моделирования отжига, направлен на медленное понижение температуры T . Он гарантирует сходжение к состоянию минимальной энергии при условии снижения температуры не быстрее, чем логарифмически, что является чрезмерно медленным для применения на практике. В данной работе применялась аппроксимация на конечном интервале времени. В связи с этим вероятность достижения глобального минимума становится меньше единицы. Тем не менее, получаемая приближенная форма в большинстве случаев способна привести к точке, достаточно близкой к оптимальному решению.

Для реализации приближения на конечном интервале времени алгоритма моделирования отжига, зададим ряд дополнительных параметров. Эти параметры определяют расписание отжига. Расписание представля-

ет собой последовательность значений температур и конечное число пробных переходов для каждой из этих температур. Параметры можно определить следующим образом:

- *Начальное значение температуры* T_0 выбирается достаточно большим, чтобы системе были доступны все предлагаемые переходы.
- *Понижение температуры.* Обычно охлаждение осуществляется экспоненциально и изменения температуры являются небольшими. Был использован следующий закон:

$$T_k = \alpha T_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (6)$$

где α — константа меньшая единицы, но достаточно близкая к ней. В качестве допустимого интервала можно выбрать диапазон от 0,8 до 0,99.

- *Конечное значение температуры.* На конечном этапе система охладится и отжиг остановится. Критерием может служить коэффициент пропускания, определяемый как отношение принятых переходов на количество предложенных.

Изменение констант

Величина случайного изменения констант может определяться различными способами. Например, подобно тепловой системе весовое изменение Δk может выбираться в соответствии с распределением Коши [6]:

$$P(\Delta k) = \frac{T}{T^2 + \Delta k^2} \quad (7)$$

где $P(\Delta k)$ — вероятность шага величины Δk , T — искусственная температура.

В уравнении (7) $P(\Delta k)$ может быть проинтегрирована стандартными методами. Решая относительно Δk , получаем

$$\Delta k_c = \rho T(t) \operatorname{tg}(P(\Delta k)), \quad (8)$$

где ρ — вспомогательный множитель для более тонкой настройки метода; Δk_c — изменение коэффициента.

Для нахождения Δk в этом случае выбирается случайное число из равномерного распределения на открытом интервале $(-\pi/2, \pi/2)$ (необходимо ограничить функцию тангенса). Оно подставляется в формулу

О динамике линейных волн во влажных насыщенных газом пористых средах с учетом межфазного теплообмена

С.В. Володин, В.Л. Дмитриев, И.Г. Хусайнов, Г.Я. Хусайнова

Стерлитамакская государственная педагогическая академия, Svldn@mail.ru

Аннотация

В работе исследован процесс распространения акустических волн во влажных насыщенных газом пористых средах в двухскоростном приближении. Получено дисперсионное соотношение, учитывающее межфазные силы взаимодействия и теплообмен между скелетом пористой среды, жидкостью и газом. Влияние теплообмена между фазами на распространение "быстрой" и "медленной" волны учитывается с помощью уравнения теплопроводности.

Введение

Исследованию процессов распространения акустических волн в пористых средах посвящен достаточно широкий спектр работ. Так в работе [1] рассмотрено влияние тепло- и массообменных процессов между фазами на распространение малых возмущений в пене. На основе дисперсионного соотношения автором исследована зависимость фазовой скорости, коэффициента затухания волны от параметров среды и возмущения. В сухой насыщенной газом пористой среде влияние теплообменных процессов на распространение волн исследовано в работе [2].

Однако на производствах, где возможна конденсация водяного пара на стенках пор материала, используемого в качестве звукоизоляции помещений, приходится сталкиваться с влажными пористыми средами. Присутствие водной пленки внутри пор среды может сильно повлиять на звукоизолирующие способности перегородки. Поэтому рассмотрение распространения акустических волн во влажной насыщенной газом пористой среде представляет не только теоретический, но и практический интерес.

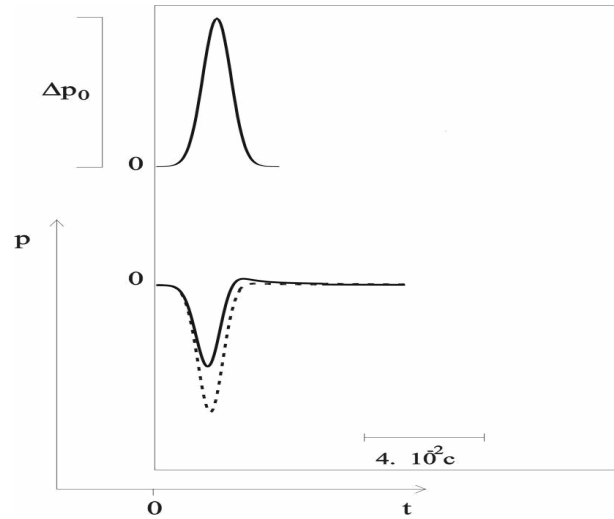


Рис. 2 Исходный и отраженные от перфорированного участка импульсы.

доходит до границы $z = 0$ и, частично отражаясь от нее, возвращается обратно и проходит через границу $z = -H$. Считается, что импульс до границы $z = 0$ и обратно распространяется без затухания.

Для численных расчетов приняты следующие значения параметров скважины, жидкости и пористой среды: $a = 6 \cdot 10^{-2}$ м, $L = 5$ м, $n = 100 \text{ м}^{-2}$, $b = 4 \cdot 10^{-3}$ м, $C = 1500$ м/с, $v = 1.06 \cdot 10^{-6}$ м²/с, $m = 0.1$, $k = 10^{-12}$ м².

(Рисунок 2)

На рис. 2 приведены расчетные осциллограммы – исходный импульс ($t_* = 0.04$) и импульсы давления, отраженные от перфорированного участка скважины. Отраженные импульсы «перевернуты» так как перфорированный участок скважины является акустически более мягкой средой, чем не перфорированный участок.

Отраженный импульс, построенный сплошной линией, получен при $l = 0.1$ м, а пунктирной линией – при $l = 0.4$ м. Из графиков видно, что параметр l оказывает заметное влияние на отражение импульса от перфорированного участка скважины. По параметрам отраженного импульса можно судит о величине l .

(7) в качестве $P(\Delta k)$, и с помощью текущей температуры вычисляется величина шага.

Сравнительный анализ

Представленный алгоритм был апробирован на реакции олигомеризации α -метилстирола на цеолите 0,40 HNaY при различных температурах и концентрациях катализатора. Реакция проводилась в изотермических условиях в реакторе идеального смешения.

Сравнение описанного в данной работе алгоритма происходило с методом покоординатного спуска. Причем, на каждой новой итерации для борьбы с локальными минимумами координаты перебирались в случайном порядке и, для каждой из них осуществлялось небольшое (от 1 до 5) количество шагов в направлении минимизации функционала. Это обеспечивало движение алгоритма в разных направлениях при одних и тех же начальных условиях.

В качестве функционала использовалась функция:

$$Z = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left| x_{ij}^{y_{\text{нн}} \delta_{\text{еи}} \delta_{\text{еи}} \delta_{\text{еи}} \delta_{\text{еи}}} - x_{ij}^{\delta_{\text{ан}} - \delta_{\text{о}}} \right| \quad (9)$$

где X_{ij} – концентрация j -го вещества в момент времени i .

При проведении сравнительных опытов в качестве оценки эффективности метода были использованы усредненные величины по пяти и двум расчетным экспериментам для покоординатного спуска и метода отжига соответственно.

В ходе проведения расчетных экспериментов были получены следующие данные (см. таблицу) о величине невязки при использовании методов отжига и покоординатного спуска:

Эксперимент	Покоординатный спуск	Метод отжига
80°C, 5% кат.	45.16	27.89
80°C, 10% кат.	44.29	42.61
90°C, 5% кат.	53.78	22.26
90°C, 10% кат.	56.93	37.65
100°C, 5% кат.	49.06	41.36
100°C, 10% кат.	52.31	27.89

Эффективность стохастического метода достигала 15% -58%, в среднем 32%. Время работы метода отжига существенно превышало время работы покоординатного спуска, отношение времени работы со-

ставляло от 10 до 40. При этом метод отжига достигал окрестности минимума уже на начальных шагах, основное затраченное время уходило на уточнение результата.

Выводы

Представленный алгоритм позволяет уменьшить вероятность попадания в локальные минимумы благодаря возможности не только улучшать функционал, но и в ряде случаев ухудшать его, тем не менее, практически всегда выходя из локального минимума. Данный алгоритм будет полезен в тех случаях, когда обычные методы детерминистического типа не позволяют получить приемлемое решение.

Список литературы

1. Ларичев О. Н., Горвиц Г. Г. Методы поиска локального экстремума овражных функций. - М.: Наука, 1989. - 96 с.
2. Яблонский Г.Я., Спивак С.И. Математические модели химической кинетики. - М.: Знание, 1997. - 64 с.
3. Джонсон К. Численные методы в химии: Пер. с англ. - М.: Мир, 1983. - 504 с.
4. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс, 2 издание – М.: Издательский дом «Вильямс», 2006. – 1104 с.
5. Кемени Дж. Дж., Снелл Дж. Л. Конечные цепи Маркова. - М.: Наука. 1970. - 272 с.
6. Е.С. Вентцель. «Теория вероятностей» - М.: Наука, 1969. - 562 с.

Пусть исходный акустический сигнал падает на «отражающую поверхность» с левой стороны ($z < 0$). Тогда в процессе взаимодействия этой волны с «отражающей поверхностью» движение в левой зоне ($z < 0$) определится наложением двух волн (падающей и отраженной), а в правой зоне – одной волной (прошедшей). Из условия непрерывности давления и неразрывности среды на границе $z = 0$ следует:

$$p^{(o)} + p^{(r)} = p^{(g)} = p, \quad w_- = w^{(o)} + w^{(r)}, \quad w_+ = w^{(g)}. \quad (6)$$

Здесь индексы (o) , (r) и (g) относятся к падающей, отраженной и прошедшей волнам соответственно. Если правая стенка непроницаемая ($w_+ = 0$), то в (6) $p^{(g)}$ выражает возмущение давления на этой стенке.

В случае, когда вдоль оси скважины распространяется гармоническая волна, из (1) – (6) получим следующие коэффициенты отражения N и прохождения M :

$$N = \left(\frac{2C}{C - D + iL\omega} - 1 \right)^{-1}, \quad M = N + 1 \quad (7)$$

где комплексный параметр D отвечает за фильтрационные процессы через перфорационные каналы

$$D = -i\omega \frac{2\pi n b^2 L l}{a} + \frac{4\pi n C^2 L l}{a} \frac{ky}{v} \frac{K_1(y)}{K_0(y)}, \quad \left(y = \sqrt{-\frac{i\omega b^2}{\chi}} \right).$$

Здесь $K_\gamma(y)$ – функция Макдональда порядка γ , v – кинематическая вязкость флюида.

Анализ результатов

На основе полученного выражения (7) для коэффициента отражения рассмотрим эволюцию волн конечной длительности при отражении от границы $z = 0$. Пусть в левой области от «отражающей поверхности» ($z < 0$) через границу $z = -H$ запускается импульс давления конечной длительности колоколообразной формы с единичной амплитудой:

$$p^{(o)}(t) = \Delta p_{(0)} \exp \left(- \left(\frac{t - t_0}{t_*/2} \right)^2 \right). \quad (8)$$

Здесь t_* и t_0 определяют характерную протяженность импульса и момент времени, на который приходится максимум амплитуды первоначального импульса. Импульс давления, распространяясь по жидкости,

Для получения условий на указанной «отражающей поверхности» записывается уравнение сохранения массы на этом участке:

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho_0 \frac{w_- - w_+}{L} - \frac{2\pi nb^2}{a} \rho_0 u, \quad (2)$$

где ρ_0 – плотность жидкости в невозмущенном состоянии, w_- и w_+ – скорость среды в левой и правой границах перфорированного участка соответственно, n – плотность перфорации на единицу площади поверхности стенки скважины, u – скорость фильтрации жидкости из скважины в перфорационные каналы. В работе рассматривается случай, когда перфорированный участок находится вблизи дна скважины, и поэтому w_+ полагается равной нулю.

Интенсивность поглощения жидкости в окружающее пористое пространство при прохождении волны через перфорированный участок определяется из закона сохранения массы внутри канала, уравнений пьезопроводности и Дарси:

$$\begin{aligned} \pi b^2 l \frac{\partial p}{\partial t} &= \pi b^2 \rho_0 u - 2\pi b l \rho_0 \tilde{u}, \\ \frac{\partial p'}{\partial t} &= \chi \frac{1}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} \left(r' \frac{\partial p'}{\partial r'} \right), \quad \tilde{u}' = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial p'}{\partial r'}, \\ &\left(\chi = \frac{k C^2 \rho_0}{\mu m} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь \tilde{u} – скорость фильтрации жидкости из перфорационных каналов в окружающую пористую среду, μ – вязкость жидкости, m и k – соответственно коэффициенты пористости и проницаемости окружающей скважину пористой среды, χ – коэффициент пьезопроводности, p' , \tilde{u}' – распределение давления и скорости фильтрации вокруг канала, r' – радиальная координата.

Граничные условия:

$$\tilde{u}' = \tilde{u}, \quad p' = p, \quad (r' = b), \quad p' = 0, \quad (r' \rightarrow \infty). \quad (4)$$

Закон распространения возмущения давления по жидкости внутри скважины вне перфорированного участка определяется из уравнений неразрывности и импульса:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho_0 \frac{\partial w}{\partial z}, \quad \rho_0 \frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z}. \quad (5)$$

Обратная задача химической кинетики для реакции циклоалюминирования олефинов

Ахматсафина Э. Р., Спивак С. И., Губайдуллин И. М.

ИНК УНЦ РАН, Уфа, elzahmat@mail.ru

Аннотация

Для реакции циклоалюминирования олефинов представлена методика расчета двумерных областей неопределенности констант скоростей с использованием технологии параллельных вычислений.

Введение

Важные данные о механизме реакций и факторах, определяющих стереоселективность, можно извлечь из результатов изучения кинетики их протекания. При решении обратной задачи, т.е. задачи нахождения кинетических параметров исследуемых механизмов, производится как разработка алгоритмов минимизации функционала, опирающихся на распараллеливание заданной области, так и распределение по процессорам различных экспериментов с целью ускорить обработку эксперимента. В данной работе рассмотрен последний подход.

Теоретическая часть

Для оценки эффективности процесса протекания реакции необходимо знание констант скоростей элементарных реакций. Прямое измерение констант скоростей невозможно. Константы могут определяться путем решения обратной задачи по имеющимся замерам концентраций реагентов. К сожалению, значения замеров известны с достаточно большой ошибкой, определяемой погрешностью измерений.

Участники химической реакции делятся на измеряемые и неизменяемые, критерий сравнения расчета с измерениями рассматривается по измеряемым веществам. В решении обратной задачи получаем многомерную область для кинетических констант, которая удовлетворяет рассматриваемой модели в пределах погрешности измерений, т. е. по каж-

дой из констант имеем интервал неопределенности. Модель описывает измерения в пределах их точности, если выполняется система неравенств (1)

$$\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{I1} |x_{ij}^a - x_{ij}^p| \leq \varepsilon_{ij} \quad (1)$$

По каждой из констант находим интервал неопределенности как отрезок, вариация константы внутри которого сохраняет совместность системы неравенств. Такая постановка задачи определения интервалов неопределенности для констант при условии удовлетворения системы (1) принадлежит Л. В. Канторовичу [1].

На основании экспериментально обоснованной схемы процесса разработана кинетическая модель реакции циклоалюминирования олефинов триэтилалюминием в присутствии Cp_2ZrCl_2 [2]. Для этой реакции схема химических превращений имеет вид (2), соответствующая ей система уравнений – (3)

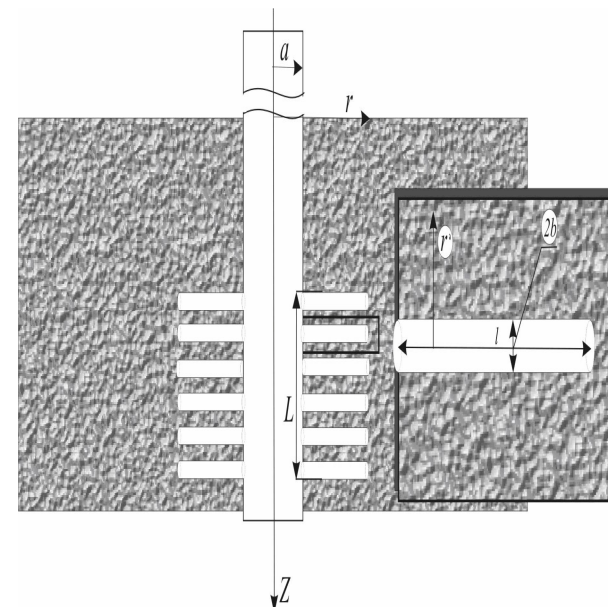
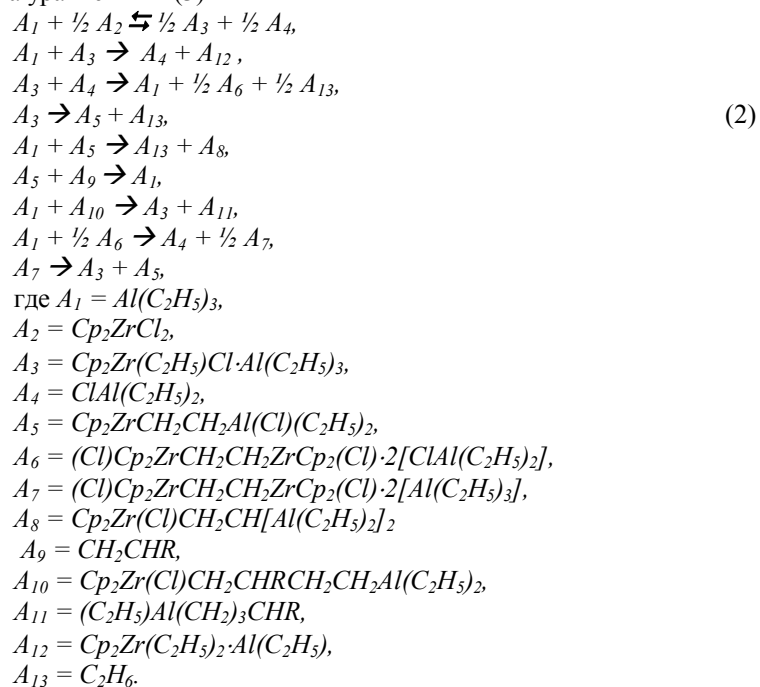


Рис. 1. Схема перфорированного участка скважины

Исходный сигнал создается на некотором расстоянии от обследуемого участка. Распространяясь по жидкости, сигнал доходит до перфорированного участка и частично отражается от него. Отраженное «эхо» сигнала будет нести определенную информацию о качестве перфорации и коллекторских характеристиках окружающей скважину пористой среды этого участка.

Математическая модель, описывающая эволюцию исходного акустического сигнала, получена при следующих допущениях: во-первых, скважина и окружающее пористое пространство заполнены одной и той же жидкостью, принятой сжимаемой в акустическом приближении:

$$p = C^2 \rho, \quad (1)$$

где ρ и p – возмущение плотности и давления, C – скорость звука. Во-вторых, длина волны λ значительно больше длины перфорированного участка L ($\lambda \gg L$). В силу последнего допущения перфорированный участок принимается за «отражающую поверхность» с координатой $z = 0$.

Применение акустического зондирования в исследовании перфорированной скважины

И. Г. Хусайнов, А. А. Ишмухаметова

Стерлитамакская государственная педагогическая академия, e-mail: mslika@yandex.ru

Аннотация

Построена математическая модель, описывающая распространение акустического сигнала в обсаженной скважине. Получены коэффициенты прохождения и отражения гармонической волны от перфорированного участка скважины. Численно исследована эволюция волн конечной длительности при отражении от перфорированного участка скважины.

Введение

При исследовании действующих эксплуатационных и вновь вводимых скважин широкое применение нашли акустические методы. Большинство способов акустического каротажа основано на интерпретации сигналов с использованием различных известных закономерностей распространения, затухания и отражения продольных и поперечных упругих волн в слоисто-неоднородных флюидонасыщенных пористых породах.

Целью данной работы является изучение влияния качества вскрытия скважины посредством радиальной перфорации на отражение акустических сигналов, распространяющихся по жидкости в обсаженных скважинах, от перфорированного участка скважины.

Основные уравнения

Предполагается, что продуктивный пласт сообщается со скважиной радиуса a , обсаженной колонной стальных труб, через отверстия радиуса b , выполненные в колонне против пласта с помощью пулевой перфорации. Глубина проникновения пуль l в толщу пласта зависит от мощности заряда и прочностных свойств породы (Рис. 1).

