

ISSN 0002-3213

2009 • 3

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ФЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ
БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН



REPORTS OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

Бас редактор
КР ҮФА академигі **М.Ж. Жұрынов**

Редакция алқасы:

КР ҮФА академигі **Т.С. Садыков** (бас редактордың орынбасары), КР ҮФА-ның академиктері **У.Қ. Бишімбаев**, **З.Д. Дүйсенбеков**, **Т.И. Есполов**, **Б.Т. Жұмагұлов**, **С.З. Зиманов**, **Т.Ә. Қожамқұлов**, **Т.Ә. Момынов**, **С.С. Сартаев**, **Д.Қ. Сұлеев**, **И.В. Северский**, экономика ғылымдарының докторы, проф. **Ж.М. Әділов**, медицина ғылымдарының докторы, проф. **А.А. Ақанов**, зан ғылымдарының докторы, проф. **Е.А. Онғарбаев**, биология ғылымдарының кандидаты **Ж.С. Хайдарова** (жаупты хатшысы)

МАЗМУНЫ

МАТЕМАТИКА

Рысбайұлы Б., Байманқұлов А.Т. Топырак сұнының диффузия коэффициентін анықтауда қолданылатын тұра және түйіндес айырымдық сұлбалардың орнықтылығы.....3

ИНФОРМАТИКА

Боранбаев А.С. Сактандыру саласындағы бизнес процестер үшін Веб акпараттық жүйелерді құруға арналған концепция.....8

Боранбаев А.С. Ақпараттық жүйелерді құрғанда бағдарламалық жабдықтаманы параллельді нұсқалар жүйесінің көмегімен басқару.....12

Мұрзабеков З.Н. Басқаруга шектеулөр және сзықты стационарлы емес басқару жүйесінің сыртқы өсерлерін тиімді басқаруға арналған шеткі есебінің конструктивті шешу өдісі.....16

ФИЗИКА

Цай К.В. БН-350 реакторында 26-59 акж дозаға дейін сөулелендірілген 12x18n10t болаттың радиациялық закымда-нуының ерекшеліктері.....21

Азмағанбетова Ж.Р., Лущик А.Ч., Маароос А., Нұрахметов Т.Н., Тоқсанбаев Б.Ж. CaSO₄·Tb³⁺, Na⁺ люминофорында термоынталандырылған және туннельдік процестер25

АСТРОФИЗИКА

Дубовишенко С.Б., Джазаиров-Кахраманов А.В. Қуат төмен болғандағы радиациялық ⁴He¹²C-кармаудың астрофизикалық S-факторы.....30

МЕХАНИКА

Уәлиев Г., Жомартов А.А. Машина-автоматтың сенімділігі және механизмдердің циклограммасы.....37

Синчев Б.К. Механизмнің онтайланған синтезі.....41

ХИМИЯ

Молдахметов З.М., Агелменев М.Е., Братухин С.М., Поликарпов В.В. Сұйық фаза жағдайындағы мезогенді жүйелерді модельдеу.....45

СЕЙСМОЛОГИЯ

Глатоленков А.И. Тянь-Шань жер қыртысының жоғарғы қабаттарындағы геодинамика, жердің екі полярлық өстерінің өзара әрекетінің нәтижесі сияқты.....53

ТАУ-КЕН ICI

Молдабаева Г.Ж. Флюидті ультрадыбыспен өндеу барысында жанғырықтың көрсеткіштері.....58

ТЕХНОЛОГИЯ

Малышев В.П., Тұрдықожаева А.М., Қажыкенова А.Ш. Бейберекет бөлшектер тұжырымдамасы негізінде балқымалардың тұтқырлығының жалпылама жартылай эмпиризмдік үлгісін жасау.....63

МЕДИЦИНА

КЕЙБІР КЛИНИКАЛЫҚ БАЙҚАЛҒАН НӘРСЕЛЕРДІҢ ФИЗИОЛОГИЯЛЫҚ НЕГІЗДЕРІ ТУРАЛЫ

Атшабаров Б. А. Жасырын синкинезия симптомы туралы70

Атшабаров Б. А. Талдағыш козғалтқыштық функционалдық жағдайын бағалау арқылы қажуды диагностикалау тәсілі.....73

Біздің авторлар.....78

Главный редактор
академик НАН РК М.Ж. Журинов

Редакционная коллегия:

академик НАН РК Т.С. Садыков (заместитель главного редактора), академики НАН РК В.К. Бишимибаев, З.Д. Дүйсенбеков, Т.И. Есполов, Б.Т. Жумагулов, С.З. Зиманов, Т.А. Кожамкулов, Т.А. Муминов, С.С. Сартаев, Д.К. Сулеев, И.В. Северский, доктор экономических наук, проф. Ж.М. Адилов, доктор медицинских наук, проф. А.А. Аканов, доктор юридических наук, проф. Е.А. Онгарбаев, кандидат биологических наук Ж.С. Хайдарова (ответ. секретарь)

СОДЕРЖАНИЕ**МАТЕМАТИКА**

Рысбайулы Б., Байманкулов А.Т. Устойчивость разностных схем прямой и сопряженной задачи для определения коэффициента диффузии почвенной воды.....5

ИНФОРМАТИКА

Боранбаев А.С. Концепция разработки Веб информационных систем для бизнес процессов в сфере страхования.....8

Боранбаев А.С. Управление программным обеспечением с помощью системы параллельных версий при разработке информационных систем.....12

Мурзабеков З.Н. Конструктивный метод решения краевых задач оптимального управления для линейных нестационарных управляемых систем при наличии внешних воздействий и ограничений на управления.....16

ФИЗИКИ

Цай К.В. Особенности радиационного повреждения стали 12X18H10T, облученной до доз 26-59 сна в реакторе БН-350.....21

Азмаганбетова Ж.Р., Лущик А.Ч., Маароос А., Нурахметов Т.Н., Токсанбаев Б.Ж. Термостимулированные и туннельные процессы в люминофорах $\text{CaSO}_4 \cdot \text{Tb}^{3+}, \text{Na}^{1+}$ 25

АСТРОФИЗИКА

Дубовиченко С.Б., Джазаиров-Кахраманов А.В. Астрофизический S-фактор радиационного $^4\text{He}^{12}\text{C}$ захвата при низких энергиях.....30

МЕХАНИКА

Уалиев Г., Джомартов А.А. Надежность машины-автомата и циклографма её механизмов.....37

Синчев Б.К. Оптимизационный синтез механизмов.....41

ХИМИЯ

Мулдахметов З.М., Агельменев М.Е., Братухин С.М., Поликарпов В.В. Моделирование мезогенных систем в условиях жидкой фазы.....45

СЕЙСМОЛОГИЯ

Глатоленков А.И. Геодинамика в поверхностных слоях земной коры Тянь-Шаня, как результат взаимодействия двух полярных осей планеты.....53

ГОРНОЕ ДЕЛО

Молдабаева Г.Ж. Параметры отклика при ультразвуковой обработке флюидов.....58

ТЕХНОЛОГИЯ

Малышев В.П., Турдукожаева А.М., Кажикенова А.Ш. Разработка обобщенной полуэмпирической модели вязкости расплавов на основе концепции хаотизированных частиц.....63

МЕДИЦИНА**О ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ОСНОВАХ НЕКОТОРЫХ КЛИНИЧЕСКИХ ПРОЯВЛЕНИЙ**

Атчабаров Б. А. О симптомах скрытой синкинезии.....70

Атчабаров Б. А. Способ диагностики утомления по оценке функционального состояния двигательного анализатора.....73

Наши авторы.....78

Editor-in-chief
academician of NAS of the RK **M.Zh. Zhurinov**

Editorial staff:

academician of NAS of the RK **T.S. Sadikov** (deputy editor-in-chief), academicians of NAS of the RK **V.K. Bishimbaev, Z.D. Duisenbekov, T.I. Espolov, B.T. Zhumagulov, S.Z. Zimanov, T.A. Kozhamkulov, T.A. Muminov, S.S. Sartaev, D.K. Suleev, I.V. Seversky**, doctor of economic sciences, prof. **Zh.M. Adilov**, doctor of medical sciences, prof. **A.A. Akanov**, doctor of juridical sciences, prof. **E.A. Ongarbaev**, candidate of biological sciences **Zh.S. Khaidarov** (secretary)