(Рисунок 1)

$$\begin{aligned} \frac{dX_1}{dt} &= -W_1 - W_2 + W_3 - W_5 - W_7 - W_8; & \frac{dX_8}{dt} &= \frac{1}{2}W_8 - W_9; \\ \frac{dX_2}{dt} &= -\frac{1}{2}W_1; & \frac{dX_9}{dt} &= W_5; \\ \frac{dX_3}{dt} &= \frac{1}{2}W_1 - W_2 - W_3 - W_4 + W_7 - W_9; & \frac{dX_{10}}{dt} &= -W_6; \\ \frac{dX_4}{dt} &= \frac{1}{2}W_1 + W_2 - W_3 + W_8; & \frac{dX_{11}}{dt} &= W_6 - W_7; \\ \frac{dX_5}{dt} &= \frac{1}{2}W_3 + W_4 + W_5; & \frac{dX_{12}}{dt} &= W_7; \\ \frac{dX_6}{dt} &= W_4 - W_5 - W_6 + W_9; & \frac{dX_{13}}{dt} &= W_2; \\ \frac{dX_7}{dt} &= \frac{1}{2}W_3 - \frac{1}{2}W_8; \end{aligned} \quad (3)$$

где $W_1 = k_1 X_1 X_2^{1/2} - k_{10} X_3^{1/2} X_4^{1/2}$, $W_2 = k_2 X_2 X_3$, $W_3 = k_3 X_3 X_4$, $W_4 = k_4 X_3$, $W_5 = k_5 X_1 X_5$, $W_6 = k_6 X_6 X_9$, $W_7 = k_7 X_1 X_{10}$, $W_8 = k_8 X_1 X_6^{1/2}$, $W_9 = k_9 X_7$; X_1, \dots, X_{13} – концентрации веществ A_1, \dots, A_{13}

В нашем случае измеряемыми являются $X_2, X_3, X_5, X_7, X_8, X_{12}$, поэтому система неравенств имеет вид (4)

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{2j}^2 - X_{2j}^p| \leq \varepsilon_2, & \quad \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{7j}^2 - X_{7j}^p| \leq \varepsilon_7, \\ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{3j}^2 - X_{3j}^p| \leq \varepsilon_3, & \quad \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{8j}^2 - X_{8j}^p| \leq \varepsilon_8, \\ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{5j}^2 - X_{5j}^p| \leq \varepsilon_5, & \quad \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |X_{12j}^2 - X_{12j}^p| \leq \varepsilon_{12} \end{aligned} \quad (4)$$

Методика и результаты

Для нахождения интервалов неопределенности кинетических констант систему решали методом перебора вдоль границ, используя многопроцессорные вычислительные системы. Кластер состоит из двухпроцессорных узлов, общее число узлов – 13. Распараллеливание вычислений осуществлялось средствами MPI с использованием языка программирования Fortran 77. Вся информация, относящая к эксперименту, сведена в базу данных [3]. Параллельная обработка данных основана на следующем принципе: один процессор работает с базой данных – производит считывание всей необходимой информации из базы, распределение ее между процессорами для обработки, сбор результатов и запись в БД.

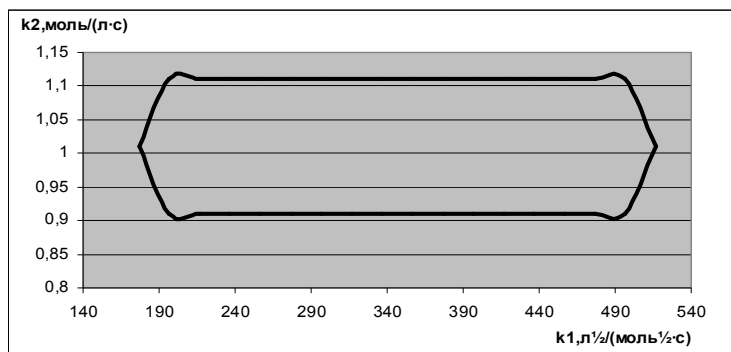


Рис. 1 Фазовая плоскость по константам k_1 и k_2 .

Каждому процессору предоставляется определенный набор данных характеризующих эксперимент. Всего можно построить 45 фазовых плоскостей по всем константам (рассматриваем пока пары констант), причем нужно рассмотреть 1-ю константу со 2,3,...,9 (пары первой константы), 2-ю константу с 3,4,...,9 (пары второй константы) и т.д. 9-ю же константу останется рассмотреть в паре с 10. Для эффективности работы (оптимальное соотношение времени счета и равномерные нагрузки на рабочие узлы) распределить задачи можно таким образом: на первом узле считаются пары первой константы и девятой (последней), на втором – соответственно пары второй и восьмой, и т.д. В результате, например, фазовая плоскость по константам k_1 и k_2 имеет вид, представленный на рис.1. Теперь, имея возможность получения фазовых плоскостей для констант и имея некие соотношения для констант, в дальнейшем планируется проверка соответствия получаемым плоскостям и предполагаемым зависимостям между константами.

Литература

1. Л.В. Канторович. //Сиб. мат. журн. 1962. – Т.3. – № 5. – С.701.
2. А.В.Балаев, Л.В.Парфенова, С.В.Русakov, И.М.Губайдуллин, С.И.Спивак, Л.М.Халилов, У.М.Джемилев. Механизм реакции циклоалюминирования алкенов триэтилалюминием в алумомаклопентаны, катализируемой Cp_2ZrCl_2 . //ДАН. 2001. Т.381. – №3.
3. И.М. Губайдуллин, Ю.Б. Линд, Э.Р. Ахматсафина, С.И.Спивак. Реляционная система управления базой данных для реакции гидроалюминирования олефинов в присутствии циркониевого катализатора, реализующая динамическое распределение данных между процессорами многопроцессорной вычислительной системы. Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2008): Труды международной научной конференции (С-Петербург, 28 января – 1 февраля 2008 г.). – Челябинск: Изд. ЮУрГУ, 2008. – С.370-375.

$T = T_{(m)}$ являются начальными условиями для решения системы дифференциальных уравнений, описывающих распределение давления и температуры в третьей области. Подбор значений $p'(0)$ и $T'(0)$ продолжается до тех пор, пока при их определенных значениях давление и температура на бесконечности ($\xi = \infty$) не соответствовали с заданной погрешностью условиям: $p = p_0$ и $T = T_0$.

На рис. 1 представлены распределения давления, температуры и гидратонасыщенности при нагнетании метана под давлением $p_e = 8$ МПа и с температурой $T_e = 278$ К в пласт с начальным давлением $p_0 = 4$ МПа и исходной водонасыщенностью 0,2. Для остальных параметров, характеризующих систему, приняты следующие значения: $m = 0,1$, $G = 0,12$, $T_0 = 280$ К, $T_* = 10$ К, $p_{s0} = 5,5$ МПа, $k_0 = 10^{-14}$ м², $L_h = 5 \cdot 10^5$ Дж/кг, $c_g = 1560$ Дж/(К·кг). Штриховая линия соответствует приближенным аналитическим решениям, полученным в работе [4], с использованием метода лианеризации Лейбензона. Рисунок показывает, что лианеризация уравнений существенно влияет на распределение гидратонасыщенности в промежуточной области.

Литература

1. Бык С.Ш., Макогон Ю.Ф., Фомина Ю.В. Газовые гидраты. – М: Химия, 1980. – 296 с.
2. Истомин В.А., Якушев В.С. Газовые гидраты в природных условиях. – М. Недра, 1992. – 236 с.
3. Jadhawar P., Mohammadi A.H., Yang J., Tohidi B. Subsurface carbon dioxide storage through clathrate hydrate formation Advances in the Geological Storage of Carbon Dioxide. - Springer. Printed in the Netherlands. – 2006. pp. 111 – 126.
4. Шагапов В.Ш., Мусакаев А.Г., Хасанов М.К. Нагнетание газа в пористый резервуар, насыщенный газом и водой. //Теплофизика и аэромеханика. – 2005. – Т. 12 – № 4. – С.645 - -656.

Обратные задачи ММР и расчет кинетических констант ионно-координационной полимеризации

Бигаева Л.А.¹, Усманов Т.С.²

1) БурГСПА, Бурск bigla@rambler.ru.

2) РН-УФАНИПИНЕФТЬ, г.Уфа,

Аннотация

В работе проведен расчет констант скоростей элементарных реакций ионно-координационной полимеризации изопрена и соответствующей функции молекулярно-массового распределения путем численного решения обратных задач.

Большинство методик экспериментального определения кинетических параметров ионно-координационной полимеризации справедливо для стационарных процессов [1], где постоянными считаются как кинетические константы, так и концентрации реагентов. В связи с этим обычно анализируют только начальный участок зависимости степени полимеризации от времени, где конверсия не превышает 5-10%. А если в системе сосуществуют несколько типов активных центров (АЦ), то правомерным будет анализ зависимости конверсионной кривой только до 1-2%. Получить достаточное количество достоверных точек на таком отрезке кривой представляет значительные экспериментальные трудности, особенно при высоких скоростях полимеризации, что характерно для ионно-координационной полимеризации диенов на титансодержащих катализаторах. Если даже удастся на таком участке получить какие-либо константы, они будут только усредненными («кажущимися») константами, которые характеризуют процесс полимеризации в целом. Однако они дают относительно мало информации о кинетической неоднородности, существующей в реальных процессах ионно-координационной полимеризации, где, как известно, присутствуют несколько типов активных центров с различными кинетическими константами $(k_p^j, k_M^j, k_A^j, k_d^j)$, где k_p^j – константа скорости роста полимерной цепи, k_M^j – и k_A^j – константы скоростей реакций передачи цепи на мо-

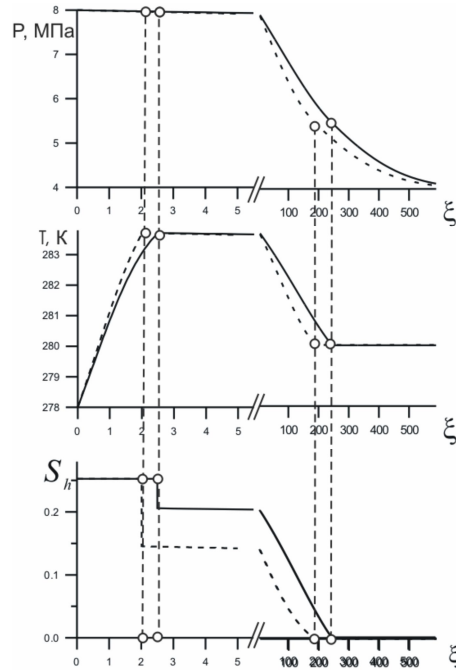


Рис.1 Распределение давления, температуры и гидратонасыщенности в пласте.

условиях $p = p_e$, $T = T_e$ и произвольно заданных производных давления $p'(0)$ и температуры $T'(0)$. На первой границе фазового перехода для координаты, определяемой из условия равновесия фаз, вычислялись новые значения производных давления и температуры ($p'(\xi_{(s)})$ и $T'(\xi_{(s)})$). Данные значения, наряду со значениями $\xi = \xi_{(s)}$, $p = p_{(s)}$, $T = T_{(s)}$ являются начальными условиями для решения системы уравнений, описывающих распределение давления и температуры во второй области.

На второй границе фазового перехода для координаты $\xi = \xi_{(m)}$, определяемой из условия выполнения соотношения $S_{h(2)} = 0$, вычислялись новые значения производных давления и температуры ($p'(\xi_{(m)})$ и $T'(\xi_{(m)})$). Данные значения, наряду со значениями $\xi = \xi_{(m)}$, $p = p_{(m)}$ и

номер и передачи цепи на алюминийорганическое соединение (АОС), k_d^j – константа гибели активных центров полимеризации для j -го типа АЦ. Поэтому при определении кинетических параметров используются модельные схемы [3,5], более полно учитывающие многообразие процессов, происходящих при полимеризации.

Усредненные константы скоростей элементарных реакций взаимосвязаны с соответствующими константами j -го типа АЦ по формулам [2-3]:

$$\langle\langle k_i \rangle\rangle = \frac{\sum_{j=1}^m k_i^j [AЦ]_j}{\sum_{j=1}^m [AЦ]_j} = \frac{\sum_{j=1}^m k_i^j [R_1]^j}{[R_1]}, \quad (1)$$

$\langle\langle k_i \rangle\rangle$ - усредненная константа скорости i -той элементарной реакции, m -количество типов АЦ, $[R_1]$ -суммарная концентрация АЦ, $[R_1]^j$ концентрация j -го типа АЦ.

До сих пор считалось, что усредненные константы скоростей в ходе полимеризации остаются постоянными. Но оказывается в системах, где происходит гибель АЦ, значения усредненных констант в процессе полимеризации меняются, если даже для каждого j -типа АЦ они остаются постоянными.

В качестве примера рассмотрим образцы полиизопрена (ПИ) синте-

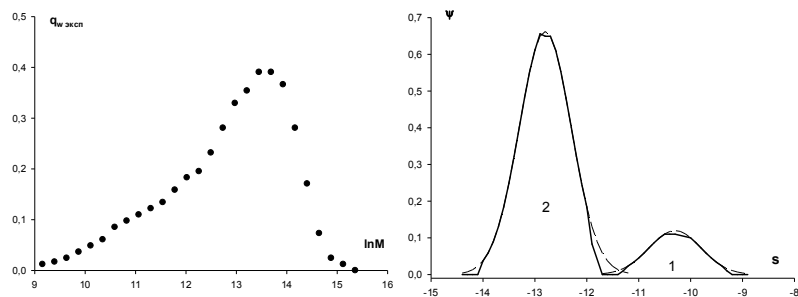


Рис.1а. Экспериментальная геле-хроматограмма $q_{w\text{эксп}}(x)$ образца ПИ, синтезированного на системе TiCl_4 -ДФО-пиперилена- $\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$.

Рис.1б. Расчетная функция распределения центров полимеризации $\psi(s)$.

$$\frac{d^2 T_{(i)}}{d\xi^2} = -\frac{1}{2} \xi \frac{dT_{(i)}}{d\xi} - \frac{c_g k_{(i)} p_{(i)}}{\lambda \mu_g R_g T_{(i)}} \frac{dp_{(i)}}{d\xi} \frac{dT_{(i)}}{d\xi}.$$

Соответствующие дифференциальные уравнения во второй области имеют следующий вид:

$$-\frac{m\xi}{2} \frac{d}{d\xi} (\rho_{g(2)} S_{g(2)}) - \frac{1}{\mu_g \aleph^{(T)}} \frac{d}{d\xi} \left(k_{(2)} \rho_{g(2)} \frac{dp_{(2)}}{d\xi} \right) = \frac{mG\rho_h}{2} \xi \frac{dS_{h(2)}}{d\xi},$$

$$-\frac{\rho c}{2} \xi \frac{dT_{(2)}}{d\xi} - \frac{k_{(2)} \rho_{g(2)} c_g}{\mu_g \aleph^{(T)}} \frac{dp_{(2)}}{d\xi} \frac{dT_{(2)}}{d\xi} = \rho c \frac{d^2 T_{(2)}}{d\xi^2} - \frac{m\rho_h L_h}{2} \xi \frac{dS_{h(2)}}{d\xi}.$$

Из условий баланса массы и тепла на границе между первой и второй областями имеем следующую систему уравнений для нахождения координаты этой границы $\xi_{(s)}$ и значений параметров на ней:

$$\frac{k_{(2)} dp_{(2)}}{\mu_g d\xi} - \frac{k_{(1)} dp_{(1)}}{\mu_g d\xi} = m \aleph^{(T)} (S_{h(1)} - S_{h(s)}) \left[\frac{\rho_h G}{\rho_{g(s)}} + \frac{\rho_h (1-G)}{\rho_l} - 1 \right] \xi_{(s)},$$

$$\frac{dT_{(1)}}{d\xi} - \frac{dT_{(2)}}{d\xi} = \frac{m(S_{h(1)} - S_{h(s)}) \rho_h L_h}{2\rho c} \xi_{(s)},$$

$$\frac{dp_{(2)}}{d\xi} = \frac{p_{(s)}}{T_*} \frac{dT_{(2)}}{d\xi}.$$

Будем полагать, что величина гидратонасыщенности на границе между второй и третьей областями непрерывна и равна нулю. Тогда система уравнений для нахождения координаты второй границы $\xi_{(m)}$ и значений параметров на ней примет следующий вид:

$$\frac{dp_{(2)}}{d\xi} = \frac{p_{(m)}}{T_*} \frac{dT_{(2)}}{d\xi},$$

$$\frac{dp_{(2)}}{d\xi} = \frac{dp_{(3)}}{d\xi},$$

$$\frac{dT_{(2)}}{d\xi} = \frac{dT_{(3)}}{d\xi}.$$

Записанную систему дифференциальных уравнений второго порядка решим численно методом пристрелки, которая заключается в следующем. Начиная с границы $\xi = 0$ до предполагаемой границы фазового перехода $\xi = \xi_{(s)}$ методом Рунге - Кутты решается задача Коши при

При образовании газогидрата в общем случае могут возникнуть три характерные области. В первой области, находящейся вблизи границы пласта поры заполнены газом и газогидратом. Во второй (промежуточной) области происходит образование газогидрата, поэтому здесь поры заполнены газом, водой и гидратом. В третьей (дальней) области в порах присутствуют только газ и вода, а твердый газогидрат отсутствует. На границах этих областей должны выполняться условия баланса массы и тепла:

$$\begin{aligned} [m(\rho_h S_h(1-G) + \rho_l S_l)\dot{x}_{(s)}] &= 0, \\ [m(\rho_g S_g(v_g - \dot{x}_{(s)}) - \rho_h S_h G\dot{x}_{(s)})] &= 0, \\ \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right] &= [m\rho_h S_h L_h \dot{x}_{(s)}]. \end{aligned}$$

Здесь $[\psi]$ - скачок параметра ψ на границе $x_{(s)}$ между областями; $\dot{x}_{(s)}$ - скорость движения этой границы. Температуру и давление на этой границе будем полагать непрерывными.

Будем полагать, что пласт в начальный момент времени насыщен газом и водой, давление p_0 и температура T_0 которых в исходном состоянии соответствуют термодинамическим условиям существования их в свободном состоянии и изначально одинаковы во всем пласте. Эти условия могут быть записаны следующим образом:

$$t = 0: T = T_0, p = p_0.$$

Пусть через границу пласта закачивается холодный газ, температура и давление которого соответствуют условиям образования газогидрата и далее поддерживаются постоянными. Эти условия запишем в виде:

$$x = 0 \quad T = T_e, p = p_e.$$

Сформулированная таким образом задача имеет автомодельное решение. Введем автомодельную переменную:

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{\aleph^{(T)} t}},$$

где $\aleph^{(T)}$ - коэффициент температуропроводности пласта.

Тогда дифференциальные уравнения, описывающие распределение давления и температуры в первой и третьей областях можно записать в виде:

$$\frac{d^2 p_{(i)}}{d\xi^2} = -\frac{T_{(i)}}{p_{(i)}} \left[\frac{m S_{g(i)} \mu_g \aleph^{(T)}}{2k_{(i)}} \xi \frac{d}{d\xi} \left(\frac{p_{(i)}}{T_{(i)}} \right) + \frac{dp_{(i)}}{d\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{p_{(i)}}{T_{(i)}} \right) \right],$$

зированные в ЗАО «Каучук» (г.Стерлитамак, РБ). Полимеризация проводилась на каталитической системе $TiCl_4$ -*ниперил*ен- $Al(i-C_4H_9)_3$ в изопентане при температуре 25⁰С. Концентрации реагентов составляли: мономера $[M]_0 = 1,5 \frac{моль}{л}$ и катализатора $C_k = 10^{-3} \frac{моль}{л}$, алюминийорганического соединения $[A] = 1,1 \cdot 10^{-3} \frac{моль}{л}$ [3].

На рис. 1 (а) представлена экспериментальная гель-хроматограмма этого образца ПИ в момент времени реакции $t=20$ мин. Количество и кинетические характеристики различных типов АЦ этого образца определяли численным решением интегрального уравнения Фредгольма первого рода [3]:

$$q_{wэксн}(x) = \int_a^b \psi(s) \exp[2(s+x) - \exp(s+x)] ds, \quad (2)$$

где $x = \ln M$, M - молекулярная масса макромолекулы, $s = \ln \lambda$, λ - статистический параметр Френкеля [4], равный:

$$\lambda = \frac{\sum V_{oi}}{m_0 V_p}, \quad (3)$$

V_p - скорость реакции роста цепи, $\sum V_{oi}$ - суммарная скорость реакций обрыва цепи, m_0 - молекулярная масса мономера; $\psi(s)$ - искомая функция распределения АЦ полимеризации, $q_{wэксн}(x)$ - экспериментально полученная гель-хроматограмма изучаемого образца.

Для этого образца ПИ численное решение обратной задачи ММР (2) позволило обнаружить 2 типа АЦ, (т.е. $m = 2$) [3] (рис. 1 (б)).

Для расчета соответствующих констант скоростей элементарных реакций j -го типа АЦ рассмотрена обратная кинетическая задача. Последняя сводится к поиску минимумов двух функционалов [3,5]:

$$F_j(y) = \sum_{i=1}^n [U_{эксн,j}(t_i) - U_{расч,j}(t_i)]^2 = \min, \quad y(k_p^j, k_d^j, [R_1]_0^j), \quad (4)$$

$$\Phi_j(z) = \sum_{i=1}^n [M_{нэксн,j}(t_i) - M_{нрасч,j}(t_i)]^2 = \min, \quad z(k_M^j, k_A^j), \quad (5)$$

где $[R_1]_0^j$ - концентрация j -го типа АЦ при $t=0$, n - количество экспериментальных точек, $M_{нэксн,j}(t)$ и $M_{нрасч,j}(t)$ - экспериментальная и расчетная среднечисленные характеристики ММР для j -го типа АЦ, расчи-

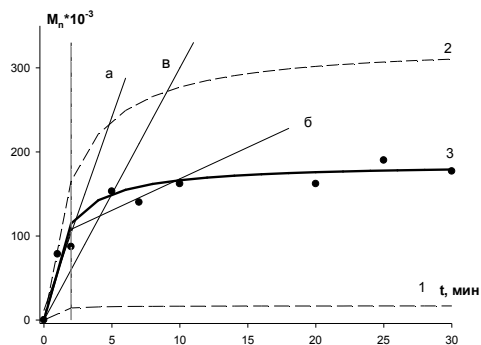


Рис.2. Зависимость среднечисленной молекулярной массы полимеризации изопрена на каталитической системе TiCl_4 -пиперилден- $\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_2$: $M_{n1}(t)$ (кривая 1), $M_{n2}(t)$ (кривая 2) и в целом для всей полимеризации образца ПИ (кривая 3).

тантные по [6], $U_{\text{эсп.}j}$ и $U_{\text{расч.}j}$ - экспериментальная и расчетная конверсионные зависимости для j -го типа АЦ, причем [3]:

$$U_{\text{расч.}j} = 1 - \exp\left[-R_1 \int_0^t \frac{k_p^j}{k_d^j} (\exp(-k_d^j t) - 1)\right]. \quad (6)$$

На рис.2 представлена зависимость среднечисленной молекулярной массы полимеризации изопрена на титансодержащей каталитической системе TiCl_4 -пиперилден- $\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_2$. Из рисунка видно, что правомерным будет анализ кривой зависимости среднечисленной молекулярной массы только до 2 минут (прямая а), так как после 2 минут значения $M_{n1}(t)$ выходят на плато, а значения $M_{n2}(t)$ увеличиваются до 10 мин. Поэтому экспериментальное определение констант без учета кинетической неоднородности (полицентровости), которое применялось до сих пор (по кривой в) будет ошибочным.

Минимизация функционалов (4-5) позволило найти для всех двух типов АЦ соответствующие константы, которые представлены в табл.1.

Усредненные характеристики, которые даны в табл.1, представляют собой только начальные значения этих констант. Учитывая, что концентрация активных центров убывает с течением времени по формуле

калорически совершенным. В рамках отмеченных допущений запишем для плоскоодномерной задачи уравнения сохранения массы, закон Дарси, уравнения состояния газа и притока тепла (без учета баротермического эффекта):

$$\frac{\partial}{\partial t}(mS_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x}(mS_g v_g \rho_g) = -mG \rho_h \frac{\partial S_h}{\partial t},$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(mS_l \rho_l) = -m(1-G) \rho_h \frac{\partial S_h}{\partial t},$$

$$mS_g v_g = -\frac{k_g}{\mu_g} \frac{\partial p}{\partial x},$$

$$p = \rho_g R_g T,$$

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial x} + \rho_g c_g mS_g v_g \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + m \rho_h L_h \frac{\partial S_h}{\partial t}.$$

Здесь m - пористость, p - давление, T - температура, ρ_j и S_j - истинная плотность и насыщенность пор j -ой фазы ($j = h, l, g$); индексы h, l, g относятся к параметрам гидрата, воды и газа соответственно, v_g , k_g и μ_g - скорость, проницаемость и динамическая вязкость газа, L_h - удельная теплота разложения гидрата, c_g - удельная теплоемкость газа, ρc и λ - удельная объемная теплоемкость и коэффициент теплопроводности системы.

Зависимость коэффициента проницаемости для газа k_g от газонасыщенности можно задать на основе формулы Козени:

$$k_g \approx k_0 S_g^3,$$

где k_0 - абсолютная проницаемость пласта.

В трехфазной области, где одновременно присутствуют газ, вода и гидрат и происходит процесс образования газогидрата, принимается условие равновесия фаз [1]:

$$T_{(s)} = T_0 + T_* \ln \left(\frac{p}{p_{s0}} \right)$$

где T_0 - исходная температура системы, p_{s0} - равновесное давление, соответствующее исходной температуре, T_* - эмпирический параметр, зависящий от вида газогидрата.

Автомодельная задача об образовании газовых гидратов

Хасанов М.К., Столповский М.В.

Стерлитамакская государственная педагогическая академия, s_maxim.pmm@mail.ru

Аннотация

Представлена математическая модель образования газовых гидратов в пористой среде. Получено численное решение задачи, описывающей распределение основных параметров в пласте.

Введение

Проблемы и задачи образования газовых гидратов в настоящее время представляют значительный научный и практический интерес, что обусловлено перспективой использования газовых гидратов в различных областях промышленности [1,2]. В частности, в целях уменьшения объема парниковых газов и их последующего безопасного захоронения, рядом исследователей предлагается подземная газогидратная консервация данных газов, которая обеспечивает высокий уровень безопасности хранения и имеет небольшие энергетические затраты [3]. В работе [4] получены приближенные аналитические решения автомодельной задачи об образовании газового гидрата в пористой среде. Показано, что при инъекции холодного газа в пористую среду, насыщенную газом и водой, возможны различные режимы образования гидрата, соответствующие формированию как фронтальной поверхности образования газогидрата, так и объемной области фазовых переходов. В данной работе представлены численные решения образования газового гидрата в объемной области.

Основные уравнения

Для описания процессов тепломассопереноса в пористой среде примем следующие допущения. Процесс однотемпературный, т.е. температуры пористой среды и насыщающего вещества (газа, гидрата или воды) совпадают. Гидрат является двухкомпонентной системой с массовой концентрацией газа G . Кроме того, скелет пористой среды, газогидрат и вода несжимаемы и неподвижны, пористость постоянна, газ является

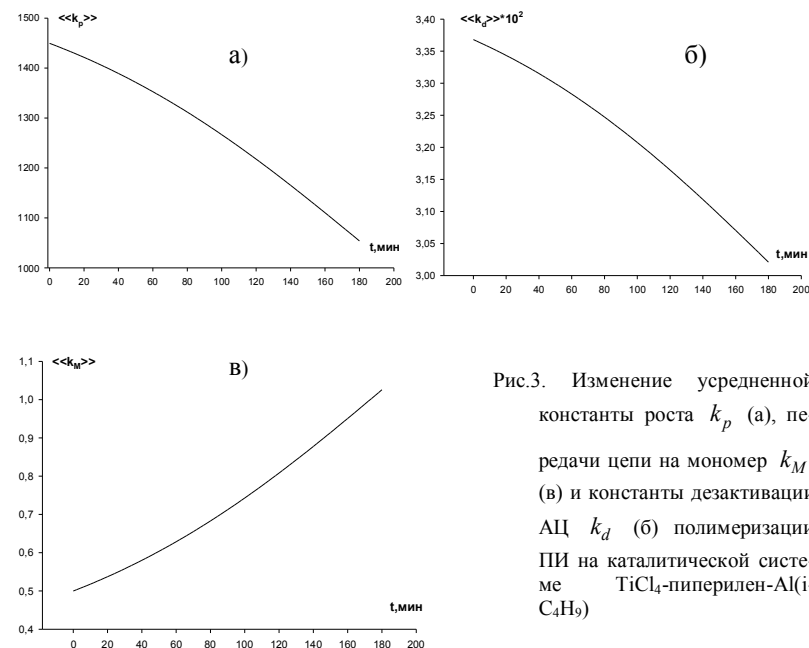


Рис.3. Изменение усредненной константы роста k_p (а), передачи цепи на мономер k_M (б) и константы дезактивации АЦ k_d (в) полимеризации ПИ на каталитической системе TiCl_4 -пиперилден- $\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)$

$$[R_1]^j = [R_1]_0^j e^{-k_d^j t}, \text{ а суммарная концентрация } [R_1](t) = \sum_{j=1}^m [R_1]^j(t), \text{ находим}$$

по формуле (1) значения усредненных констант в любой момент времени полимеризации. Из рис.3 можно увидеть, как меняются усредненные константы с течением времени реакции.

Такое изменение сказывается при вычислении усредненной среднечисленной молекулярной массы. На рис.4 показано несоответствие между среднечисленными характеристиками, вычисленными в случае полицентровой модели (пунктирные линии) и в случае одноцентровой модели с начальными усредненными константами (сплошные линии) по формулам из [6]. Из рис.4 можно увидеть явное отличие между двумя зависимостями. На этом рисунке также даны экспериментальные среднечисленные молекулярные массы в целом для всей полимеризации образца ПИ. Как видно, обе зависимости среднечисленной молекулярной массы, хоть и отличаются значительно, вполне объективно описывают экспериментальные данные. Этот факт и объясняет использование долгое время одноцентровой модели при вычислении значений $M_n(t)$, в то

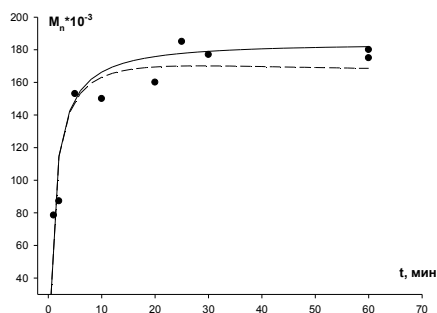


Рис.4. Расчетные среднечисленные молекулярные массы образца ПИ, синтезированного на каталитической системе $TiCl_4$ -пиперилен- $Al(i-C_4H_9)_3$ с усредненными константами в случае одноцентральной модели (сплошные линии), в случае полицентровой модели (пунктирные линии).

время как для рассматриваемой системы характерна кинетическая неоднородность катализатора.

Таблица 1

Кинетические характеристики процесса ионно-координационной полимеризации изопрена на каталитической системе $TiCl_4$ -пиперилен- $Al(i-C_4H_9)_3$

Константы	1-ый АЦ	2-ой АЦ	Усредненные характеристики
$k_p, \left(\frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{мин}} \right)$	460	1600	1450
$k_M, \left(\frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{мин}} \right)$	1,82	0,3	0,50
$k_A, \left(\frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{мин}} \right)$	5,0	5,0	5,0
$k_d, \left(\frac{1}{\text{мин}} \right)$	0,025	0,035	0,034

Литература

1. Панченков Г.М., Цабек Л.К. Поведение эмульсии во внешнем электрическом поле. – М.: Химия, 1969. – 190с.
2. Гогосов В.В., Налетова В.А., Шапошникова Г.А. Диффузионная и многоскоростная модели двухфазных сред в электрическом поле // ПММ. – 1980. – вып. 2. – С. 290 – 300.
3. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. I. – М.: Наука, 1987. – 464 с.
4. Нигматулин Р.И., Саяхов Ф.Л., Ковалева Л.А. Перекрестные явления переноса в дисперсных системах, взаимодействующих с высокочастотным электромагнитным полем // ДАН. 2001. Т. 377. №3. С. 340 – 343.
5. Саяхов Ф.Л., Хакимов В.С., Арутюнов А.И., Демьянов А.А., Байков Н.М. Диэлектрические свойства и агрегативная устойчивость водонефтяных эмульсий // Нефтяное хозяйство. – 1979. – № 1. – С. 36 – 39.
6. Саяхов Ф.Л., Ковалева Л.А., Насыров Н.М., Галимбеков А.Д. Влияние высокочастотного электромагнитного поля на перекрестные эффекты переноса в многокомпонентных системах // Магнитная гидродинамика. 1998. Т. 34. № 2. С. 148 – 157.

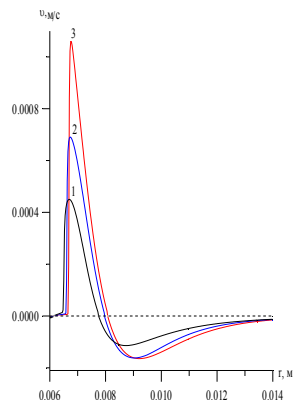


Рис. 3. Распределение скорости движения глобул воды в цилиндрическом конденсаторе. $c\theta=0,2$. 1 – $t=10$ с; 2 – $t=20$ с; 3 – $t=30$ с.

движения капель воды (рис. 3). В результате действия противоположно направленных сил глобулы воды отходят и от внутреннего, и от внешнего электродов и концентрируются между ними с максимумом ближе к внутреннему электроду.

Выводы

В результате математического моделирования процесса воздействия ВЧ электрического поля на эмульсию, получены близкие к экспериментальным значения температуры. При этом было определено значение коэффициента диффузионного перемешивания $D=4 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$. Полученное значение коэффициента диффузионного перемешивания (порядка коэффициента эффективной диффузии в пористой среде) можно объяснить тем, что глобулы воды, сталкиваясь с молекулами нефти, рассеиваются, и это увеличивает коэффициент диффузионного перемешивания. Кроме того, на значение коэффициента, вероятно, влияет неоднородное электрическое поле большой напряженности. Всё это приводит к тому, что коэффициент диффузионного перемешивания имеет значительную величину.

$[R_1]_0, \left(\frac{\text{моль}}{\text{л}}\right) \cdot 10^6$	2,66	17,5	20,16
---	------	------	-------

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ №08-01-97028-р_поволжье_а.

Литература

1. Ермаков Ю.И., Захаров В.А. // Усп. хим. – 1972. – Т.41. №3. – С. 377-400.
2. Монаков Ю.Б. Лекции по химии полимеров. – Уфа: БГУ, 2004.
3. Усманов Т.С., Спивак С.И., Усманов С.М. Обратные задачи формирования молекулярно-массовых распределений. – М.: Химия, 2004. – 252 с.
4. Френкель С.Я. Введение в статистическую теорию полимеризации. – М.: Наука, 1965. – 267 с.
5. Усманов Т.С., Максютובה Э.Р., Гатауллин И.К., Спивак С.И., Усманов С.М., Монаков Ю.Б. // Высокомолек. соед. Серия А.-2003.-Т.45. №2.- С. 181-187.
6. Усманов Т.С., Бигаева Л.А., Усманов С.М. // Башкирский хим. журнал. – 2007. – Т.14. №5. – С. 7-14.

Математическое описание ионно-координационной полимеризации при взаимодействии тетрахлорида титана с триметилалюминием

Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М.

Институт нефтехимии и катализа РАН, irekmars@mail.ru

Аннотация

Представлено математическое описание реакции взаимодействия $TiCl_4 + AlR_3$ с получением алкилированного производного титана. Решение прямой кинетической задачи с модулем численного решения KUT_MERS из информационно-аналитической системы обратных задач химической кинетики (ИАС ОЗХК) [1], не позволило получить достоверные результаты. Построен неявный алгоритм решения систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений 1-го порядка (СОНДУ1 – SONDU1) с заданными начальными условиями проведения реакции.

Введение

В работе [2], методами математического моделирования первого уровня (квантово-химические расчеты), определены вероятные кинетические константы скорости реакции зарождения активных центров (АЦ) ионно-координационной полимеризации при взаимодействии тетрахлорида титана с триметилалюминием (табл. 1).

Для подтверждения констант скоростей реакции на следующем уровне моделирования (атомно-молекулярной -наноуровень - <100 нм) необходимо решать прямую кинетическую задачу – численное решение уравнений математического описания процесса зарождения АЦ в виде СОНДУ. Для построения кинетической модели, на начальном этапе проведен стехиометрический анализ стадии алкилирования Ti (IV) в каталитической системе $TiCl_4/Al(CH_3)_3$. [3].

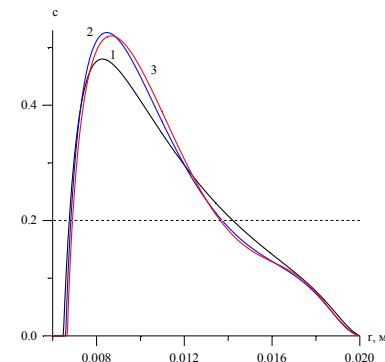


Рис. 2. Распределение концентрации глобул воды в цилиндрическом конденсаторе $c_0=0,2$. 1 – $t=10$ с; 2 – $t=20$ с; 3 – $t=30$ с. Горизонтальная пунктирная линия – $c = c_0$.

Численное определение коэффициента диффузии

Расчеты проводились методом конечных разностей по неявной схеме. При расчете использованы значения термодиффузионных коэффициентов, полученных в работе [6] путем сравнения экспериментального и математического моделирования: $\alpha_t = 0,0025 \text{ K}^{-1}$; $\alpha_t^e = 0,115 \text{ K}^{-1}$. Остальные параметры среды: $\rho_n^0 = 848 \text{ кг/м}^3$; $\rho_e^0 = 1000 \text{ кг/м}^3$; $c_n = 1885 \text{ Дж/кг}\cdot\text{K}$; $c_e = 4190 \text{ Дж/кг}\cdot\text{K}$; $\lambda_n = 0,125 \text{ Вт/м}\cdot\text{K}$; $\lambda_e = 0,582 \text{ Вт/м}\cdot\text{K}$; $r_0 = 5,5 \cdot 10^{-5} \text{ м}$; $T_0 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$; $\eta_{0e} = 0,00142 \text{ Па}\cdot\text{с}$; $\gamma_e = 0,0211 \text{ K}^{-1}$; $\varepsilon_e' = 81$; $tg\delta_e = 0,0025$.

Коэффициент диффузионного перемешивания подбирался таким образом, чтобы результаты экспериментов и математического моделирования достигли наилучшего совпадения. Из рис. 1 видно, что вследствие неоднородного электрического поля, распределение температуры имеет нелинейный характер и достигает максимальных, растущих во времени значений вблизи внутреннего электрода. В то же время, глобулы воды достаточно быстро концентрируются ближе к центру между обкладками конденсатора (рис. 2), и характер распределения концентрации со временем практически не меняется. От внутреннего электрода к центру капли воды двигает сила термодиффузии и электротермодиффузии. От внешнего электрода – пондеромоторная сила. Это подтверждается и соответствующим распределением по пространству скорости

Схема химических превращений и вероятные константы скорости реакций зарождения АЦ

№	Прямая реакция	КР(i), константы прямой реакции	Обратная реакция	КО(i), константы обратной реакции
1	X(1)+X(1)→X(2)	1.e+9	X(2)→X(1)+X(1)	7.32128e-4
2	X(1)+X(3)→X(4)	3.44532e+7	X(4)→X(1)+X(3)	2.47222e+1
3	X(4)→X(5)	1.67005e+2	X(5)→X(4)	1.e+9
4	X(5)→X(6)	1.e+9	X(6)→X(5)	1.88328e+2
5	X(6)→X(7)	1.01055e+3	X(7)→X(6)	6.01903e+5
6	X(7)+X(8)→X(9)	1.36619e+6	X(9)→X(7)+X(8)	2.47222e+1
7	X(9)→X(10)	1.e+9	X(10)→X(9)	2.13455e+5
8	X(8)+X(8)→X(11)	1.e+9	X(11)→X(8)+X(8)	2.30527e-11

где X(1)=Al(CH₃)₃, X(2)=Al₂(CH₃)₄(H₃C)₂, X(3)=TiCl₄, X(4)= TiCl₄ Al(CH₃)₃, X(5)= TiCl₄ CH₃Al(CH₃)₂, X(6)= TiCl₄ CH₃Al(CH₃)₂Cl, X(7)=CH₃TiCl₃, X(8)=Al(CH₃)₂Cl, X(9)= CH₃TiCl₃ Al(CH₃)₂Cl, X(10)= CH₃TiCl₂ Cl₂Al(CH₃)₂, X(11)=(H₃C)₂AlCl₂Al(CH₃)₂.

Как видно из таблицы 1, минимальное и максимальное значение констант отличаются на 20 порядков. Как известно [4] СОНДУ, описывающие поведение как быстрой, так медленной подсистемы, называются жесткими.

Актуальным стал вопрос реализовать и добавить ИАС ОЗЖК модуль численного метода решения СОНДУ для математического описания сложных каталитических реакций, включающий в себя так и быстрые, так и медленные частные реакции.

Кинетические уравнения и математическое описание процесса зарождения АЦ ионно-координационной полимеризации при взаимодействии тетрахлорида титана с триметилалюминием

Согласно закону действующих масс кинетические уравнения для схемы из таблицы 1 имеет следующий вид

20% нагревалась в среднем до 50 °С. Искусственная водонефтяная эмульсия готовилась из нефти Туймазинского и Ромашкинского месторождений и водопроводной воды.

Зависимости диэлектрических характеристик нефти от температуры приняты по данным работы [5] и имеют следующий вид:

$$\varepsilon'(T) = \varepsilon_{0n} (1 - \gamma_1 (T - T_0)), \quad (15)$$

где $T_0=20$ °С; $\varepsilon_{0n}=2,9$; $\gamma_1=0,00287$ К⁻¹

$$\operatorname{tg} \delta(T) = \begin{cases} \operatorname{tg} \delta_{01} (1 + \gamma_2 (T - T_0)), & T_0 \leq T \leq T_{02} \\ \operatorname{tg} \delta_{02} (1 + \gamma_3 (T - T_{02})), & T > T_{02} \end{cases}, \quad (16)$$

где $\operatorname{tg} \delta_{01}=0,03$; $\gamma_2=0,107$ К⁻¹; $\operatorname{tg} \delta_{02}=0,19$; $\gamma_3=0,0193$ К⁻¹; $T_{02}=70$ °С.

Зависимость вязкости нефти и воды от температуры были аппроксимированы в виде экспонент:

$$\eta_n = \eta_{0n} \exp(-\gamma_n (T - T_0)), \quad (17)$$

$$\eta_w = \eta_{0w} \exp(-\gamma_w (T - T_0)), \quad (18)$$

где $\eta_{0n}=0,01561$ Па•с; $\gamma_n=0,02902$ К⁻¹; $\eta_{0w}=0,00142$ Па•с; $\gamma_w=0,0211$ К⁻¹.

Пространственное распределение напряженности электрического поля между обкладками конденсатора выражалось формулой:

$$\vec{E} = \frac{U}{r} \ln \frac{r_2}{r_1}, \quad (19)$$

где U – разность потенциалов между электродами конденсатора.

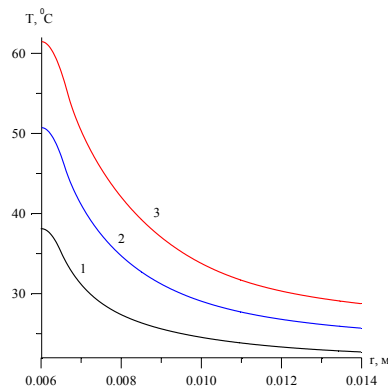


Рис. 1. Распределение температуры в цилиндрическом конденсаторе. $c_0=0,2$. 1 – $t=10$ с; 2 – $t=20$ с; 3 – $t=30$ с.

Таблица 2.