CONTENT

MATHEMATICS

<i>Rysbaiuly B., Baimankulov A.T.</i> The difference schemes stability of direct and linked task for diffusion coefficient definition of soil water.....	3
--	---

INFORMATION SCIENCE

<i>Boranova A.S.</i> The Conception development of Web information systems for business operations in the Insurance field.	8
<i>Boranova A.S.</i> The Software management by parallel version system during the information system development.....	12
<i>Murzabekov Z.N.</i> The edge tasks' constructive decision method of optimal management for linear non-stationary management systems at presence of external impacts and management limitations.	16

PHYSICS

<i>Tsai K.V.</i> The Peculiarities of 12X18H10T steel radiation damage irradiated to 26-59 dpa doses in the BN-350 reactor.....	21
<i>Azmaganbetov Zh.R., Luschik A.Ch., Maaroos A., Nurakhmetov T.N., Toksanbaev B.Zh.</i> The thermostimulated and tunnel processes in the $\text{CaSO}_4 \cdot \text{Tb}^{3+}, \text{Na}^{1+}$ luminophors.....	25

ASTROPHYSICS

<i>Dubovichenko S.B., Dzhazairov-Kakhramanov A.V.</i> The astrophysical S-factor of the radiation $^4\text{He}^{12}\text{C}$ capture at low energies.....	30
---	----

MECHANICS

<i>Ualiev G., Dzhomartov A.A.</i> The security of machine-automaton and cyclogramme of its mechanisms.....	37
<i>Sinchev B.K.</i> The Optimization synthesis of mechanisms.....	41

CHEMISTRY

<i>Muldakhetov Z.M., Agelmenev M.E., Bratukhin S.M., Polikarpov V.V.</i> The mezogenetic systems' modeling in liquid phase conditions.....	45
--	----

SEISMOLOGY

<i>Glatolenkov A.I.</i> The geodynamics in surface layers Tyan-Shan earth crust as the result of two polar planet axis interactions.....	53
--	----

MINING

<i>Moldabaeva G.Zh.</i> The response parameters at ultrasonic fluids' processing.....	58
---	----

TECHNOLOGY

<i>Mayishev V.P., Turdukozhaeva A. M., Kazhikenova A. Sh.</i> The generalized semi-empirical viscosity model development of melts on the basis of chaotic particles conception.....	63
---	----

MEDICINE

ABOUT PHYSIOLOGICAL BASES OF SOME CLINICAL REVEALMENTS

<i>Atchabarov B.A.</i> About the symptoms of latent synkinesis.	70
<i>Atchabarov B.A.</i> The fatigue diagnostics method by assessment of motor analyzer functional state.....	73

Your authors.....	78
-------------------	----

Б. РЫСБАЙУЛЫ, А.Т. БАЙМАНКУЛОВ

УСТОЙЧИВОСТЬ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ПРЯМОЙ И СОПРЯЖЕННОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ПОЧВЕННОЙ ВОДЫ

(Представлена академиком НАН РК Ж.Ж. Байгунчековым)

1. Постановка задачи.

В работе изучается система атмосфера- ненасыщенная зона- грунтовая вода. Движение воды в системе имеет непрерывный характер. Теория движения воды в почве при изотермических условиях для ненабухающих и недеформирующихся грунтов основано на закон Букингема /1/, которое выражает связь между потоком и градиентом потенциала переноса. Аналитическая запись закона Букингема записано в виде

$$q = -D \frac{\partial W}{\partial z} - K \quad \text{Ричардсоном /2/ и Чайлосом /3/}$$

Здесь – коэффициент диффузии влаги, q – удельный поток воды, K – коэффициент гидравлической проводимости почвы, W – влажность грунта. Уравнение неразрывности для ненасыщенного потока можно представить в виде /4/