Уравнения для скоростей реакций зарождения АЦ

$$\begin{aligned} W(1) &= KP(1) \cdot X(1) \cdot X(1) - KO(1) \cdot X(2) \\ W(2) &= KP(2) \cdot X(1) \cdot X(3) - KO(2) \cdot X(4) \\ W(3) &= KP(3) \cdot X(4) - KO(3) \cdot X(5) \\ W(4) &= KP(4) \cdot X(5) - KO(4) \cdot X(6) \\ W(5) &= KP(5) \cdot X(6) - KO(5) \cdot X(7) \cdot X(8) \\ W(6) &= KP(6) \cdot X(7) \cdot X(8) - KO(6) \cdot X(9) \\ W(7) &= KP(7) \cdot X(9) - KO(7) \cdot X(10) \\ W(8) &= KP(8) \cdot X(8) \cdot X(8) - KO(7) \cdot X(11), \end{aligned}$$

где X(i) - концентрации веществ (мольные доли), участвующих в реакции; W(i) - скорость j-ой стадии (1/с); KP(i) = KP_i⁰ · exp(-E_i⁻ / RT); KO(i) = KO_i⁰ · exp(-E_i⁺ / RT); E_i⁻, E_i⁺ - энергии активации прямой и обратной реакции, соответственно (кДж/моль); R - газовая постоянная, равная 8,31 Дж/(моль·К); T- температура, К; KP_i⁰, KO_i⁰ - предэкспоненциальные множители, 1/с.

Математическое описание имеет следующий вид

F(i)=dX(i)/dt:

$$\begin{aligned} F(1) &= -2 \cdot W(1) - W(2) \\ F(2) &= W(1) \\ F(3) &= -W(2) \\ F(4) &= W(2) - W(3) \\ F(5) &= W(3) - W(4) \\ F(6) &= W(4) - W(5) \\ F(7) &= W(5) - W(6) \\ F(8) &= W(5) - W(6) - 2 \cdot W(8) \\ F(9) &= W(6) - W(7) \\ F(10) &= W(7) \\ F(11) &= W(8) \\ X(i) &= 0, i = 3, \dots, 11 \end{aligned}$$

Н
ача
льн
ые
дан
ные
:
X
(1)=
1.35
E-07
X
(2)=
2.50
E-02

$$q = \frac{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_s' \operatorname{tg} \delta_s}{2} \left(\vec{E}_0 \vec{E}_0^* \right); \quad (4)$$

$$\rho_n = \rho_n^0 (1 - c); \quad \rho_n^0 = \text{const}; \quad (7)$$

$$\rho_e = \rho_e^0 c; \quad \rho_e^0 = \text{const}; \quad (8)$$

$$\rho_s = \rho_n + \rho_e; \quad c_s = c_n (1 - c) + c \cdot c_e; \quad (9)$$

$$\lambda_s = \lambda_n (1 - c) + c \lambda_e; \quad (10)$$

$$\eta_i = \eta_{0i} \exp(-\gamma_i \Delta T), \quad i = n, e, \quad (11)$$

где $\Delta T = T - T_0$; T_0 – первоначальная температура эмульсии; ρ_n^0 и ρ_e^0 – истинные плотности несущей и диспергированной фаз; D – коэффициент диффузионного перемешивания; α_i , α_i^e – параметры термодиффузии и электротермодиффузии; \vec{E}_0 – комплексная амплитуда ЭМ поля; ε_0 – электрическая постоянная; ε_s' , $\operatorname{tg} \delta_s$ – относительная диэлектрическая проницаемость и тангенс угла диэлектрических потерь смеси нефти и воды; η_{0n} , η_{0e} – первоначальная вязкость нефти и воды; γ_n , γ_e – коэффициенты, учитывающие зависимость вязкости нефти и воды от температуры; ρ_s , c_s , λ_s – плотность, удельная теплоемкость и теплопроводность смеси нефти и воды; c – объемная концентрация частиц.

Для расчетных исследований принято, что обкладки конденсатора теплоизолированы и непроницаемы для капелек воды. Концентрация частиц на внешней обкладке конденсатора принята равной нулю, т.к. согласно известным экспериментальным данным, на стенках емкости с эмульсией всегда находится дисперсионная среда:

$$v(0, r) = 0, \quad v(t, r_2) = 0; \quad (12)$$

$$T(0, r) = T_0, \quad \frac{\partial T(t, r_1)}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T(t, r_2)}{\partial r} = 0; \quad (13)$$

$$c(0, r) = c_0, \quad \frac{\partial c(t, r_1)}{\partial r} = 0, \quad c(t, r_2) = 0, \quad (14)$$

где r_1 , r_2 – радиусы внутреннего и внешнего обкладок конденсатора, c_0 – первоначальная объемная концентрация капелек воды в эмульсии.

Экспериментальные данные по воздействию ВЧ электрического поля на эмульсию приведены в [5]. В этой работе модель вертикального цилиндрического электродегидратора представляла собой коаксиальную систему двух латунных труб диаметрами 40 и 12 мм. В качестве источника ВЧ напряжении использовался генератор с частотой 13,56 МГц. Напряжение питания 1,3 кВ. Время обработки эмульсии полем составляло 30 с. За это время эмульсия с начальным содержанием воды от 5 до

В данной работе решается задача о поведении эмульсии типа «вода в масле» в диффузионном приближении, учитывая что скорости относительного движения фаз малы, а истинные плотности воды и нефти различаются незначительно. Цель работы – на основе сопоставления численного моделирования и известных экспериментальных данных оценить коэффициент диффузионного перемешивания в рамках предлагаемого диффузионного подхода.

В связи с тем, что в рассматриваемом случае электрическое поле и распределение температуры неоднородны, в рамках диффузионного подхода учитываются, как и в случае гомогенной среды, перекрёстные эффекты переноса – термо- и электротермодиффузия [4]. Кроме того, в некотором смысле эмульсию можно рассматривать как аналог пористой среды (нефть) с фильтрующимся в нем флюидом (водой). В таком случае к системе уравнений движения и теплопроводности можно добавить уравнение диффузии, а входящий в него коэффициент назвать коэффициентом диффузионного перемешивания.

Постановка задачи

Полагается, что на частицу, движущуюся в покоящейся жидкости со скоростью \vec{U} , действует сила сопротивления $\vec{F} = k\vec{U}$; $k = \text{const}$. Коэффициент k может быть определен по формуле Стокса [2]:

$$k = 6\pi\eta_n r_0,$$

где r_0 – радиус капли; η_n – вязкость дисперсионной среды.

Скорость движения частиц диспергированной фазы направлена радиально, несущая жидкость покоится. Ось цилиндрической системы координат направлена вдоль оси конденсатора. Система уравнений, описывающих движение глобул воды в эмульсии под действием силы электромагнитного происхождения, нагрев эмульсии вследствие возникновения в ней под действием поля распределенных источников тепла, а также пространственно-концентрационное распределение диспергированной фазы имеет вид:

$$\rho_e \frac{\partial v}{\partial t} + \rho_e v \frac{dv}{dr} = -\frac{3kcv}{4\pi_0^3} + \frac{c}{2} \frac{\partial (\bar{\epsilon}_c \bar{E}_0 \bar{E}_0^*)}{\partial r}; \quad \epsilon_c = \frac{\partial (\epsilon_0 \epsilon_s')}{\partial c}; \quad (1)$$

$$\rho_s c_s \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_s r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + q; \quad (2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{D}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) - v \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\alpha_r + \alpha_r^e) D \frac{\partial T}{\partial r} \right); \quad (3)$$

Для выбора эффективного метода интегрирования СОНДУ (1) необходимо установить: метод должен быть одношаговым (методы Рунге-Кутты) или многошаговым (методы типа предиктор-корректор), с автоматическим выбором шага или с постоянным шагом интегрирования. Входящий в ИАС ОЗХК модуль решения СОНДУ – есть подпрограмма KUT_MERS, реализующая одношаговый метод Кутта-Мерсона [5], с автоматическим выбором шага, 4-го порядка точности с пятью вычислениями правых частей на каждом шаге интегрирования и контролем локальной величины ошибки по Мерсону. Доказано, что явный линейный многошаговый метод не может быть А-устойчивым [6]. Поэтому, для численного решения математического описания реакции реакции ионнокоординационной полимеризации при взаимодействии тетраглорида титана с триметилалюминием необходимо разрабатывать неявные схемы [7].

Первоначальный неявный алгоритм решения СОНДУ для математического описания (1).

$$\underline{XN(i)} = (\underline{XS(i)} + \underline{H} * \underline{B(i)}) / (1 + \underline{H} * \underline{AK(i)}) \quad (i=1,11),$$

$$\text{где } \underline{AK(1)} = 2 * \underline{A(1)} * \underline{XS(1)} + \underline{A(2)} * \underline{XS(3)}$$

$$\underline{AK(2)} = \underline{A(9)}$$

$$\underline{AK(3)} = \underline{A(2)} * \underline{XN(1)}$$

$$\underline{AK(4)} = \underline{A(10)} + \underline{A(3)}$$

$$\underline{AK(5)} = \underline{A(11)} + \underline{A(4)}$$

$$\underline{AK(6)} = \underline{A(12)} + \underline{A(5)}$$

$$\underline{AK(7)} = \underline{A(13)} * \underline{XS(8)} + \underline{A(6)} * \underline{XS(8)}$$

$$\underline{AK(8)} = \underline{A(13)} * \underline{XN(7)} + \underline{A(6)} * \underline{XN(7)} + 2 * \underline{A(8)} * \underline{XS(8)}$$

$$\underline{AK(9)} = \underline{A(14)} + \underline{A(7)}$$

$$\underline{AK(10)} = \underline{A(15)}$$

$$\underline{AK(11)} = \underline{A(16)}$$

$$\underline{B(1)} = 2 * \underline{A(9)} * \underline{XS(2)} + \underline{A(10)} * \underline{XS(4)}$$

$$\underline{B(2)} = \underline{A(1)} * \underline{XN(1)} * \underline{XN(1)}$$

$$\underline{B(3)} = \underline{A(10)} * \underline{XS(4)}$$

$$\underline{B(4)} = \underline{A(2)} * \underline{XN(1)} * \underline{XN(3)} + \underline{A(11)} * \underline{XS(5)}$$

$$\underline{B(5)} = \underline{A(3)} * \underline{XN(4)} + \underline{A(12)} * \underline{XS(6)}$$

$$\underline{B(6)} = \underline{A(4)} * \underline{XN(5)} + \underline{A(13)} * \underline{XS(7)} * \underline{XS(8)}$$

$$\underline{B(7)} = \underline{A(5)} * \underline{XN(6)} + \underline{A(14)} * \underline{XS(9)}$$

$$\underline{B(8)} = \underline{A(5)} * \underline{XN(6)} + \underline{A(14)} * \underline{XS(9)} + 2 * \underline{A(16)} * \underline{XS(11)}$$

$$\underline{B(9)} = \underline{A(6)} * \underline{XN(7)} * \underline{XN(8)} + \underline{A(15)} * \underline{XS(10)}$$

$$\underline{B(10)} = \underline{A(7)} * \underline{XN(9)}$$

$$\underline{B(11)} = \underline{A(8)} * \underline{XN(8)} * \underline{XN(8)},$$

где $X_S(i)$, $X_N(i)$ - концентрации веществ (мольные доли), участвующих в реакции, предыдущего и последующего шага, соответственно; $A(1)$ - $A(8)$ равно $KP(i)$, $i=1, \dots, 8$, $A(9)$ - $A(16)$ равно $KO(i)$, $i=1, \dots, 8$, значения которых представлены выше.

Заключение

Численная реализация полученного алгоритма планируется в два этапа:

- 1) локальная линеаризация, т.е. способ приближения СОНДУ на шаге интегрирования линейной, и оценка величины возникающей при этом ошибки;
- 2) выбор способа решения линейной системы

Литература

1. Губайдуллин И.М., Спивак С.И. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики.- Системы управления и информационные технологии. – 2008. - №1.1(31). - С. 150-153
2. Валиева О.И., Хурсан С.Л., Муллагалиев И.Р., Монаков Ю.Б. Механизм зарождения активных центров ионно-координационной полимеризации при взаимодействии тетраоксида титана с триметилалюминием. - Вестник Башкирского Университета. – 2007. – Вып. 4. – С. 24-27
3. Валиева О.И., Губайдуллин И.М., Хурсан С.Л., Спивак С.И. Стехиометрический анализ стадии алкилирования $Ti(IV)$ в каталитической системе $TiCl_4/Al(CH_3)_3$. - Всероссийская научно-практическая конференция “Обратные задачи в приложениях”. 19–20 июня 2008 г.-Бирск.
4. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике.- М.: Наука, 1984. 280 с
5. Lukehart P.M. – Commen. ACM, 1963 vol. 6, p. 737-738
6. Dahlquist G. - BIT, 1963, vol.3, p.27-43.
7. Gear C.W. Numerical initial value problems in ordinary differential equations. - Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1971. p. 252

Диффузионный подход при математическом моделировании поведения водонефтяных эмульсий в электромагнитном поле

Закирьянова Г.Т., Насыров Н.М., Мусин А.А.

БашГУ, Уфа, Email: Liana@ic.bashedu.ru.

Аннотация

Предложена математическая модель воздействия высокочастотного электрического поля на водонефтяную эмульсию в вертикальном цилиндрическом конденсаторе. На основе сопоставления численного решения задачи с экспериментальными исследованиями определен коэффициент диффузионного перемешивания.

Введение

Для интенсификации деэмульгирования эмульсии широко применяют переменное электрическое поле [1]. В данной работе предлагается математическая модель процесса воздействия высокочастотного (ВЧ) электрического поля на водонефтяную эмульсию в вертикальном цилиндрическом конденсаторе.

Существуют два подхода для описания поведения двухфазных систем во внешних физических полях: многоскоростной и диффузионный [2, 3]. Диффузионный подход используется, как правило, для описания движения гомогенных смесей. Относительные движения компонент влияют лишь на их концентрацию, определяются диффузионным механизмом (столкновение молекул при их хаотическом движении). Многоскоростной подход используется для описания движения гетерогенных смесей (эмульсий, пузырьковых жидкостей, водонасыщенных грунтов и т.д.), когда скорости фаз не совпадают [3]. В некоторых случаях, когда инерционные эффекты относительного движения фаз незначительны, для описания гетерогенных смесей можно использовать и диффузионное приближение. Например, не очень быстрые течения концентрированных эмульсий, когда истинные плотности материала фаз достаточно близки между собой [3].

цилиндр с радиусом направляющей 10м. Минимизация функционала осуществлялась методом Хука – Дживса.

Сравнительный анализ полученных результатов позволяет сделать вывод, об эффективном использовании нейросетей для решения прямых и обратных задач геоэлектрики.

Литература

1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1986. – 288 С.
2. Беляева М.Б., Кризский В.Н. Математическое моделирование электрических полей в цилиндрических кусочно-однородных средах со сплайн-аппроксимацией границ // Материалы 33-й сессии Международного семинара им. Д.Г.Успенского, 2006, С.30-34.
3. Кильдибекова Г.Я. Поле точечного источника тока в горизонтально-слоистой среде с цилиндрическим включением // Численные методы решения уравнений математической физики. – Уфа: БФАН СССР, 1986, С.64-74.
4. Авеньян Э.Д. Алгоритмы настройки многослойных нейронных сетей // Автоматика и телемеханика. – 1995. – N 5. – С.106-118.
5. Беляева М.Б., Кризский В.Н. Программа расчета поля точечного источника постоянного тока в горизонтально-слоистой среде в присутствии цилиндрического включения с направляющей, аппроксимацией сплайном // зарегистр. разработка, М.: ОФАП ФАО, 2006 – №7008. – 10 с.
6. Крисиллов В.А., Олешко Д.Н., Трутнев А.В. Применение нейронных сетей в задачах интеллектуального анализа информации // Труды Одесского политехнического университета. – Вып.2 (8). 1999. – С. 134
7. Нейроинформатика / А.Н. Горбань, В. Л. Дунин-Барковский, А.Н. Кирдин и др. – Новосибирск: Наука. Сибирское предприятие РАН, 1998. - 296с.
8. Садовой А. В., Сотник С. Л. Алгоритмы обучения нейронных сетей будущего // <http://www.alicetele.com/articles/algo/algo.htm>

Обратная задача поиска областей пространства кинетических параметров для реакции гидроалюминирования олефинов

Аристархов А.В., Спивак С.И., Губайдуллин И.М.

ИНК УНЦ РАН, Уфа, Anton.Aristarkhov@gmail.com

Аннотация

Для нахождения областей пространства кинетических параметров описывающих экспериментальные данные разработано математическое описание для решения прямой кинетической задачи - системы обыкновенных дифференциальных уравнений, разработан алгоритм решения обратной кинетической задачи с целью определения кинетических параметров \square минимизации критерия отклонения экспериментальных и расчетных данных. В работе приводятся результаты расчетов в виде областей по параметрам кинетических констант.

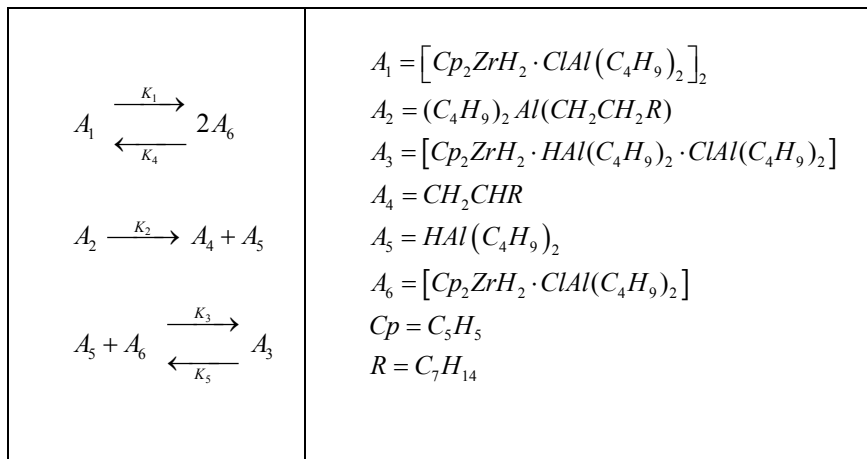
Введение

Кинетический анализ химических систем обычно имеет дело с задачами двух типов, которые традиционно называют прямой и обратной. Прямая кинетическая задача – это расчет состава многокомпонентной реагирующей смеси и скорости реакции на основе заданной кинетической модели с известными параметрами. Классическая постановка обратных задач состоит в поиске констант минимизирующих критерий соответствия экспериментальных данных.

Сложность задачи состоит в том, что измеряются не все компоненты решения, а только их часть – недоинформативность эксперимента. Результатом такой недоинформативности является неединственность решения обратной задачи. Описывают экспериментальные данные одинаково хорошо целые области пространства кинетических параметров. Нами, в качестве соответствия расчету измерению, используется система неравенств, которая характеризует вариацию экспериментальных данных в пределах величины их погрешности.

Кинетическая модель реакции гидроалюминирования олефинов

Полученные экспериментальные данные по изучению реакции гидроалюминирования олефинов легли в основу кинетической модели. Последовательность химических превращений для реакции имеет следующий вид [1]:



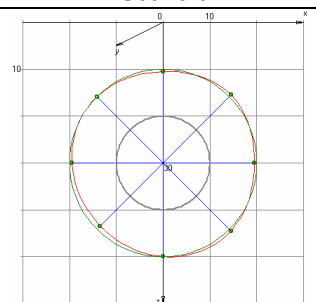
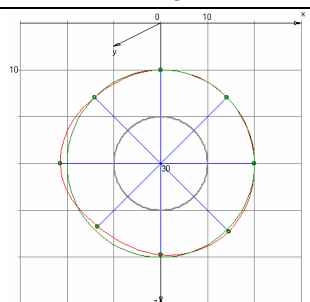
Система дифференциальных уравнений:

$\begin{cases} F_1 = \frac{dX_1}{dt} = -W_1 \\ F_2 = \frac{dX_2}{dt} = -W_2 \\ F_3 = \frac{dX_3}{dt} = W_3 \\ F_4 = \frac{dX_4}{dt} = W_2 \\ F_5 = \frac{dX_5}{dt} = W_2 - W_3 \\ F_6 = \frac{dX_6}{dt} = 2W_1 - W_3 \end{cases}$	$W_1 = k_1X_1 - k_4X_6^2$ $W_2 = k_2X_2$ $W_3 = k_3X_5X_6 - k_5X_3$ <p style="text-align: center;">где $X_1 \dots X_6$ концентрации веществ $A_1 \dots A_6$ соответственно</p>
---	--

ходных данных равна нулю.

Таблица 4

Решение обратной задачи с помощью «GeoPole» и ИНС

		«GeoPole»	ИНС
Графическое решение			
Геометрические параметры описания	s0, м	20	20
	s1, м	20,5	20
	s2, м	20	20
	s3, м	20,5	20
	s4, м	20	21,5
	s5, м	19,5	19
	s6, м	20	19,5
	s7, м	20	20
Погрешность решения d, %		5,36	5,79
Значение функционала $F_1(\bar{s})$		1,05E-6	1,39E-6
Количество обращений к прямой задаче		109	97
Время (чч:мм:сс)		00:13:56	00:00:23

Полученные значения демонстрируют найденное в этом случае квази-решение задачи. В качестве начального приближения брался круговой

глубине 20 м. Кривая 1 - график распределения потенциала, рассчитанный с помощью программы «GeoPole», кривая 2 – с помощью ИНС.

Таким образом, значения потенциала рассчитанные с помощью программы «GeoPole» и ИНС отличаются не более чем 3%, а время решения прямой задачи при использовании ИНС значительно снижается (см. табл. 3)

Таблица 3

Время решения прямой задачи (с.)

«GeoPole»	ИНС
0,666	0,047

В случае решения обратной задачи поиска направляющей цилиндрического включения сложной геометрии, как конечномерного вектора ограниченных параметров, сокращение времени счета при использовании ИНС стало значительно ощутимее.

В таблице 4 представлены решения обратной задачи, реализованные численным и нейросетевым методами. Оба метода точно определили форму исследуемого объекта. Вычисления проводились при следующих значениях параметров: отношение проводимости вмещающего пространства к проводимости включения $\sigma_1/\sigma_0 = 0.01$, сила тока $I=1A$, цилиндр размещался на глубине 30 м, площадка наблюдения $E: [-20, 20] \times [-20, 20]$ с количеством источников/приемников $p=16$, погрешность в ис-

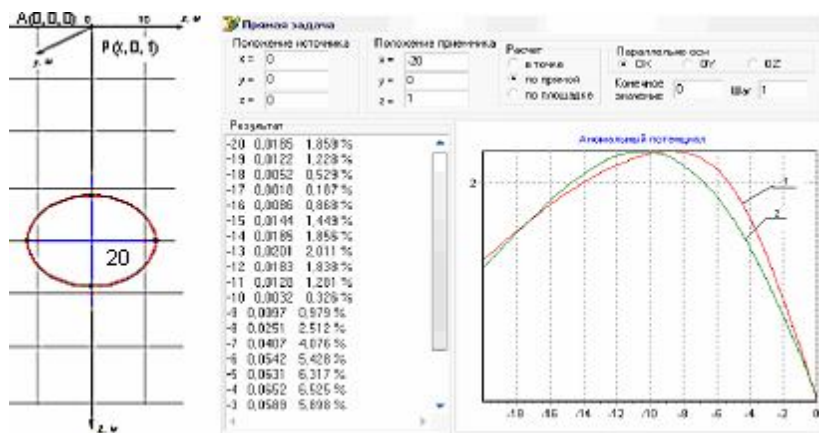


Рис.2. Профили аномального потенциала по оси Ox

Матрица стехиометрических коэффициентов рассматриваемой реакции имеет вид:

	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆
W ₁	-1	0	0	0	0	2
W ₂	0	-1	0	1	1	0
W ₃	0	0	1	0	-1	-1

В ходе обратной задачи определяется область по кинетическим константам $k_1...k_5$, каждая точка которой описывает измерение с заданным уровнем точности. Такая постановка вопроса принадлежит Канторовичу Л. В. [2]:

$$\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m |X_j^q - X_j^p| \leq \varepsilon_1$$

$$\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m |X_j^q - X_j^p| \leq \varepsilon_3$$

ε_1 и ε_3 характеризуют погрешности при измерении X_1 и X_3 , m - число замеров компонент

Результаты расчетов

Для решения поставленной задачи использован вычислительный кластер, поскольку требуется большой объем вычислений. Был создан комплекс программ на языке Fortran-77 с использованием библиотеки обмена сообщениями Message Passing Interface, при помощи которого были найдены области пространства кинетических параметров описывающие экспериментальные данные.

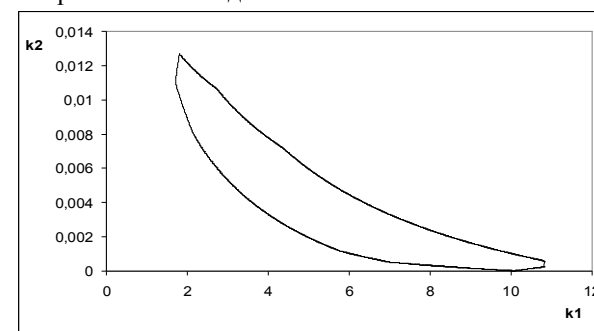


Рис. 1 Область для констант k_1 и k_2 .

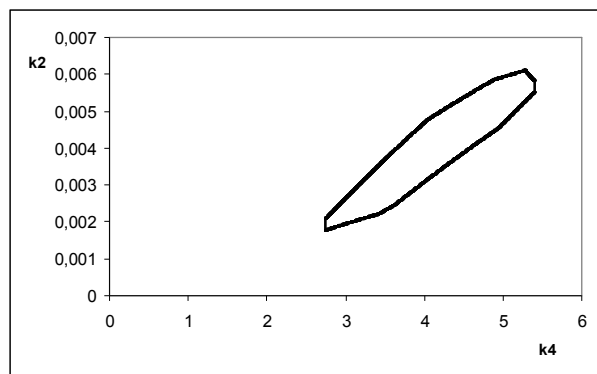


Рис. 2 Область для констант k_4 и k_2 .

Литература

1. Вильданова Р.Ф. Новые гидроталлирующие реагенты на основе комплексов L_2ZrH_2 и X_nAlR_{3-n} и механизм их действия: Автореф. дис. на соискание уч. ст. канд. химических наук. Уфа. 2007. – 25 С.
2. Канторович Л.В. О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений // Сибирский Математический Журнал. – 1962. – Т. 3, №. 5. – С. 701-709.

Таблица 1

Результат обучения ИНС

Обозначение		Значение
MSE	среднее квадратическое отклонение	0,001292013
NMSE	нормализованное среднеквадратическое отклонение	0,014528599
MAE	среднее арифметическое отклонение	0,018791565
Min Abs Error	минимальное арифметическое отклонение	6,51908E-05
Max Abs Error	максимальное арифметическое отклонение	0,412164114
r	коэффициент линейной корреляции	0,992712287

Таблица 2

Параметры обучения ИНС

Вид направляющей	эллипс произвольной формы	круг произвольной формы
количество входов	17	17
Количество выходов	1	1
Слоев	3 (один скрытый)	3 (один скрытый)
Обучающих наборов	2143	2296
Проходов обучения	15	13
Время обучения (ч)	19	17

Для оценки погрешности решения прямой задачи ниже приведены графики распределения потенциала с помощью искусственной нейронной сети и программы «GeoPole» (рис. 2).

В данном случае вычислительный эксперимент проводился при следующих параметрах: вид потенциала – аномальный, вид вмещающего пространства – полупространство, среда – однородная, вид направляющей – эллипс произвольной формы; $A(0,0,0)$ – положение источника; $P(x,0,1)$, $x \in [-20;30]$ – профиль приемника; отношение проводимости вмещающего пространства к проводимости включения $\sigma_1/\sigma_0 = 0.01$; сила тока $I=1A$; $a=11$ и $b=10$ – полуоси эллипса. Включение находилось на

Обоснованием возможности использования искусственных нейронных сетей для решения прямой задачи (1) –(6), служат свойства непрерывности потенциала, теоремы Колмогорова и Стоуна [7], которые решают проблему точного представления непрерывных функций с помощью функций одной переменной, а также обобщенная аппроксимационная теорема, естественным образом охватывающая и классическую теорему Стоуна, и аппроксимацию функций многих переменных суперпозициями и линейными комбинациями функций одной переменной [6].

Для реализации алгоритмов решения задач, рассмотренных выше, был разработан комплекс программ «GeoPole» для работы под ОС Windows 9X/2000/Me/XP [5]. В качестве средства разработки использовалась среда IDE Borland Delphi. С помощью программного комплекса были проведены исследования взаимного влияния различных параметров модели методом вычислительного эксперимента. Также было проведено сравнение результатов, полученных методом интегральных уравнений с аналитическим решением для случая одного кругового цилиндра в пространстве [3]. Численные эксперименты показали, что относительная погрешность приближенного решения не превышает 3%, что говорит о высокой эффективности методов. Единственным негативным моментом данных алгоритмов является продолжительное время счета программы, который может быть устранен в случае использования ИНС.

Для обучения нейронной сети (на основе данных, полученных при решении прямой задачи программой «GeoPole») использовалась программа NeuroSolutions, с помощью которой была разработана архитектура, реализована и обучена ИНС, моделирующая решение прямой задачи электроразведки цилиндрической кусочно – однородной среды. На основе полученной ИНС были созданы .dll – библиотеки и модифицированы в программу «GeoPole». Проводилось сравнение полученных решений прямой задачи с помощью программы «GeoPole» и с использованием нейронной сети.

В результате обучения и тестирования сети получены следующие характеристики: (табл.1, 2)

Индукционный период в реакции гидроалюминирования диизобутилалюминийхлорида

Губайдуллин И.М., Хилько А.В., Спивак С.И., Парфенова Л.В.

*БаиГУ, Уфа, irekmars@mail.ru,
ИНК УНЦ РАН, luda_parfenova@yahoo.com*

Аннотация

Для сложного механизма действия Zr, Al- гидридных комплексов в реакциях каталитического гидроалюминирования олефинов проведен стехиометрический анализ, построено математическое описание, разработана база данных химических и вычислительных экспериментов. Изучено влияние начального содержания катализатора Cp_2ZrCl_2 на формирование индукционного периода, найден набор констант скоростей стадий, обеспечивающий наличие индукционного периода и близость расчетных и экспериментальных данных для различных начальных концентраций.

Введение

Некоторые химические реакции характерны тем, что на начальном этапе их протекания имеется временной отрезок $[0; T]$, на котором наблюдается медленное изменение концентраций одного или нескольких веществ. При этом при выходе из этого отрезка происходит резкое увеличение или уменьшение концентрации этого вещества по сравнению с изменением концентрации на начальном отрезке $[0; T]$. Временной отрезок $[0; T]$, обладающий указанными свойствами, называется индукционным периодом данного вещества для этой химической реакции[1].

Теоретический анализ

Математически существование индукционного периода можно сформулировать следующим образом: пусть имеется система дифференциальных уравнений, описывающих химическую реакцию

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(X, K) \quad (1)$$

где $X = (x_1, x_2, \dots, x_i)$, $K = (k_1, k_2, \dots, k_j)$, $i = 1..n$, $j = 1..r$.

Здесь n , r - количество веществ и элементарных стадий соответственно, x_i - концентрации веществ X_i , k_j - кинетические константы реакции.

Согласно свойствам индукционного периода, для его существования требуется выполнение следующих двух условий[2]:

1) на временном интервале $[0; T]$ изменение концентрации некоторого вещества x_i должно быть достаточно малым, т.е.

$$|x_i(T) - x_i(0)| \leq \varepsilon, \text{ при малых } \varepsilon.$$

2) при выходе из этого интервала должно происходить резкое изменение концентрации этого вещества по сравнению с изменением на начальном интервале, т.е.

$$\frac{|x_i(T) - x_i(0)|}{T} \ll \frac{|x_i(T + \Delta T) - x_i(T)|}{\Delta T}, \text{ где } \Delta T > 0.$$

Имеются экспериментальные данные по концентрациям веществ с индукционным периодом. Задача ставится следующим образом: требуется найти константы скоростей стадий, которые обеспечат наличие индукционного периода. При этом найденные константы скоростей стадий должны обеспечить близость графиков, полученных по численным расчетам, с экспериментальными графиками при различных начальных концентрациях. Рассмотрим задачу на примере реакции гидроалюминирования олефинов алкилаланами. Экспериментально реакция изучалась в лаборатории структурной химии Института нефтехимии и катализа РАН.[3]. Кинетическая модель рассматриваемой химической реакции имеет вид[4]:

$\zeta(\bar{s}, t)$ – параметрически заданная направляющая, аппроксимированная сплайном, s_i – радиус векторы точек направляющей от известной внутренней прямой $O(x_u, y, z_u)$, $-\infty < y < \infty$. Направляющая цилиндра ищется как решение задачи [1] о минимизации функционала $\Psi[\bar{s}] = \Phi[\bar{s}] + \alpha F[\bar{s}]$, здесь функционал невязки $\Phi[\bar{s}] = \sum_{i=1}^r b_i \sum_{j=1, j \neq i}^r [u_{ij}^{(\bar{s})} - u_{ij}^{эксн}]^2$, и при $m_i \leq s_i \leq M_i$ – стабилизирующий функционал $F[\bar{s}] = d \sum_{i=1}^L \xi_i (s_i - m_i)^2 + e \sum_{i=1}^m \beta_i (s_i - M_i)^2$, где $\xi_i, \beta_i, i = \overline{1, L}$, d, e – весовые множители, $u_{ij}^{эксн} = u^{эксн}(P_j, A_i)$ – экспериментальные значения потенциала в точках $P_j \in E, j = \overline{1, r}$, $A_i \in E, i = \overline{1, r}, j \neq i$, а $u_{ij} = u(P_j, A_i)$ – решение прямой задачи в узлах E :

$$\Delta u_i(P) = -\frac{I}{2\sigma_i} \delta(x - x_0) \delta(y) \delta(z - z_0), P(x, y, z) \in \Omega_i; \quad (1)$$

$$\Delta u_i(P) = 0, P(x, y, z) \in \Omega_i, i = \overline{0, N}, i \neq l; \quad (2)$$

$$\left. \frac{\partial u_i(P)}{\partial n} \right|_{\gamma_0} = 0; \quad \left. \frac{\partial u_i(P)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, i = \overline{1, N}; \quad (3)$$

$$u_0(P)|_{S_0} = u_k(P)|_{S_0}; \quad \sigma_0 \left. \frac{\partial u_0(P)}{\partial n} \right|_{S_0} = \sigma_k \left. \frac{\partial u_k(P)}{\partial n} \right|_{S_0}; \quad (4)$$

$$u_i(P)|_{\gamma_i} = u_{i+1}(P)|_{\gamma_i}; \quad \sigma_i \left. \frac{\partial u_i(P)}{\partial n} \right|_{\gamma_i} = \sigma_{i+1} \left. \frac{\partial u_{i+1}(P)}{\partial n} \right|_{\gamma_i}, i = \overline{1, N-1}; \quad (5)$$

$$u(P) \rightarrow 0, P \rightarrow \infty, \quad (6)$$

где γ_i – нижняя граница слоя Ω_i , $i = \overline{1, N-1}$, γ_0 – «дневная» поверхность, n – вектор нормали, δ – функция Дирака. Условия (3) выражают изолированность границы «земля/воздух» и симметрию поля относительно плоскости $y = 0$ соответственно.

Решение прямой задачи (1) – (6) находится комбинированным методом интегральных преобразований и интегральных уравнений, формируемых на основе теории потенциала двойного электрического слоя [2]. На основе метода регуляризации А.Н. Тихонова [1] получено решение обратной задачи поиска направляющей цилиндрического включения сложной геометрии как конечномерного вектора ограниченных параметров, входящего в состав ее параметрического описания сплайн-функциями.

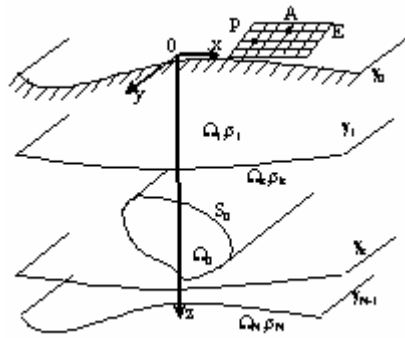


Рис.1.Кусочно-однородная цилиндрическая среда

наиболее часто встречающиеся геологические разрезы. Но при этом, как правило, строятся модели, не учитывающие искажения во входных данных, поэтому такой подход в большинстве случаев используется только для изучения свойств рассматриваемой системы. Как показала практика, искусственные нейронные сети способны работать с неидеальными данными. К тому же для решения математических моделей, реализуемых на компьютерах с помощью численных методов, часто затрачивается много времени.

В настоящей работе рассматривается построение алгоритма решения задачи для случая слоистой среды кусочно-постоянной проводимости с цилиндрической неоднородностью. Подобные задачи представляют интерес в электроразведке глубокозалегающих протяженных локальных включений, которые могут быть представлены с определенным приближением как бесконечные цилиндры.

Пусть в цилиндрической слоистой среде $\Omega = \bigcup_{i=1}^n \Omega_i$ с удельными электрическими проводимостями σ_i и параллельными образующими, в слое k находится цилиндрическое тело Ω_0 с границей S_0 , удельной электрической проводимостью σ_0 (рис.1).

Предположим, что в многосвязной дискретной области E , мощности $|E|=r^2$, являющейся подобластью Ω_1 априорно известна функция распределения потенциала $u^{экс}(A, P, \bar{\sigma}, S_0)$, где $S_0 = S_0(\bar{s}, t, y)$, $t \in [0, 2\pi)$, $-\infty < y < \infty$ – поверхность цилиндрического «звездного» включения, заданная параметрически, $\bar{s} = \{s_i | m_i \leq s_i \leq M_i, i = \overline{1, L}\}$ – L -мерный вектор ограниченных параметров,

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -w_1 + w_{11} + w_{12} - w_{16} \\ \frac{dx_2}{dt} &= -w_1 - w_2 - w_3 - w_5 + w_{10} - w_{11} + w_{12} - w_{15} + w_{16} \\ \frac{dx_3}{dt} &= w_1 - w_2 - w_{12} \\ \frac{dx_4}{dt} &= w_1 + w_3 - w_{10} - w_{12} + w_{15} \\ \frac{dx_5}{dt} &= w_2 - w_3 + w_5 \\ \frac{dx_6}{dt} &= w_2 + w_3 \\ \frac{dx_7}{dt} &= w_3 - 2w_4 - w_5 - w_6 - w_7 - w_8 + w_9 + 2w_{13} + w_{14} \\ \frac{dx_8}{dt} &= w_4 - w_{13} \\ \frac{dx_9}{dt} &= w_5 - w_6 + w_7 - w_9 + w_{11} + w_{14} - w_{16} \\ \frac{dx_{10}}{dt} &= w_6 - w_{14} \\ \frac{dx_{11}}{dt} &= -w_7 - w_8 \\ \frac{dx_{12}}{dt} &= w_7 \\ \frac{dx_{13}}{dt} &= w_8 - w_{10} + w_{15} \\ \frac{dx_{14}}{dt} &= w_8 - w_9 - w_{11} + w_{16} \\ \frac{dx_{15}}{dt} &= w_{10} - w_{15} \end{aligned} \right. \quad (2)$$

Вещества

- $x_1 = Cp_2ZrCl_2$
- $x_2 = ClAlBu_2$
- $x_3 = Cp_2ZrClBu_i$
- $x_4 = Cl_2AlBu_i$
- $x_5 = Cp_2ZrHCiClAlBu_2$

Скорости стадий:

- $w_1 = k_1x_1x_2$
- $w_2 = k_2x_2x_3$
- $w_3 = k_3x_2x_5$
- $w_4 = k_4x_7^2$
- $w_5 = k_5x_2x_7$

$$\begin{aligned}
x_6 &= C_4 H_8 & w_6 &= k_6 x_7 x_9 \\
x_7 &= Cp_2 ZrH_2 ClAlBu_2 & w_7 &= k_7 x_7 x_{11} \\
x_8 &= [Cp_2 ZrH_2 ClAlBu_2]_2 & w_8 &= k_8 x_7 x_{11} \\
x_9 &= HAlBu_2 & w_9 &= k_9 x_9 x_{14} \\
x_{10} &= Cp_2 ZrH_2 HAlBu_2 ClAlBu_2 & w_{10} &= k_{10} x_4 x_{13} \\
x_{11} &= CH_2 CHR & w_{11} &= k_{11} x_2 x_{14} \\
x_{12} &= Cp_2 Zr(CH_2 CH_2 R)Cl & w_{12} &= k_{12} x_3 x_4 \\
x_{13} &= Bu_2 Al(CH_2 CH_2 R) & w_{13} &= k_{13} x_8 \\
x_{14} &= Cp_2 ZrHCl & w_{14} &= k_{14} x_{10} \\
x_{15} &= ClBuAl(CH_2 CH_2 R) & w_{15} &= k_{15} x_2 x_{15} \\
Cp &= C_5 H_5 & w_{16} &= k_{16} x_1 x_9 \\
Bu &= C_4 H_9
\end{aligned}$$

Начальные концентрации: $x_1(0) = x_1^0$, $x_2(0) = x_2^0$, $x_3(0) = 0$, $x_4(0) = 0$, $x_5(0) = 0$, $x_6(0) = 0$, $x_7(0) = 0$, $x_8(0) = 0$, $x_9(0) = 0$, $x_{10}(0) = 0$, $x_{11}(0) = x_{11}^0$, $x_{12}(0) = 0$, $x_{13}(0) = 0$, $x_{14}(0) = 0$, $x_{15}(0) = 0$.

Для системы (2) должны выполняться уравнения балансов:

$$\begin{aligned}
10x_1 + 8x_2 + 14x_3 + 4x_4 + 18x_5 + 4x_6 + 18x_7 + 36x_8 + 8x_9 + 26x_{10} + \\
+ 2x_{11} + 12x_{12} + 10x_{13} + 10x_{14} + 6x_{15} &= c_1 \\
x_1 + x_3 + x_5 + x_7 + 2x_8 + x_{10} + x_{12} + x_{14} &= c_2 \\
2x_1 + x_2 + x_3 + 2x_4 + 2x_5 + x_7 + 2x_8 + x_{10} + x_{12} + x_{14} + x_{15} &= c_3 \\
x_2 + x_4 + x_5 + x_7 + 2x_8 + x_9 + 2x_{10} + x_{13} + x_{15} &= c_4 \\
x_{11} + x_{12} + x_{13} + x_{15} &= c_5 \\
10x_1 + 18x_2 + 19x_3 + 9x_4 + 29x_5 + 8x_6 + 30x_7 + 60x_8 + 19x_9 + 49x_{10} + \\
+ 3x_{11} + 14x_{12} + 22x_{13} + 11x_{14} + 13x_{15} &= c_6
\end{aligned}$$

Экспериментально измеряемыми характеристиками для данной реакции являются концентрации веществ X_{11} и X_{15} .

Методика

Система (2) решается с помощью следующей методики [5]:

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ЗАДАЧАХ ГЕОЭЛЕКТРИКИ

Беляева М.Б.

СГПА, Стрелитатамак, Beljaeva_MB@rambler.ru

Аннотация

В работе обосновывается использование нейросетевых технологий в задачах геоэлектрики. Описывается процесс выбора архитектуры и обучения нейронной сети для решения прямой задачи электроразведки в цилиндрических кусочно-однородных средах. Представлены вычислительные эксперименты и проведен анализ результатов.

Нарастающие информационные потоки в современном обществе, разнообразие информационных технологий, повышение сложности решаемых на компьютере задач увеличивают нагрузку на пользователя и ставят задачу переноса проблемы выбора и принятия решений с человека на ЭВМ. Одним из путей решения этой задачи является применение аналитических систем, которые могут быть составной частью прикладных программ.

В последние десятилетие в средствах массовой информации стала чаще появляться информация о достижениях в сфере нейросетевых технологий. Это связано с расширением области применения искусственных нейронных сетей для решения практических задач. Среди таких задач стоит выделить задачу аппроксимации функционалов, которая заложена уже в самой организации искусственных нейронных сетей. В тех случаях, когда ошибки вычислений нейронной сети незначительны, целесообразно производить замену функционалов, реализуемых численными методами, на соответствующую нейронную сеть, что позволяет уменьшить время выполнения вычислений.