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial W}{\partial z} \right) \quad (1)$$

В начальный момент распределение влаги задается. То есть

$$W(z,0) = W_0(z)$$

На границе поверхности почвы и атмосферы задается граничное условие второго рода

$$\frac{\partial W(H,t)}{\partial z} = A(t)$$

На границе грунтовых вод с почвой задается первое граничное условие

$$W(0,t) = W_1 = \text{const}$$

Чтобы решить обратную задачу, т.е. найти например $D(z)$ мы должныставить дополнительное условие. В нашем случае это влага на поверхности почвы

$$W(H - \Delta z, t) = W_g(t), t \in [0, T].$$

Введем новую функцию

$$W(z,t) = \bar{W}(z,t) - W_1 - zA(t). \quad (2)$$

Легко проверить, что

$$\bar{W}(0,t) = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial \bar{W}(H,t)}{\partial z} = 0$$

Из (2) следует равенства

$$\frac{\partial W(z,t)}{\partial z} = \frac{\partial \bar{W}(z,t)}{\partial z} - A(t)$$

Найденные производные подставляем в (1). Функцию $\bar{W}(z,t)$ снова обозначим через $W(z,t)$. Тогда получится следующая задача

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial W}{\partial z} \right) - A(t) \frac{\partial D(z)}{\partial z} + zA'(t) \quad (3)$$

$$W(0,t) = 0, \frac{\partial W(H,t)}{\partial z} = 0,$$

$$W(z,0) = W_0(z) + W_1 + zA(0) \quad (4)$$

В дальнейшем будем пользоваться обозначениями:

$f(z,t) = zA'(t)$ и величину $W_0(z) + W_1 + zA(0)$ обозначим снова через $W_0(z)$.

Задача (3)-(4) в области $Q = (0, H) \times (0, T)$ при заданном $D(z)$ имеет единственное устойчивое решение /5/. Методика решения обратной задачи кондуктивного распространения температуры разработана в работах /6, 7/, а общая схема определения коэффициента диффузии на дифференциальном уровне изучена в работе /8/. В настоящей работе доказываются устойчивость разностных схем прямой и сопряженной задачи, построенные при определении коэффициента диффузии $D(z)$.

2. Разностные задачи.

В дискретной области

$$Q_N^m = \{z_i = i \cdot \Delta z, t_j = j \cdot \Delta t \mid N \cdot \Delta z = H; m \cdot \Delta t = T\}$$

ищется решение задачи

$$Y_i^{j+1} = (D(z_{i-1}) Y_{\bar{i}}^{j+1})_z + A^{j+1} D_{i,z} + \varphi_i^{j+1},$$

$$i = 1, 2, \dots, N; j = 0, 1, \dots, m-1. \quad (5)$$

$$Y_0^j = 0, \quad Y_{N,\bar{z}}^j = 0, \quad Y_i^0 = W_0(z_i) \quad (6)$$

В работе /9/ из (6)-(7) получена сопряженная задача

$$U_i^{j+1} + (D_n(z_{i+1})U_{i,z}^j)_{\bar{z}} = 0 \quad (7)$$

$$U_i^m = 0, \quad U_0^j = 0,$$

$$D_n(z_{N-1})U_{N,\bar{z}}^j = 2(Y_N^{j+1} - U_g(t_{j=1})) \quad (8)$$

3. Априорные оценки.

Умножим (5) на $2Y_i^{j+1}\Delta z\Delta t$ и суммируем по всем узлам сетки

$$Q_N^m = \left\{ z_i = i \cdot \Delta z, \quad t_j = j \cdot \Delta t \mid N \cdot \Delta z = H; \quad m \cdot \Delta t = T \right\}.$$

После применения формулы суммирования по частям получим

$$\begin{aligned} \|Y\|_i^2 + 2 \sum_j \left\| \sqrt{D_{i-1}} Y_z \right\|^2 \Delta t &\leq -2 \sum_{i,j} A(t) D_i Y_{i,z} h \Delta t + \\ &+ 2 \sum_{i,j} \varphi_i^{j+1} Y_i^{j+1} \Delta z \Delta t + \|W_0\|^2. \end{aligned}$$