Среди большого числа известных геофизических методов исследований в настоящее время отдается предпочтение методам электроразведки потенциальными полями, как наиболее эффективному и экологически безопасному. Одним из методов решения геофизических задач является построение математических моделей, описывающих реальные,

Случай непрерывных кривых. Пусть дана окружность $(x-a)^2+(y-b)^2=R^2$. Очевидно, при $\varepsilon=R$ одной огибающей будет окружность вида $(x-a)^2+(y-b)^2=4R^2$, а другой – точка (a,b) .

Оказывается, это свойство можно использовать при построении огибающей в окрестности точки $x=a$, где производная отсутствует, но имеются конечные правая и левая производные. В этом случае получается дуга окружности с центром в точке a радиуса ε . В результате получаем:

$$\phi_f^- : \left\{ \begin{array}{l} \left. \begin{array}{l} x(t)=t-\varepsilon \cdot \frac{|f'(t)|}{\sqrt{(f'(t))^2+1}} \\ y(t)=f(t)+\varepsilon \cdot \frac{\operatorname{sgn}(f'(t))}{\sqrt{(f'(t))^2+1}} \end{array} \right\}, \text{если } f'(t) \cdot \exists \\ \left. \begin{array}{l} (x(t)-t)^2+(y(t)-f(t))^2=\varepsilon^2, \\ \min(\lim_{t \rightarrow a-} x(t), \lim_{t \rightarrow a+} x(t)) \leq x(t) \leq \max(\lim_{t \rightarrow a-} x(t), \lim_{t \rightarrow a+} x(t)) \\ \min(\lim_{t \rightarrow a-} y(t), \lim_{t \rightarrow a+} y(t)) \leq y(t) \leq f(a)+\varepsilon. \end{array} \right\}, \text{если } \operatorname{npv} \cdot t = a \cdot f'(t) \cdot \exists \end{array} \right.$$

Огибающие кривые можно рассматривать как траекторию колёс автомобиля. Т.е. с их помощью можно обобщить траекторию движения колёс велосипеда до траектории движение четырёхколёсных транспортных средств.

Литература

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы – М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2001,- 632 с.
2. Кузнецов О.П., Адельсон-Вельский Г.М. Дискретная математика для инженера. – М.: Энергоатомиздат, 1988.

сначала предварительно проводится численное интегрирование исходной системы; затем на основе численного решения интервал времени $(0, \infty)$ разбивается на цепочку подынтервалов, на каждом из которых исходная система упрощается до подсистемы дифференциально-алгебраических уравнений на основе следующих принципов:

1) Если на определенном интервале времени модуль скорости изменения нормированной концентрации i -го вещества значительно меньше модуля скорости изменения нормированной концентрации другого вещества, то i -е уравнение исходной системы можно заменить на стационарное $\dot{a}_i(t) = 0$, где $a_i(t)$ - концентрация i -го вещества в момент времени t .

2) Если на определенном интервале времени модуль скорости изменения нормированной концентрации i -го вещества значительно меньше модуля некоторых слагаемых в правой части, то i -е ДУ исходной

$$\text{системы можно заменить на алгебраическое } 0 = \sum_{j=1}^r \gamma_{i,j} \cdot w_j(a(t)),$$

где w_j - скорость j -й стадии, $\gamma_{i,j}$ - коэффициенты стехиометрической матрицы.

3) Если на определенном интервале времени в правой части имеются слагаемые, малые по модулю по сравнению с остальными слагаемыми, то эти слагаемые можно удалить.

Результаты

Система (2) решена с использованием вышеописанной методики.

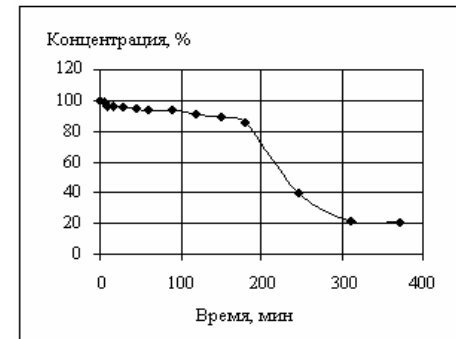


Рис.1 Концентрация вещества X_{11} .

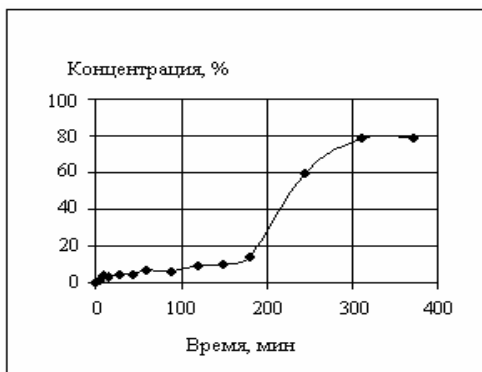


Рис.2 Концентрация вещества X_{15} .

При этом все уравнения балансов остаются верными. Найден набор констант, обеспечивающий наличие индукционного периода и близость графиков, полученных по численным расчетам, с экспериментальными графиками при различных начальных концентрациях. Для данной реакции были выделены ключевые константы скоростей стадий, влияющие на индукционный период. Найденны ограничения на эти константы, обеспечивающие наличие индукционного периода.

Список литературы

1. Галина Г.К., Спивак С.И., Вайман А.М., Комиссаров В.Д. Редукция систем дифференциальных уравнений кинетики реакций жидкофазного окисления углеводородов. ДАН, 1998, т.362, №1, с.57-59;
2. Спивак С.И., Шабат А.Б., Шмелев А.С. Об индукционном периоде химических реакций. Нестационарные процессы в катализе (материалы Всесоюзной конференции), ч.1. Новосибирск, 1979, с.118-121;
3. Л.В.Парфенова, И.М.Губайдуллин, А.В.Балаев, Л.М.Халилов, У.М.Джемилев. Теоретическое и экспериментальное изучение общего механизма действия Zr катализаторов в реакциях гидро-, карбо- и циклометаллирования олефинов. Успехи интеграции академической и вузовской науки по химическим специальностям: Материалы республиканской научно – практической конференции. 18-19 февраля 2006 г.- Уфа: РИО БашГУ, 2006, С 125-130;
4. Губайдуллин И.М., Спивак С.И. Информационно – аналитическая система обобщенной кинетической модели циркониевого катализа, Всероссийская научно-практическая конференция “Обратные задачи в приложениях”. 19–20 июня 2008 г.-Бирск
5. Тропин А.В., Масленников С.И., Спивак С.И. Новый подход к решению нелинейных систем дифференциальных уравнений химической кинетики. // Кинетика и катализ. 1995. т.36, No. 5, С.658-664.

Сама задача является задачей Коши второго порядка. Это и есть обратная задача восстановления траектории движения.

Из прикладного смысла задачи естественны ограничения на исходные данные: $\alpha(x) \in (-\beta, \beta)$ (где β – максимальный угол поворота колеса), $L > 0, f(x_0)$ и $f'(x_0)$ могут принимать любые значения.

Рассмотрим окружность фиксированного радиуса и огибающие для неё кривые. Очевидно, что огибающие кривые будут также являться окружностями. Но для других кривых, огибающие не будут того же рода. Например, для эллипса огибающие кривые уже не являются эллипсами

Случай гладких кривых. Рассмотрим случай, когда кривая является графиком непрерывной и дифференцируемой на отрезке $[a,b]$ функции $f(t)$. На графике функции $f(t)$ возьмём точку $(t, f(t))$ и проведём в этой точке нормаль к графику. Уравнение нормали имеет вид $y(x) = -x/f'(t) + f(t) + t/f'(t)$.

На этой прямой, на расстоянии ε находится точка $(x,y) = (x(t), y(t))$, координаты которой удовлетворяют уравнению $\varepsilon^2 = (x-t)^2 + (x-t)^2 / (f'(t))^2$. Откуда следует

$$\varepsilon = \pm |x-t| \sqrt{(f'(t))^2 + 1} / |f'(t)|.$$

Таким образом, получаем две функции, заданные в параметрической форме:

$$\varphi_f^+ : \left\{ \begin{array}{l} x(t) = t + \varepsilon \cdot \frac{|f'(t)|}{\sqrt{(f'(t))^2 + 1}} \\ y(t) = f(t) - \varepsilon \cdot \frac{\text{sgn}(f'(t))}{\sqrt{(f'(t))^2 + 1}} \end{array} \right\},$$

$$\varphi_f^- : \left\{ \begin{array}{l} x(t) = t - \varepsilon \cdot \frac{|f'(t)|}{\sqrt{(f'(t))^2 + 1}} \\ y(t) = f(t) + \varepsilon \cdot \frac{\text{sgn}(f'(t))}{\sqrt{(f'(t))^2 + 1}} \end{array} \right\}.$$

Приведем простейшие свойства построенных функций: производные функций φ_f^+ , φ_f^- и f в соответствующих точках равны; касательные к φ_f^+ , φ_f^- и f параллельны; функции φ_f^+ , φ_f^- и f равнозначны, например, если за исходную функцию взять φ_f^+ , то одна из огибающих будет функция f .

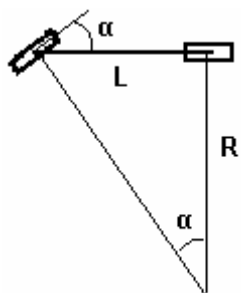


Рис 1. Поворот колеса велосипеда

$$a = \lim_{x_1 \rightarrow x_0} \left(\frac{f(x_1) - f(x_0) + \frac{x_1}{f'(x_1)} - \frac{x_0}{f'(x_0)}}{\frac{1}{f'(x_1)} - \frac{1}{f'(x_0)}} \right) = -\frac{f_0^2 + f_0'}{f_0''} + x_0,$$

$$b = -\frac{1}{f_0'} \left(x_0 - \frac{f_0'^3 + f_0'}{f_0''} \right) + f_0 + \frac{x_0}{f_0'} = f_0 + \frac{f_0'^2 + 1}{f_0''}$$

А радиус кривизны получаем из следующего соотношения

$$R = \sqrt{(b - f_0)^2 + (a - x_0)^2} = \frac{|f_0^2 + 1|^{3/2}}{|f_0''|}.$$

Таким образом, в точке $(x, f(x))$ имеем

$$R(x) = \frac{|f'^2(x) + 1|^{3/2}}{|f''(x)|}$$

$$\alpha(x) = \arctg\left(\frac{L}{R(x)}\right) = \arctg\left(\frac{L \cdot |f''(x)|}{|f'^2(x) + 1|^{3/2}}\right). \quad (\text{поворот влево})$$

Аналогично можно получить формулу для поворота вправо.

Общая формула будет иметь следующий вид:

$$\alpha(x) = \arctg\left(\frac{L \cdot f''(x)}{(f'^2(x) + 1)^{3/2}}\right). \quad (*)$$

Функцию $\alpha(x)$ можно интерпретировать как функцию управления движением по заданной траектории $f(x)$.

Перепишем формулу (*) в следующем виде:

$$L \cdot f''(x) = \operatorname{tg}(\alpha(x)) (f'^2(x) + 1)^{3/2}$$

Если в данной форме считать заданными функцию $\alpha(x)$, L , начальное положение $f(x_0)$ и направление $f'(x_0)$, то эта формула задаёт уравнение траектории движения.

Стехиометрический анализ стадии алкилирования Ti (IV) в каталитической системе $\text{TiCl}_4/\text{Al}(\text{CH}_3)_3$

Валиева О.И., Губайдуллин И.М., Хурсан С.Л., Спивак С.И.

Баширский государственный университет, irekmars@mail.ru

Аннотация

Построены атомарно-молекулярная и стехиометрическая матрицы каталитической системы $\text{TiCl}_4/\text{Al}(\text{CH}_3)_3$. Определены ключевые интермедиаты и стехиометрическая независимость стадий. Получены балансные соотношения, позволяющие сократить число компонентов для описания реакции, и тем самым упростить потенциальную кинетическую модель.

Введение

Неослабевающий научный интерес к проблеме катализа полимеризации диенов под действием систем Циглера-Натта породил широкий круг различных представлений о механизме процесса, однако до сих пор среди исследователей имеются разногласия относительно механизма зарождения и строения активных центров (АЦ) полимеризации диенов. Зарождение активных центров (АЦ) в каталитической системе Циглера-Натта – это сложный многостадийный процесс, включающий стадии алкилирования и последующего восстановления производных Ti (IV) под действием различных органических соединений непереходных металлов.

Существующие экспериментальные методы не позволяют выделить и изучить свойства лабильных металлорганических интермедиатов в каталитической системе Циглера-Натта с целью установления элементарных стадий механизма ионно-координационной полимеризации непереходных соединений. Это связано со сложностью состава продуктов вследствие многообразия протекающих реакций между компонентами каталитической системы, а также с высокой лабильностью и низкой концентрацией интермедиатов.

Современные методы математического моделирования позволяют адекватно и корректно выявить отдельные стадии сложного механизма

химического превращения. Что в сочетании с имеющимися экспериментальными данными открывает возможность его детализации и углубленного анализа факторов, определяющих химизм процесса. Различают 6 иерархических уровней для анализа и математического моделирования экспериментальных каталитических процессов: 1) квантово-химической; 2) атомно-молекулярной (наноуровень - <100 нм); 3) частицы, капли, пузыри (микроуровень - <1мм); 4) зерно катализатора (мезоуровень - <100см); 5) неподвижный слой катализатора и экспериментальный реактор; 6) экспериментальная установка в целом (мегауровень, окружающая среда, лаборатория, институт) [1]

Квантовохимическое моделирование элементарных стадий формирования АЦ позволило выявить общие закономерности протекания этого процесса [2].

Физико-химическая обоснованность кинетической модели обеспечивается уровнем наших знаний о механизме реакций и подтверждением констант скоростей реакции на всех уровнях моделирования. Начальным этапом познания механизма реакции является стехиометрический анализ[3].

Стехиометрический анализ механизма зарождения АЦ.

Многостадийную реакцию зарождения АЦ можно представить системой стехиометрических уравнений ее стадий [4], записанных в виде

$$\sum_{j=1}^{K_KOM} SM[i, j] * VP[j] = 0, \quad i = 1, 2, \dots, K_STAD. \quad (1)$$

где $K_KOM = 11$ – количество компонент; $SM[i, j]$ – стехиометрический коэффициент при компоненте $VP[j]$ в i -ой стадии; $SM[i, j] < 0$ (если компонент $VP[j]$ – исходное вещество); $SM[i, j] > 0$ (если $VP[j]$ – продукт); $SM[i, j] = 0$ (если $VP[j]$ в рассматриваемой стадии не участвует); $K_STAD = 8$ – количество стадий.

В матричной форме система (1) примет вид:

$$SM * VP = 0.$$

где SM – стехиометрическая матрица (таблица 1); VP – вектор-столбец компонентов.

Элементами матрицы SM являются стехиометрические коэффициенты компонентов: 1) исходные вещества; 2) катализатор; 3) промежуточные соединения; 4) продукты реакции. Ее строки соответствуют стадиям, а столбцы – веществам

Об одной обратной задаче восстановления траектории движения

Шагапов И.А., Шугаев Д.Р.

Нефтекамский филиал БашГУ, shugaev@mail.ru

Аннотация

При математическом и компьютерном моделировании различных процессов окружающей действительности часто встречается задача описания специальных траекторий и управления движением по этим траекториям. В данной работе рассматривается одна из таких задач.

Введение

В данной работе рассматривается прикладная задача описания траектории движения колёсных транспортных средств. Для простоты сначала рассматривается классический двухколёсный велосипед. Имеется и переход к более общему случаю.

Траектории движения

Пусть велосипед (на самом деле центр задней оси) движется по некоторой кривой, являющейся графиком функции $f(x)$. Найдём зависимость угла поворота колёс $\alpha = \alpha(x)$ от траектории движения.

Найдём радиус кривизны кривой $f(x)$ в точке $(x_0, f(x_0))$. Построим касательную окружность в этой точке. Её центр будет лежать на прямой $y_0(x)$, которая перпендикулярна касательной к функции в точке $(x_0, f(x_0))$. Возьмем точку $(x_1, f(x_1))$, $x_1 = x_0 + \delta$, $\delta > 0$. Также построим перпендикуляр $y_1(x)$ к $f(x)$ в точке x_1 . Очевидно, точка пересечения этих прямых – центр нашей окружности.

$$y_0(x) = -x / f'(x_0) + f(x_0) + x_0 / f'(x_0), \quad y_1(x) = -x / f'(x_1) + f(x_1) + x_1 / f'(x_1).$$

Координаты точки $O(a, b)$ удовлетворяют уравнению:

$$-\frac{a}{f'(x_0)} + \frac{a}{f'(x_1)} + f(x_0) - f(x_1) + \frac{x_0}{f'(x_0)} - \frac{x_1}{f'(x_1)} = 0.$$

Можно показать, что

В терминах этих операторов задачу построения решений многопараметрической обратной спектральной задачи можно свести к прямым спектральным задачам. Это вытекает из следующих утверждений.

Теорема 1. Пусть вектор $\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_m)$ является решением МПОСЗ, тогда существует нетривиальный вектор $\vec{V} \in H^m$ такой, что для всех $k = 1, \dots, m$

$$(p_k \Delta_0 - (-1)^k \Delta_k) \vec{V} = 0 \quad (3)$$

Теорема 2. Пусть векторы $\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_m)$ и $\vec{V} \in H^m$ являются совместным решением системы

$$(p_k \Delta_0 - (-1)^k \Delta_k) \vec{V} = 0, \quad k = 1, \dots, m. \quad (4)$$

Тогда, если решения МПОСЗ изолированы, то $\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_m)$ - решение МПОСЗ.

Таким образом, для того чтобы найти все решения МПОСЗ необходимо решить систему (4). На самом деле, при изолированности решений МПОСЗ, можно показать, что количество решений МПОСЗ в точности равно рангу оператора $\Delta_0: H^m \rightarrow H^m$ и компоненты вектора $\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_m)$ следует искать среди нулей соответствующих многочленов от p_k

$$\det(p_k \Delta_0 - (-1)^k \Delta_k) = 0. \quad (5)$$

В заключении отметим, что на основе теорем 1 и 2 нами разработаны алгоритмы для численного решения МПОСЗ, для малоразмерных случаев эти алгоритмы реализованы в пакете Matlab.

Литература.

1. Левитан Б.М. Обратные задачи Штурма-Лиувилля. М.: Наука. 1984. – 240 с.
2. Юрко В. А. Обратные спектральные задачи и их приложения. Саратов: Саратов. педагогич. ин-т, 2001. 499 с.
3. Под ред. В.~В.~Болотина. Вибрации в технике: Колебания линейных систем. М.: Машиностроение. 1978. – 352 с.
4. Коллатц Л. Задачи на собственные значения (с техническими приложениями). М.: Наука. 1968. – 503 с.
5. Валеев Н.Ф., Валеева Л.Р. Об одной граничной спектральной задаче для телеграфного уравнения. // Вестник БашГУ. 2007. – №3. – С 3 – 11
6. Валеев Н.Ф. Об одной модели управления собственными колебаниями динамических систем. // Вестник УГАТУ. 2008, №1 (в печати).

Стехиометрическая матрица (SM[i,j])

VP/ST	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	Σ	\leftrightarrow
1	-2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	1
2	-1	0	-1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1
3	0	0	0	-1	1	0	0	0	0	0	0	0	1
4	0	0	0	0	-1	1	0	0	0	0	0	0	1
5	0	0	0	0	0	-1	1	1	0	0	0	1	1
6	0	0	0	0	0	0	-1	-1	1	0	0	-1	1
7	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	1	0	0	1
8	0	0	0	0	0	0	0	-2	0	0	1	-1	1
VP/ST	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	Σ	\leftrightarrow
Σ	-3	1	-1	0	0	0	0	-2	0	1	1	-1	

Химический состав компонентов каталитической системы $\text{TiCl}_4/\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ отражает атомарно-молекулярная матрица $\text{AM}[j,k]$ (табл.2), каждый элемент которой показывает число атомов k-го химического элемента ($k=1,2,\dots, K_АТОМ$) в молекуле компонента $\text{VP}[j]$. $K_АТОМ=5$ – количество атомов в каталитической системе.

Атомарно-молекулярная матрица каталитической системы $\text{TiCl}_4/\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ ($\text{AM}[i, j]$)

	Al	C	H	Ti	Cl
VP1 = $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$	1	3	9	0	0
VP2 = $(\text{CH}_3)_2\text{Al}(\text{CH}_3)_2\text{Al}(\text{CH}_3)_2$	2	6	18	0	0
VP3 = TiCl_4	0	0	0	1	4
VP4 = $\text{TiCl}_4\text{Al}(\text{CH}_3)_3$	1	3	9	1	4
VP5 = $\text{TiCl}_4\text{CH}_3\text{Al}(\text{CH}_3)_2$	1	3	9	1	4
VP6 = $\text{TiCl}_3\text{CH}_3\text{Al}(\text{CH}_3)_2\text{Cl}$	1	3	9	1	4
VP7 = CH_3TiCl_3	0	1	3	1	3
VP8 = $\text{Al}(\text{CH}_3)_2\text{Cl}$	1	2	6	0	1
VP9 = $\text{CH}_3\text{TiCl}_3\text{Al}(\text{CH}_3)_2\text{Cl}$	1	3	9	1	4
VP10 = $\text{CH}_3\text{TiCl}_4\text{Al}(\text{CH}_3)_2$	1	3	9	1	4
VP11 = $(\text{CH}_3)_2\text{AlCl}_2\text{Al}(\text{CH}_3)_2$	2	4	12	0	2

Каким требованиям должна удовлетворять стехиометрическая матрица SM? При выдвижении гипотез о механизме реакции, подбирает стехиометрические коэффициенты таким образом, чтобы в каждой реакции для каждого элемента число атомов «слева» равнялось числу атомов «справа». Должен выполняться закон постоянства массы атомов данного вида по стадиям. В матричном виде это требование имеет вид[4]:

$$SM \cdot AM = 0, \quad (2)$$

Получается матрица, все элементы которой нули (нулевая матрица). Это означает, что стехиометрическая матрица для реакции зарождения АЦ на примере каталитической системы $TiCl_4/Al(CH_3)_3$ выписана правильно.

Соотношение (2) дает возможность правильно построить стехиометрическую матрицу SM, если исследователь задал совокупность веществ и, следовательно, молекулярную матрицу AM. Среди строк матрицы SM, соответствующих стехиометрическим уравнениям, могут быть линейно зависимые. Система реакций является стехиометрической независимой, если любое из уравнений этой системы не может быть получена линейной комбинации остальных. Методы проверки стехиометрической независимости основаны на определении ранга стехиометрической матрицы SM известными методами матричного исчисления.

Ранг матрицы SM, т.е. максимальное число линейно независимых строк или столбцов, никогда не может быть выше (K_KOM – K_ATOM). Это выполняется в силу того, что всегда существует K_ATOM линейно зависимых столбцов матрицы SM, задаваемой уравнением (2):

$$rg\ SM \leq K_KOM - K_ATOM$$

Ранг матрицы SM определяется следующим образом:

$$rg\ AM = \min(K_KOM, K_ATOM).$$

Как правило, $rg\ AM = K_ATOM$. Тогда ранг стехиометрической матрицы SM определяется выражением:

$$rg\ SM \leq K_KOM - rg\ AM = 11 - 5 = 6$$

Вещества, соответствующие линейно независимым столбцам матрицы SM называются ключевыми, а остальные – не ключевыми. Очевидно, что число ключевых веществ равно рангу стехиометрической матрицы.

Для каталитической системы $TiCl_4/Al(CH_3)_3$ были определены ключевые вещества и стехиометрическая независимость стадий [5]

Получены следующие балансные соотношения ($VP = X$) [6].

$$ZR1 = \dot{X}(1) + 2 \cdot \dot{X}(2) - \dot{X}(3)$$

Постановка МПОСЗ. Найти такие возможные значения вектора $\vec{p} \in \mathbb{C}^m$, что наперед заданные числа $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ будут собственными значениями оператора $B(\vec{p}, \lambda) : E_n \rightarrow E_n$.

Характерные математические модели обратных спектральных задач, проясняющих данную постановку обратной спектральной задачи, а также некоторые достаточные условия существования решений и корректности МПОСЗ рассмотрены в [5] и [6].

Здесь же мы изложим один подход к исследованию МПОСЗ, основанной на редукции обратной спектральной задачи к серии прямых спектральных задач.

Основные результаты.

Для формулировки результатов предварительно введем необходимые понятия и обозначения.

Пусть $H^m = E_n \otimes E_n \otimes \dots \otimes E_n$ тензорное произведение m-экземпляров исходных пространств E_n , очевидно пространство H^m будет n^m -мерным гильбертовым с соответствующей метрикой [Рид]. В этом пространстве рассмотрим линейные операторы $\Delta_k : H^m \rightarrow H^m$, заданные по нижеследующим формулам:

$$\Delta_0 = \begin{pmatrix} B_1(\lambda_1) & B_2(\lambda_1) & \dots & B_{m-1}(\lambda_1) & B_m(\lambda_1) \\ B_1(\lambda_2) & B_2(\lambda_2) & \dots & \dots & B_m(\lambda_2) \\ B_1(\lambda_3) & \dots & \dots & \dots & B_m(\lambda_3) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_1(\lambda_m) & B_2(\lambda_m) & \dots & \dots & B_m(\lambda_m) \end{pmatrix}_{\otimes} \quad (1)$$

$$\Delta_k = \begin{pmatrix} B_1(\lambda_1) & \dots & B_{k-1}(\lambda_1) & B_0(\lambda_1) & B_k(\lambda_1) & \dots & B_m(\lambda_1) \\ B_1(\lambda_2) & \dots & B_{k-1}(\lambda_2) & B_0(\lambda_2) & B_k(\lambda_2) & \dots & B_m(\lambda_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_1(\lambda_m) & \dots & B_{k-1}(\lambda_m) & B_0(\lambda_m) & B_k(\lambda_m) & \dots & B_m(\lambda_m) \end{pmatrix}_{\otimes} \quad (2)$$

Указанные выше операторы строятся по правилу обычного числового определителя, но вместо обычного умножения берется операция тензорного произведения операторов и в каждом тензорном произведении операторы строго следуют согласно их расположению в соответствующем столбце.

собственных колебаний восстановить свойства объекта. Речь, прежде всего идет, о тех случаях, когда мы не располагаем полным спектром собственных колебаний объекта, а лишь его конечной частью. К такому можно отнести задачи, в которых требуется по конечному набору значений собственных колебаний системы, найти параметры динамической системы, провести диагностику технической системы или же посредством доступных параметров объекта (динамической системы) придать ей те или иные частотно-резонансные характеристики (см.[3],[4]).

Серьезным препятствием применения к вышперечисленным типам задач классической теории является то, что она оперирует полными спектральными данными (см.[2]), то есть бесконечным числом данных (например, собственных значений). При решении прикладных задач, как правило, не приходится рассчитывать на полноту спектральных данных. Требуется, зная лишь конечное число собственных значений, получить информацию о значениях параметров динамической системы (задача вычислительной диагностики) или же наоборот, подобрать конечное число некоторых параметров динамической системы так, чтобы она имела бы заданный набор значений частот собственных колебаний.

Все эти задачи, по существу, сводятся к обратным спектральным задачам для линейных операторов, в которых требуется по конечному числу собственных чисел оператора найти возможные значения неизвестных параметров системы. Такие задачи уместно называть многопараметрическими обратными спектральными задачами.

Разумеется, такая формулировка задачи является весьма широкой, в частности, в ней даже не указывается вид зависимости линейного оператора от параметров, не описан класс этих операторов и т.д. Поэтому необходимо ограничиться конкретным, для выработки единых подходов, и в то же время содержательным в плане приложений, классом задач.

В данной работе мы исследуем многопараметрическую обратную спектральную задачу в конечномерном евклидовом пространстве E_n в следующей постановке.

Пусть $B(\vec{p}, \lambda) : E_n \rightarrow E_n$ и имеет вид

$$B(\vec{p}, \lambda) = B_0(\lambda) + p_1 B_1(\lambda) + \dots + p_m B_m(\lambda),$$

где $\vec{p} \in \mathbb{C}^m$, λ -спектральный параметр, операторы $B_k(\lambda)$ являются аналитическими функциями от λ .

$$\begin{aligned} ZR2 &= \dot{X}(7) - \dot{X}(8) - 2 \cdot \dot{X}(11) \\ ZR3 &= \dot{X}(1) + 2 \cdot \dot{X}(2) + \dot{X}(4) + \dot{X}(5) + \dot{X}(6) + \dot{X}(7) + \dot{X}(9) + \dot{X}(10) \end{aligned} \quad (3)$$

Задача построения стехиометрической матрицы с помощью соотношения (2) в общем случае неоднозначна. В принципе можно получить бесчисленное множество наборов стехиометрических уравнений, среди которых будут и линейно зависимые. С математической точки зрения они эквивалентны как решения одного и того же матричного уравнения (2), но с физико-химической точки зрения они неэквивалентны.

Определение ключевых компонентов, с одной стороны, позволяет сократить число компонентов для описания реакции, и тем самым упростить кинетическую модель. При этом не ключевые компоненты выражается через ключевые с помощью простых соотношений (3). С другой стороны, балансные соотношения являются гарантом правильного решения прямой кинетической задачи - систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ), т.е. подобия исследуемого объекта и его математической модели (адекватность модели). Эти вопросы, а также численные методы решения СОНДУ будут рассматриваться в следующих работах.

Решив прямую кинетическую задачу [3], используя константы, определенные квантовохимическим моделированием, находим количественные характеристики состава реакционной смеси каталитической системы $TiCl_4/Al(CH_3)_3$. Далее можем исключить те промежуточные вещества, которые соответствует стационарному состоянию.

Заключение

Таким образом, в данной работе, впервые предлагается методология упрощения кинетических моделей, сложных жестких каталитических систем, используя две основные подходы к решению проблем химической кинетики: микроскопический (квантовохимические расчеты) и макроскопической (формально-кинетической). В свою очередь, общим фундаментом, и для квантовохимического моделирования и для построения кинетической модели, является математика, математические методы исследования. Тесный союз математика (прикладного математика) и химика (химика теоретика) даст более глубокое и правильное понимание природы зарождения активных центров на примере каталитической системы $TiCl_4/Al(CH_3)_3$.

Литература

1. Слинко М.Г. Основы и принципы моделирования каталитических процессов.– Новосибирск: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН, 2004.– 488 с
2. Валиева О.И., Хурсан С.Л., Муллагалиев И.Р., Монаков Ю.Б. Механизм зарождения активных центров ионно-координационной полимеризации при взаимодействии тетрахлорида титана с триметилалюминием. // Вестник Башкирского Университета. – 2007. – Вып. 4. – С. 24-27
3. Спивак С.И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В. Обратные задачи химической кинетики: Учебное пособие. – Уфа: РИО БашГУ, 2003, - 110 с.
4. Царева З.М., Орлова Е.А. Теоретические основы химтехнологии. – Киев: Высшая школа, 1986. – 271 с
5. Алгоритм определения ключевых веществ реакции карбоалюминирования. Габдулхакова З.Р., Губайдуллин И.М., Картак В.В. Обратные задачи в приложениях: Сб. научн. трудов. // Всеросс. научно-практич. конф. 22-23 мая 2006 г.-Бирск: Бирск. гос. соц.-пед. акад., 2006.- С 119-124.
6. К.Джонсон. Численные методы в химии. Москва, 1983

Многопараметрические обратные спектральные задачи и их приложения.

Валеев Н.Ф.

БашГУ, Уфа, valeevnf@yandex.ru

Аннотация

В работе рассматривается задача определения неизвестных параметров линейного оператора по известной части спектра - многопараметрическая обратная спектральная задача. Указанный класс задач возникает при конструировании линейных динамических систем с заданными резонансными характеристиками, при решении задач диагностики и идентификации колеблющихся систем по значениям собственных колебаний. Численное решение классических обратных спектральных задач для дифференциальных операторов также приводит к многопараметрическим обратным спектральным задачам. В заметке сформулированы и доказаны достаточные условия существования, изолированности и устойчивости решений данной задачи, даны оценки количества решений, приведены методы решения.

Введение

В данной работе рассматривается задача определения неизвестных параметров линейного оператора по конечному набору точек спектра - многопараметрическая обратная спектральная задача (сокращенно МПОСЗ). Естественными источниками нашей постановки обратной спектральной задачи являются, с одной стороны, классические обратные спектральные задачи для дифференциальных операторов (см.[1],[2]), а с другой, прикладные задачи управления частотно-резонансными характеристиками различных технических устройств, описываемых линейными динамическими системами, и задачи вычислительной диагностики и идентификации технических систем по частотам собственных колебаний.

Классическая теория обратных спектральных задач к настоящему времени нашла многочисленные приложения в задачах математической физики, химии и технических наук. Тем не менее, она не в состоянии охватить весь спектр прикладных задач, в которых требуется по спектру

3. Филиппов А.И. Скважинная термометрия переходных процессов /Автореф. дис. ... докт. техн. наук, Тюмень, 1991.
4. Валиуллин Р.А. Термические методы диагностики нефтяных пластов и скважин / Дис. ... докт. техн. наук. - Тверь, 1996.
5. Рамазанов А.Ш. Теоретические основы термогидродинамических исследований нефтяных пластов / Дис. ... докт. техн. наук. – Уфа, 2004.
6. Рамазанов А.Ш., Валиуллин Р.А. Обратные задачи скважинной термометрии. – Колл. монография под ред. проф. С.М. Усманова. – Бирск, 2006, с.276-292.

Секция 2. Обратные задачи в механике и геофизике

Диагностирование механической системы с двумя степенями свободы по двум наборам собственных частот

Ахтямов А.М., Гарипова Г.И.

ГОУ ВПО Башкирский государственный университет,
AkhtyamovAM@mail.ru, GulnaraGI@mail.ru

Аннотация

В настоящей статье предлагается метод, который позволяет восстановить коэффициенты жёсткости пружин и обобщенные массы в механической системе с двумя степенями свободы, состоящей из тел с массами, соединенных пружинами, по двум наборам собственных частот.

Введение

Возникающие всё чаще в последнее время техногенные катастрофы, связанные с изношенностью основных фондов, требуют новых методов диагностики технических конструкций. Вследствие этого в настоящее время интенсивно развивается акустическое диагностирование, возникшее на стыке теории механизмов с акустикой, которое тесно связано с данным классом потребностей.

Механические системы, состоящие из тел с массами, соединённых пружинами, являются составной частью многих технических устройств. И если они оказываются недоступными для визуального осмотра, а разборка представляется невозможной по той или иной причине, то одним из способов обнаружения неисправности становятся собственные частоты. Таким образом, возникает вопрос: можно ли по этим характеристикам определить коэффициенты жёсткости пружин и массы тел, которые в ходе эксплуатации меняют свои значения?

Близкие по постановке вопросы поднимались и в других работах. В [1] рассматривалась возможность акустического диагностирования подобных механических систем по набору собственных частот и амплитудам колебаний.

$$u(r, t) = -\frac{U_0}{r};$$

$$U_0 = c \frac{Q}{\pi h} = c \frac{k}{\mu} \frac{\Delta P}{\ln(r_e / r_w)}$$

и закон движения характеристик, имеет вид

$$r(t, r_1) = \sqrt{r_1^2 - 2U_0 t}. \quad (21)$$

Задача решена. Для расчета температурного поля надо задаваться различными значениями r_1 и менять время до тех пор, пока характеристика не достигнет стенки скважины r_w . В результате получим, как изменяется температура во времени для контрольного объема, движущегося со скоростью конвективного переноса тепла с расстояния r_1 в пласте к скважине.

Более важно для обратных задач изменение температуры во времени для фиксированных точек в пласте, например, на стенке скважины. Тогда такой расчет вдоль характеристик не очень удобен. Возвращаясь к эйлеровым переменным, на $r(t, r_1) = r_w$ для изменения температуры на стенке скважины во времени можно получить следующее решение

$$T(r_w, t) = f(r_T) + \varepsilon [p(r_T) - P_w] - \eta \Pi [P_i - p(r_T)] \quad (22)$$

Здесь

$r_T = \sqrt{r_w^2 + 2U_0 t}$ имеет смысл радиуса (глубины) зондирования пласта, с такого расстояния в пласте к моменту времени t приходит температурный сигнал со скоростью конвективного переноса тепла.

В [6] были рассмотрены постановки некоторых обратных задач на основе полученного решения прямой задачи (19) и (22) для различных моделей $p(r, t)$.

Обработав кривую изменения забойной температуры во времени, можно по отдельности определить физический скин, обусловленный качеством перфорации и скин за неоднородность пласта. Этому, в первую очередь, способствует малая скорость термозондирования по сравнению со скоростью зондирования по давлению. Следует отметить, что при известной проницаемости удаленной зоны пласта определить проницаемость ближней зоны по ТГДИ можно и при неизвестных Q/h и ε .

Литература

1. Лапук Б.Б. О температурных изменениях при движении сырой нефти в пористых пластах // Нефтяное хозяйство. - 1940. - №4, 5.
2. Чекалок Э.Б. Термодинамика нефтяного пласта. - М.: Недра, 1965. - 238с.

После пуска добывающей скважины в работу при постоянных граничных условиях время стабилизации поля давления определяется пьезопроводностью пласта, а формирование температурного поля – скоростью конвективного теплопереноса, пропорциональной скорости фильтрации. Характерные времена этих процессов могут отличаться на несколько порядков. Поэтому, в первом приближении, при исследовании температурного поля баротермического эффекта можно считать, что после пуска скважины поле давления по сравнению с полем температуры устанавливается мгновенно, как в жестком пласте с бесконечной пьезопроводностью.

$$p(r,t) = \begin{cases} P_i, & t = 0 \\ p(r), & t > 0 \end{cases},$$

где P_i – начальное пластовое давление; $p(r)$ – стационарное распределение давления.

Тогда интеграл в (19) легко вычисляется и изменение температуры **вдоль характеристик** будет описываться зависимостью

$$T(r(t,r_1),t) = f(r_1) + \varepsilon [p(r_1) - p(r(t,r_1))] - \eta \Pi [P_i - p(r_1)] \quad (20)$$

Физический смысл полученного решения очевиден: первое слагаемое – начальное значение температуры для характеристики с точки r_1 , второе – дроссельный разогрев по пути движения характеристики, третье – охлаждение за счет адиабатического эффекта вследствие мгновенного снижения давления в начале.

Для однородного пласта и **совершенной скважины** воспользуемся известным распределением давления

$$p(r) = \begin{cases} P_w + \frac{\Delta P}{\ln(r_e/r_w)} \ln(r/r_w) = P_w + \frac{Q\mu}{2\pi kh} \ln(r/r_w), & r_w \leq r \leq r_e \\ P_e, & r > r_e \end{cases}$$

Обозначено: r_w – радиус скважины, r_e – радиус контура питания, P_w – давление в скважине, P_e – давление на контуре питания, внешнее давление.

Скорость конвективного переноса тепла для $t > 0$

Прямая задача

Прежде чем поставить обратную задачу, напомним прямую.

Общий вид дифференциальных уравнений движения может быть получен в форме уравнений Лагранжа, которые при консервативных силах имеют известную из курса теоретической механики форму [2]:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_j} = - \frac{\partial \Pi}{\partial q_j}, \quad j = 1, 2. \quad (1)$$

Также известно, что при малых движениях голономной системы со стационарными связями около положения равновесия кинетическая энергия в канонической форме и потенциальная энергия следующим образом выражаются через обобщенные координаты:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^s a_j \dot{q}_j^2, \quad \Pi = \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^s c_{jk} q_j q_k, \quad (2)$$

где T и Π — кинетическая и потенциальная энергии, c_{jk} — обобщенные коэффициенты жесткости или квазиупругие коэффициенты, a_j — коэффициенты инерции или инерционные коэффициенты (иногда их называют также обобщенными или приведенными массами), q_j и \dot{q}_j — обобщенные координаты и обобщенные скорости, $j = 1, 2$ — номер координаты. Число степеней свободы равно двум.

Если соответствующее нулевым значениям координат положение равновесия устойчиво, то потенциальная энергия в этом положении имеет изолированный минимум, а второе из выражений (2) есть положительно определенная квадратичная форма. Для этого необходимо и достаточно, чтобы выполнялся критерий Сильвестра. В этом случае система, выведенная из положения равновесия, совершает свободное колебание [3].

Подставив выражения (2) в уравнение Лагранжа, получим следующую систему линейных однородных уравнений с постоянными коэффициентами:

$$\alpha_j \ddot{q}_j + \sum_{k=1}^s c_{jk} q_k = 0, \quad j = 1, 2. \quad (3)$$

Если условие устойчивости равновесия выполнены, то общее решение этой системы дифференциальных уравнений имеет вид:

$$q_j = \sum_{i=1}^s A_{ji} \sin(k_i t + \beta_i), \quad j = 1, 2, \quad (4)$$

где k_i — собственные частоты, A_{ji} — амплитуды колебаний (первый индекс означает номер координаты, а второй — номер собственной частоты).

При подстановке частного решения в уравнение (3), получим систему алгебраических уравнений, однородную относительно неизвестных амплитуд A_{ji} . При колебаниях все A_{ji} не могут равняться нулю; поэтому, согласно общему свойству однородных систем, должен равняться нулю определитель, составленный из коэффициентов этой системы. Приравняв определитель к нулю, получим частотное уравнение, решив которое, найдём спектр собственных частот. Для рассматриваемых систем, совершающих движение около состояния устойчивого равновесия, все корни этого уравнения вещественны и положительны.

Эта же система позволяет выразить все амплитуды A_{ji} через какую-либо одну из них, например через первую. Сказанное вытекает из общих свойств однородных систем алгебраических уравнений. Каждому корню частотного уравнения будет соответствовать своя собственная форма, определяемая отношениями:

$$\chi_{2i} = \frac{A_{2i}}{A_{1i}}, \quad i = 1, 2. \quad (5)$$

Так решается прямая задача определения собственных частот и амплитуд колебаний механической системы с известными m_1, m_2, c_1, c_2 . В настоящее время эта задача достаточно хорошо изучена.

Постановка обратной задачи

Рассмотрим механическую систему с двумя степенями свободы, состоящую из двух тел с массами m_1 и m_2 , соединенных двумя пружинами, жесткости которых соответственно равны c_1 и c_2 (см. рис. 1.). Пружину будем считать безмассовыми. За обобщенные координаты q_1, q_2 примем горизонтальные перемещения x_1, x_2 грузов, отчитывая эти пе-

В частном случае, при фильтрации в стационарном поле давления баротермический эффект тождественен эффекту Джоуля-Томсона

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u(r) \frac{\partial T}{\partial r} = -\varepsilon u(r) \frac{\partial p(r)}{\partial r},$$

а при отсутствии фильтрации – эффекту адиабатического расширения и сжатия

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \eta \Pi \frac{\partial p(r, t)}{\partial t}.$$

Параметр Π учитывает теплообмен между жидкостью и скелетом пористой среды.

В общем случае, для произвольного нестационарного поля давления $p(r, t)$ вдоль характеристик $r(t, r_1)$, определяемых из задачи:

$$\frac{\partial r}{\partial t} = u(r, t); \quad r(0) = r_1 \quad (18)$$

можно записать в виде

$$T[r(t, r_1), t] = f(r_1) + \varepsilon [p(r_1, 0) - p(r(t, r_1), t)] + (\varepsilon + \eta \Pi) \int_0^t \frac{\partial_2 p(r(\tau, r_1), \tau)}{\partial \tau} d\tau \quad (19)$$

В (19) первое слагаемое представляет конвективный вынос из пласта начального профиля температуры $f(r)$. Второе и третье слагаемые (19) представляют изменение температуры, обусловленное **баротермическим** эффектом. Если второе слагаемое однозначно определено начальным и текущим значениями давления, то третье слагаемое указывает на зависимость температурного поля от характера изменения давления во времени по пути движения жидкости. Как видно из (15) баротермический эффект не является новым физическим эффектом. Просто при неустановившейся фильтрации жидкости некорректно называть эффект эффектом Джоуля-Томсона. Физическая природа изменения температуры флюида та же – диссипация энергии из-за трения и адиабатический эффект.