Применяя ε – неравенство Коши выводим, что

$$\begin{aligned} \|Y\|_i^2 + \sum_j \left\| \sqrt{D} Y_x \right\|^2 \Delta t &\leq \sum_i D(z_i) \Delta z + \\ &+ \sum_{i,j} f^2 \Delta t \Delta z + \sum_j \|Y\|^2 \Delta t + \|W_0\|^2. \end{aligned}$$

Применяя разностный аналог леммы Гронуолла получим

$$\|Y\|^2 + \sum_j \left\| \sqrt{D} Y_x \right\|^2 \Delta t \leq C_1 + \sum_i D(z_i) \Delta z \quad (9)$$

где

$$C_1 = \|W_0\|^2 + \sum_{i,j} \varphi^2(z_i, t_j) \Delta z \Delta t.$$

Б) Берем разностную производную по t от (5) и умножим на $2Y_i\Delta z\Delta t$ и суммируем по i от 1 до $N-1$, а по j от 1 до произвольного j . Тогда

$$\begin{aligned} \|Y_i\|^2 + 2 \sum_j \left\| \sqrt{D_{i-1}} Y_{iz} \right\|^2 \Delta t &\leq - \sum_{i,j} A_t D(z_i) Y_{iz} \Delta h \Delta t + \\ &+ 2 \sum_{i,j} \varphi_i(z, t) Y_i^{j+1} \Delta h \Delta t + \|W_0\|^2. \end{aligned}$$

Применяя ε – неравенство Коши и разностный аналог леммы Гронуолла получим

$$\|Y_i\|^2 + \sum_j \left\| \sqrt{D_{i-1}} Y_{iz} \right\|^2 \Delta t \leq C_2 + \sum_i D(z_i) \Delta z \quad (10)$$

4. Доказательство ограниченности сверху величины $\sum_i D(z_i) \Delta z$

В работе /4/ отмечается, что на верхней границе почвы капиллярно-сорбционный потенциал принимает постоянное значение. Ввиду того, что

$$D(z) = k \frac{\partial \psi}{\partial \omega}$$

Получается, что $D(H)=0$. Т.е. на границе почвы с атмосферой, коэффициент капиллярной диффузии будет равен нулю. Учитывая этот факт суммируем систему (5) от произвольного i до $N-1$. Тогда

$$\sum_i Y_{i,z}^{j+1} \Delta z = D(z_{i-1}) Y_{iz}^{j+1} + A D(z_i) + \sum_i \varphi(z_i, t) \Delta z$$

Умножаем его на Δt и суммируем по j . Из практического смысла начальных данных следует, что $0 < A_0 < \sum_j |A^j| \Delta t < \infty$. Поэтому

$$\begin{aligned} A_0 D(z_i) &\leq \sum_i |f(z_i, t)| \Delta z \Delta t + \sum_{i=1}^{N-1} |Y_i^{j+1}| - \\ &- Y_i^0 |\Delta z + \sum_j D_n(z_i) |Y_{iz}^{j+1}| \Delta t. \end{aligned}$$

Еще раз умножая на Δz и суммируя по i получаем

$$\begin{aligned} A_0 T \sum_i D_n(z_i) \Delta z &\leq H \sum_{i,j} |\varphi(z, t)| \Delta z \Delta h + \\ &+ H \|Y\|^2 + \sum_i D_i \Delta z + C_3 \end{aligned}$$

или

$$(A_0 T - 1) \sum_i D_n(z_i) \Delta z \leq C_4.$$

Время расчета T должно быть такой, чтобы $A_0 T - 1 > 1$. Тогда

$$\sum_i D_n(z_i) \Delta z \leq C_4. \quad (11)$$

Неравенство $A_0 T > 2$ означает, что для определения коэффициента капиллярной диффузии мы должны наблюдать изучаемый участок почвы достаточно продолжительное время. Только в таком случае мы получим достоверный результат.

На основе полученной оценки из (11) выводится оценка

$$\|Y\|^2 + \sum_j \left\| \sqrt{D} Y_x \right\|^2 \Delta t \leq C_5.$$

Доказано

Теорема 1. Если $f(z, t) \in L_2(Q)$,

$W_0(z) \in L_2(0, H)$, то для решения задачи (5)-(6) справедлива оценка

$$\max_j \|Y\|^2 + \sum_j \left\| \sqrt{D} Y_{\bar{x}} \right\|^2 \Delta t + \sum_i D(z_i) \leq C_5 < \infty,$$

а если $f(z, t) \in L_2(0, H; W_2^1(0, T))$,

$W_0(z) \in W_2^1(0, H)$, то для решения задачи (5)-(6) справедливо оценки

$$\max_j \|Y_i\|^2 + \sum_j \left\| \sqrt{D} Y_{\bar{z}_i} \right\|^2 + \sum_i D(z_i) \Delta z \leq C_6 < \infty$$

Аналогично доказывается

Теорема 2. Если $f(z, t) \in L_2(0, H; W_2^1(0, T))$,

$W_0(z) \in L_2(0, H)$, $W_g(t) \in L_2(0, T)$, то для решения задачи (7)-(8) справедливо оценка

$$\max_j \|U\|^2 + \sum_j \left\| \sqrt{D} U_{\bar{z}} \right\|^2 \Delta t \leq C_7 < \infty,$$

а если

$$f(z, t) \in W_2^1(0, H; W_2^2(0, T)), \quad W_0(z) \in W_2^1(0, H),$$

$W_g(t) \in W_2^1(0, T)$, то для решения задачи (7)-(8) справедливо оценки

$$\max_j \|U_i\|^2 + \sum_j \left\| \sqrt{D} U_{\bar{z}_i} \right\|^2 \leq C_8 < \infty$$

На основе теоремы 1 и 2 доказывается

Теорема 3. Если $f(z, t) \in L_2(0, H; W_2^1(0, T))$,

$W_0(z) \in L_2(0, H)$, $W_g(t) \in L_2(0, T)$, то решения задачи (5)-(6) и (7)-(8) являются устойчивой относительно величин $A(t)$, $W_0(z)$ и $W_g(t)$

ЛИТЕРАТУРА

1. *Buckingham E.* Studies on movement of soil moisture. U. S. Dep. Agric. Bur. of Soils. (Washington), 1907, Bull. 38.
2. *Richards L.A.* Capillary conduction of liquids through medians. – Physics, 1931, vol. 1, p.318-333.
3. *Childs E.D.* The transport of water through heavy clay soils. I, III. – j. Ag. Sci., 1936, vol. 26.
4. *Нергин С.В., Юзефович Г.И.* О расчете нестационарного движения влаги в почве// Докл. ВАСХНИЛ, №6, 1966.
5. *Тиханов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1996, 724 с.
6. *Рысбайулы Б., Байманкулов А.Т., Маханбетова Г.И.* Обратная задача кондуктивного распространения тепла в однородной среде // Вестник НАН РК, 2008, №1, ст. 11-13.
7. *Рысбайулы Б., Байманкулов А.Т., Исаилов А.О.* Разностный метод определение коэффициента теплопроводности грунта в процессе промерзаний// Вестник НАН РК. 2008. -№2. - С. 7-9.
8. *Байманкулов А.Т.* Определение коэффициента диффузии почвенной воды в однородной среде// Известия НАН РК, 2008, № 3, с.45-47.
9. *Рысбайулы Б., Байманкулов А.Т.* Итерационный метод для определения коэффициента диффузии почвенной воды (в печати).

Резюме

Қанықпаған топырактағы ылғалдың қозғалысы қарастырылады. Жер бетіндегі ылғал беріледі. Топырак сұнының диффузия коэффициентін анықтауда тұра және түйіндес айырымдық сұлбалар алынады. Осы сұлбалардың орнықтылығы дәлелденеді.

Summary

Moisture movement in a no saturated ground was studied. The moisture on an earth surface is set. To define factor of diffusion of soil water are made direct and interfaced difference problems. Stability received difference problems is proved.