Используя (19), можно рассчитать температурное поле пласта для конкретного распределения поля давления $p(r, t)$. Дальнейшее упрощение зависит от вида $p(r, t)$ и интегрируемости (18).

руется, в начальный период работы скважины, в период освоения скважины и испытания пластов она зависит от времени. Естественно ожидать, что характер изменения температуры во времени для различных переходных процессов зависит от параметров пласта и может быть использовано для зондирования разрабатываемых пластов. На это впервые обратил внимание в 1960-е годы Э.Б.Чекалюк [2].

При однофазной фильтрации флюида в пористой среде в величине изменения температуры будет вклад и теплопроводности, конвективного переноса, дросселирования и адиабатического эффекта.

Для отдельного учета **части** температурного эффекта, обусловленной только изменением давления при однофазной фильтрации в пласте было введено понятие о **баротермическом эффекте**. Этот эффект можно определить как **изменение температуры в насыщенной пористой среде, обусловленное изменением давления**. Физические процессы, приводящие к изменению температуры – фрикционный нагрев (диссипация механической энергии в тепло за счет трения) и адиабатический эффект при расширении и сжатии флюида.

Математическая постановка задачи для расчета температурного поля, обусловленного баротермическим эффектом т.о., имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u(r,t) \frac{\partial T}{\partial r} = -\varepsilon u(r,t) \frac{\partial p(r,t)}{\partial r} + \eta \Pi \frac{\partial p(r,t)}{\partial t} \quad (15)$$

$$T(t,0) = f(r) \quad (16)$$

Здесь $u(r,t)$ - скорость конвективного переноса тепла

$$u(r,t) = c v(r,t) = -c \frac{\kappa}{\mu} \frac{\partial p}{\partial r} \quad (17)$$

c - отношение объемных теплоемкостей флюида и насыщенной этим флюидом пористой среды

$$c = \frac{c_f \rho_f}{C_i}, \quad \Pi = mc.$$

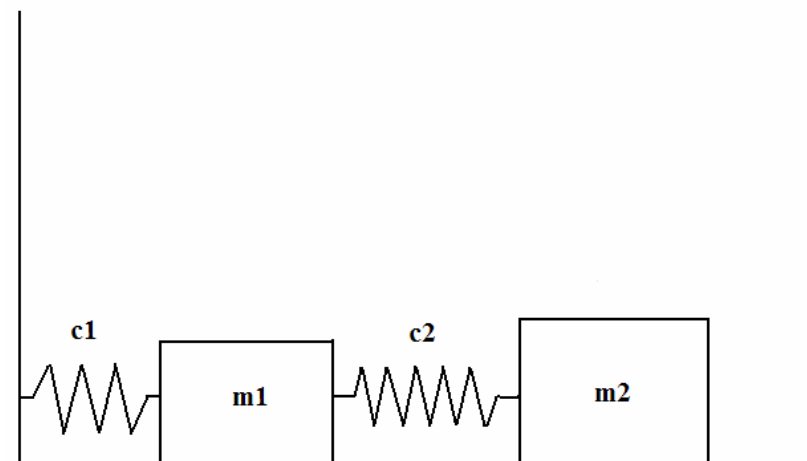


Рис.1 Механическая система с двумя степенями свободы

ремещения от состояния равновесия, в котором пружины не деформированы. Пренебрегаем действием сил трения. Назовём эту механическую систему системой №1. В системе №1 значения собственных частот k_1, k_2 нам известны.

Заменим в системе №1 одно из тел неизвестной массы m_2 телом, масса m_3 которого известна. Будем называть эту систему системой №2. В системе №2 также известны значения собственных частот k_1^*, k_2^* . Сформулируем теперь обратную задачу. По известным k_1, k_2, k_1^*, k_2^* требуется найти коэффициенты жёсткости пружин c_j и массы тел m_j , где $j, i = 1, 2$.

Метод решения обратной задачи

Запишем для механической системы №1 уравнения (3), положив $q_1 = x_1, q_2 = x_2$:

$$\begin{cases} m_1 \ddot{x}_1 + c_1 x_1 - c_2 (x_2 - x_1) = 0, \\ m_2 \ddot{x}_2 + c_2 (x_2 - x_1) = 0, \end{cases} \quad (6)$$

где $a_1 = m_1$, $a_2 = m_2$, $c_{11} = c_1 + c_2$, $c_{12} = -c_2$, $c_{21} = -c_2$, $c_{22} = c_2$.

Подставим частное решение системы дифференциальных уравнений $q_j = A_{ji} \sin(k_i t + \beta_i)$, соответствующее собственной частоте k_i , в данную систему:

$$\begin{cases} A_{11}(-m_1 k_1^2 + c_1 + c_2) - c_2 A_{21} = 0, \\ A_{12}(-m_1 k_2^2 + c_1 + c_2) - c_2 A_{22} = 0, \\ A_{21}(c_2 - m_2 k_1^2) - c_2 A_{11} = 0, \\ A_{22}(c_2 - m_2 k_2^2) - c_2 A_{12} = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Согласно (5), положив $\chi_{11} = \chi_{12} = 1$, для определения остальных коэффициентов собственных форм воспользуемся двумя первыми уравнениями из (7):

$$\chi_{21} = \frac{A_{21}}{A_{11}} = \frac{-m_1 k_1^2 + c_1 + c_2}{c_2}, \quad \chi_{22} = \frac{A_{22}}{A_{12}} = \frac{-m_1 k_2^2 + c_1 + c_2}{c_2}. \quad (8)$$

То же самое можно получить, используя два последних уравнения из (7):

$$\chi_{21} = \frac{A_{21}}{A_{11}} = \frac{c_2}{c_2 - m_2 k_1^2}, \quad \chi_{22} = \frac{A_{22}}{A_{12}} = \frac{c_2}{c_2 - m_2 k_2^2}. \quad (9)$$

Далее заменим тело, масса m_2 которого неизвестна, телом с известной массой m_3 . Для механической системы №2 получим:

3. Логарифмический профиль дроссельного разогрева

$$f(r) = T_0 \cdot \frac{\ln\left(\frac{R}{r}\right)}{\ln\left(\frac{R}{r_w}\right)} \cdot \gamma(r_w \leq r \leq R) + T_0 \cdot \gamma(r \leq r_w)$$

Для такой функции характер нарушения геотермы в зумпфе скважины описывается формулой

$$\frac{T(0, z)}{T_0} = \frac{1}{\ln(R/r_w)} \cdot \ln\left(\frac{z + \sqrt{z^2 + R^2}}{z + \sqrt{z^2 + r_w^2}}\right) \quad (14)$$

Задача о термогидродинамическом зондировании пласта.

Обратная задача ТГДИ – количественная обработка кривых изменения во времени давления и температуры для притекающего из пласта флюида с целью определения гидродинамических параметров пласта, например, проницаемости, скин-фактора. На практике для определения указанных параметров используются различные методы гидродинамических исследований (ГДИ). Недостаток этих методов – невозможность исследования ближней к скважине зоны пласта. Причина этого в большой скорости зондирования (определяется скоростью звука, пьезопроводностью в насыщенной пористой среде) пласта методами ГДИ и в влиянии процессов в стволе скважины на регистрируемую кривую изменения давления. Поэтому начальные участки кривой изменения давления, которые несут информацию о ближней зоне пласта, искажаются и обычно не обрабатываются. Радиус исследования методами ТГДИ определяется скоростью фильтрации в пласте и намного меньше, чем для ГДИ. Приток из пласта, обычно мешающий в ГДИ, для термозондирования наоборот, обеспечивает полезную информацию в скважине. В этом смысле ГДИ и ТГДИ методы исследования пласта не исключают друг друга, а наоборот, взаимно дополняют друг друга, обеспечивая более полное зондирование пласта.

Теоретические основы. Температура притекающей из пласта жидкости отличается от естественной температуры пласта (см. рис.1). Величина изменения температуры в нефтяных скважинах небольшая, не превышает 1-2К и обычно составляет десятые доли градуса. В длительное время работающих скважинах если температурная аномалия стабилизи-

сильно различающиеся друг от друга функции $f(r)$ могут дать близкие распределения температуры в скважине $T(z)$.

Устойчивость может быть обеспечена сужением области решения. Рассмотрим несколько возможных моделей распределения $f(r)$:

1. Кусочно – постоянная функция

$$f(r) = T_0 \cdot \gamma(r \leq R),$$

R – эффективный радиус зоны дроссельного разогрева в пласте. Для нее выражение (11) переходит в

$$\frac{T(0,z)}{T_0} = 1 - \frac{z}{\sqrt{z^2 + R^2}} \quad (12)$$

Теперь, в качестве решения обратной задачи определения R можно использовать следующее следствие из (12). На расстоянии $z=R$ от подошвы работающего пласта отклонение температуры от геотермы $T(0,z)$ составляет 0.3 от величины аномалии T_0 в подошве пласта.

2. Кусочно – линейная функция $f(r)$. Дроссельный разогрев в пласте линейно убывает в пределах зоны R до нуля.

$$f(r) = T_0 \cdot \left(1 - \frac{r}{R}\right) \cdot \gamma(r \leq R)$$

Интеграл в (11) опять легко берется, и можем получить аналогичное (19) выражение

$$\frac{T(0,z)}{T_0} = 1 - \frac{z}{R} \cdot \ln \left(\frac{R}{z} + \sqrt{1 + \frac{R^2}{z^2}} \right). \quad (13)$$

Можно показать, что в этом случае на $z = R$ имеем $T(0,R) = 0.12 T_0$. тогда для определения размера зоны дроссельного разогрева R необходимо определить в зумпфе скважины расстояние от подошвы пласта до точки, где нарушение геотермы составляет 0.12 от величины дроссельного разогрева в пласте $T_0[3]$.

$$\begin{cases} A_{11}^* (-m_1 k_1^{*2} + c_1 + c_2) - c_2 A_{21}^* = 0, \\ A_{12}^* (-m_1 k_2^{*2} + c_1 + c_2) - c_2 A_{22}^* = 0, \\ A_{21}^* (c_2 - m_3 k_1^{*2}) - c_2 A_{11}^* = 0, \\ A_{22}^* (c_2 - m_3 k_2^{*2}) - c_2 A_{12}^* = 0. \end{cases} \quad (10)$$

Коэффициенты собственных форм для этой системы имеют следующий вид:

$$\chi_{21}^* = \frac{A_{21}^*}{A_{11}^*} = \frac{-m_1 k_1^{*2} + c_1 + c_2}{c_2}, \quad \chi_{22}^* = \frac{A_{22}^*}{A_{12}^*} = \frac{-m_1 k_2^{*2} + c_1 + c_2}{c_2}. \quad (11)$$

Соответственно

$$\chi_{21}^* = \frac{A_{21}^*}{A_{11}^*} = \frac{c_2}{c_2 - m_2 k_1^{*2}}, \quad \chi_{22}^* = \frac{A_{22}^*}{A_{12}^*} = \frac{c_2}{c_2 - m_2 k_2^{*2}}. \quad (12)$$

Выпишем в одну систему полученные выше соотношения:

$$\begin{cases} \frac{-k_1^2 m_1 + c_1 + c_2}{c_2} = \frac{c_2}{c_2 - m_2 k_1^{*2}}, \\ \frac{-k_2^2 m_1 + c_1 + c_2}{c_2} = \frac{c_2}{c_2 - m_2 k_2^{*2}}, \\ \frac{-k_1^{*2} m_1 + c_1 + c_2}{c_2} = \frac{c_2}{c_2 - m_3 k_1^{*2}}, \\ \frac{-k_2^{*2} m_1 + c_1 + c_2}{c_2} = \frac{c_2}{c_2 - m_3 k_2^{*2}}. \end{cases} \quad (13)$$

Нам известны значения собственных частот k_1, k_2, k_1^*, k_2^* и масса m_3 . То есть, имеем систему, в которой четыре уравнения и четыре неизвестных: m_1, m_2, c_1, c_2 . Эта система однозначно разрешима.

Таким образом, значения m_1, m_2, c_1, c_2 в механической системе с двумя степенями свободы однозначно определяются по двум наборам собственных частот при помощи замены в механической системе одного из тел с неизвестной массой телом, масса которого дана.

Пример

Пусть система №1 имеет следующие значения собственных частот $k_1^2 \approx 0,73, k_2^2 \approx 8,27$. Заменяем в системе №1 тело массой m_2 , телом, масса которого $m_3 = 3$. В новой системе собственные частоты принимают следующие значения $k_1^{*2} \approx 0,5, k_2^{*2} \approx 7,8$. Необходимо найти массы тел m_1, m_2 и коэффициенты жесткости пружин c_1, c_2 .

Подставим в систему (13) известные нам значения:

$$\begin{cases} \frac{-0,73m_1 + c_1 + c_2}{c_2} = \frac{c_2}{c_2 - 0,73m_2}, \\ \frac{-8,27m_1 + c_1 + c_2}{c_2} = \frac{c_2}{c_2 - 8,27m_2}, \\ \frac{-0,51m_1 + c_1 + c_2}{c_2} = \frac{c_2}{c_2 - 1,5}, \\ \frac{-7,8m_1 + c_1 + c_2}{c_2} = \frac{c_2}{c_2 - 23,4}. \end{cases}$$

Решив данную систему, мы однозначно найдём, что $m_1 = 1, m_2 = 2, c_1 = 3, c_2 = 4$.

Литература

1. А. М. Ахтямов, Г. И. Гарипова. Диагностирование механической системы с двумя степенями свободы по собственным частотам и амплитудам её колебаний. Электронный журнал "Техническая акустика", <http://ejta.org>, 2008, 13.
2. Пановко Я. Г. Введение в теорию механических колебаний. –М.: Наука, 1991. – 72-100.
3. Кузьмин П. А. Малые колебания и устойчивость движения. М.: Наука, 1973. – 88-95.

Термозондирование пласта по распределению температуры в зумпфе скважины

В зумпфе скважины ниже работающих пластов на термограммах фиксируется зона нарушения геотермы. Дроссельный разогрев значительно изменяет температуру пласта только вблизи призабойной зоны. Максимальная величина разогрева приходится на стенку скважины и разогрев убывает в пласте с удалением от скважины. Радиальный градиент температуры обеспечивает радиальный градиент температуры и в подстилающих пласт породах. Часть потока тепла от пласта в результате уходит в радиальных направлениях. Тогда распределение температуры в зумпфе скважины должно быть связано с характером дроссельного разогрева в самом пласте. В приближении однородной изотропной среды ниже работающих пластов для стационарного случая его можно найти из решения следующей краевой задачи теплопроводности

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = 0, \quad r \geq 0, z > 0 \quad (8)$$

$$T(r, 0) = f(r) \quad (9)$$

Применив преобразование Ханкеля по переменной r решение задачи (8)-(9) находим в виде

$$T(r, z) = \int_0^\infty \int_0^\infty f(x) J_0(px) J_0(pr) e^{-pz} x p dx dp \quad (10)$$

На оси скважины при $r=0$ имеем вместо (10) выражение

$$T(0, z) = \int_0^\infty f(x) \frac{zx}{(z^2 + x^2)^{3/2}} dx \quad (11)$$

Как видно из (11), распределение температуры в зумпфе скважины связано с характером распределения температуры по r в пласте.

Решение (11) может быть использовано при решении обратной задачи. **Обратная задача** о восстановлении профиля дроссельного разогрева $f(r)$ в ближней к скважине зоне пласта по распределению температуры в зумпфе скважины $T(z)$. Очевидно, что задача эта является некорректной, неустойчивость решения обратной задачи обусловлена тем, что

$$K(z-x) = \frac{1}{v\tau} \exp\left(-\frac{z-x}{v\tau}\right)$$

Определение постоянной времени датчика температуры

Решение (2) можно использовать и для определения постоянной времени датчика τ . Можно поставить обратную задачу об определении постоянной времени термометра τ по измеренному распределению $T(z)$ в интервале с известным распределением температуры $f(z)$.

Так, для участков с линейным распределением температуры в скважине

$$f(z) = T_0 + Gz$$

выражение (2) для $z \gg v\tau$ принимает вид

$$T(z) = T_0 + Gz + Gv\tau \quad (5)$$

и отличие зарегистрированной температуры от истинной составляет постоянную величину

$$\delta T = Gv\tau. \quad (6)$$

Оно может быть измерено остановкой термометра в некоторой точке интервала с линейным распределением температуры по глубине. Тогда постоянная времени датчика температуры в текущих условиях измерения оценивается как

$$\tau = \frac{\delta T}{Gv} \quad (7).$$

Следует отметить, что такой способ оценки τ очень часто используется на практике, поскольку измеренное в лабораторных условиях паспортное значение величины τ может оказаться во много раз меньше действительного значения τ в скважинных условиях по причине загрязнения поверхности датчика.

Некоторые обратные задачи скважинной термометрии и подземной термогидромеханики

Рамазанов А.Ш., Валиуллин Р.А.

Башгосуниверситет, Ramaz@bsu.bashedu.ru

Аннотация

В статье обсуждаются постановки некоторых обратных задач скважинной термометрии и подземной термогидромеханики. Они основываются на данных термических и термогидродинамических исследований (ТГДИ) в нефтяных скважинах и связаны с определением параметров потока флюида в стволе работающей скважины, параметров разрабатываемых пластов.

Введение

Термометрия является одним из наиболее информативных методов при геофизических исследованиях скважин, наибольший объем измерений при диагностике состояния скважин и пластов приходится на термические. В настоящее время на практике используются высокочувствительные термометры с разрешающей способностью порядка 0.01К. При этом уверенно регистрируются и анализируются температурные аномалии величиной в десятые доли градуса. Это позволяет учитывать неизотермичность фильтрации в нефтяных пластах вследствие проявления термодинамических эффектов: дроссельного, адиабатического, баротермического. При интерпретации нестационарных распределений температуры в стволе скважины и изменения температуры притекающего из пласта флюида во времени используются результаты измерения давления и расхода. Термогидродинамические исследования (ТГДИ) основаны на измерении температуры, давления и расхода в стволе скважины.

По сути своей интерпретация данных скважинной термометрии и ТГДИ основана на решениях обратных задач. Исследуемые температурные и термогидродинамические поля регистрируются в стволе скважины и в результате их интерпретации определяются качественные и количественные характеристики:

- потока флюида в стволе скважины;

- потока флюида по негерметичному заколонному пространству;
- продуктивных пластов;
- насосно - подъемного оборудования.

Обратные задачи скважинной термометрии являются некорректными по Тихонову. Физически неустойчивость решения объясняется тем, что при сильно различающихся параметрах для модели исследуемой среды (потока, пласта или околоскважинного пространства) можно получить слабо отличающиеся распределения температуры в скважине. Поэтому при решении обратных задач используются различные способы регуляризации.

Данная работа посвящена постановке и обсуждению некоторых обратных задач скважинной термометрии и ТГДИ. Обсуждаются физическая сторона постановки обратных задач, возможные пути их решения, алгоритмы обработки результатов скважинных измерений.

Задача о восстановлении истинного распределения температуры в скважине

В настоящее время на практике при термических исследованиях скважины используются два способа измерения. По первому способу датчик температуры перемещается вдоль ствола скважины, при этом получают информацию об изменении температуры по глубине в определенном интервале. По второму – термометр устанавливается на определенной глубине и регистрируется изменение температуры во времени.

Очевидно, что истинное распределение может быть непосредственно измерено не всегда. Если оно стационарное (геотерма в длительно простаивающей скважине, квазистационарное распределение температуры в длительное время работающих скважинах), истинное распределение температуры может быть получено путем поточечных измерений. При этом термометр в каждой точке измерения выдерживается до полного установления теплового равновесия между датчиком температуры и окружающей датчик средой. На практике таким образом проводятся измерения только при геотермических исследованиях в длительное время простаивающих скважинах.

При регистрации нестационарного распределения температуры в точке и при регистрации термограммы вдоль ствола скважины при движении термометра за счет собственной теплоемкости температура датчика всегда будет отличаться от температуры жидкости вокруг датчика.

Для средней по объему датчика температуры T уравнение баланса тепла может быть записано в виде

$$v \frac{dT}{dz} = \frac{\alpha S}{C} [f(z) - T(z)], \quad (1)$$

где

$f(z)$ - истинное распределение температуры по глубине z ;
 v - скорость движения термометра, м/с;
 α - коэффициент теплообмена между датчиком и средой, Вт/м²К;
 S - площадь поверхности контакта датчика со средой, м²;
 C - теплоемкость датчика, Дж/К.

Решение уравнения (1) при условии $T(0) = T_0$ имеет вид

$$T(z) = T_0 e^{-z/v\tau} + \frac{e^{-z/v\tau}}{v\tau} \int_0^z f(x) e^{-x/v\tau} dx, \quad (2)$$

где

$$\tau = \frac{C}{\alpha S} - \text{постоянная времени датчика температуры, с.}$$

При известных v и τ выражения (1) и (2) можно использовать для решения обратных задач.

Обратная задача может заключаться в определении функции $f(z)$ по измеренному распределению $T(z)$ при известном значении τ .

Например, используя уравнение (1), при известном $v\tau$ по зарегистрированному $T(z)$ температуру среды можно восстановить как

$$f(z) = T(z) + v\tau \frac{dT}{dz} \quad (3)$$

Недостаток такого решения – необходимость дифференцирования экспериментальных данных, что само по себе неустойчиво.

При использовании решения прямой задачи (2), $f(z)$ можно восстановить, используя деконволюцию

$$\int_0^z f(x) K(z-x) dx = T(z) - T_0 e^{-z/v\tau}. \quad (4)$$

Здесь