Поступила 24.04.09 г.

UDC 681.3

A. S. BORANBAYEV

CONCEPTS OF DEVELOPMENT OF WEB-BASED INFORMATION TECHNOLOGY SYSTEMS FOR BUSINESS OPERATIONS IN AN INSURANCE INDUSTRY

(Represented by academician of NAS of the RK M.O. Otelbayev)

The main objective of this article is to describe the approach concerning the construction and execution of the developed web-based information system. The concept behind the developed Java based information system is discussed in this article.

INTRODUCTION

As the requirements of competitive advantage have evolved, the need for web-based information systems for business processing in a health insurance computerized system has been emphasized. Factors influencing business performance in a health-insurance e-business system were identified. Web-based technology can deliver extraordinary opportunities to reengineer the business operations in the health-insurance systems. Web-based technology is considered an emerging area and an important tool for improving business operations in various organizations [1]. Web-based business processes make the business more competitive, and more efficient. Strategic web-based business processing in a health-insurance environment is a growing requirement for improving productivity and profitability.

Web-based systems are delivered to the end users from a web server over an Internet. The web browser allows a single interface to work across different operating systems, such as Windows, Mac OS, and Linux. Web-based systems can be used to implement online customer billing systems, insurance claim processing systems and perform many other functionalities. One important business Web-based application is an on-line insurance claim processing system. Project is targeted at modernizing the claims and customer service environment.

1. Provide foundational enhancements to the processes and systems that support claims and customer service.

2. Movement towards Service Oriented Architecture.

3. Leverage existing environment while iteratively implementing enhancements and new business innovations.

The developed Information System addresses the front end of claims processing that receives, validates and routes claims to adjudication. Claims adjudication refers to the determination of a member's payment, or financial responsibility, after a medical claim is applied to the member's insurance benefits. The new system delivers: 1)Increased claim volume; 2)Increased quality and customer satisfaction.

The information managed by this type of application is important to the insurance business that will want to generate financial reports, such as the number of sales receipts, outstanding claims, and etcetera. Usually such applications store information in a relational database system, such as Oracle, or Microsoft SQL Server. Modern web-based information systems require a mix of web site development techniques together with traditional information system development competencies, such as programming and database design.

The purpose of this article is to describe a research project, which involved the building of a web-based information system for an organization working in the insurance industry. In the article, the research design and methodology behind the developed web-based information system are introduced; the J2EE application framework is described; the concepts behind the development of exception handling component in the process of building the application are discussed. The information system was developed using a methodology, which was designed to assist in the custom development projects.

OVERVIEW OF THE INFORMATION SYSTEM

Information Analysis

The Unified Modelling Language (UML) was used for specifying requirements from the technical perspective. UML use cases were developed to describe the major functionality of the proposed system, including components such as: claim processing, claim inquiry, and claim correction. This is a data intensive application that was implemented around a relational database. UML was heavily used in the development of class diagrams. The use of Object Oriented (OO) principles and mechanisms, such as encapsulation and inheritance, was made. UML sequence diagrams were also used to create a technical design.

Design Overview

Web-based applications have various design concerns such as presentation, business logic, data access and security [1] [3]. A separation of design concerns into code layers has several advantages: ease of maintenance, the ability to implement design patterns, and the ability to select specialized techniques for specific concerns. Separating a project into layers can result in dependencies between those layers. For example, a single use case involving simple data entry and inquiry usually must integrate presentation, business logic and data access together to deliver required functionality [3]. Therefore, there must be a defined strategy to manage the dependency relationships [1].

The following roles are identified in a development team. (1) Front end developers are developing Java Server Pages (JSPs), Action/ActionForm classes. (2) Service developers are developing application services and integrating the different parts of the application used by these services. (3) Integration developers are developing integration artifacts such as Data Access Objects (DAO).

The developed application combines design patterns, configuration files and reusable code [1]. This application uses Spring's *Inversion of Control* to manage dependencies [4]. The code that we write is dependent on the objects it uses. It is responsible for creating these objects. This may result in tight coupling, but we would prefer that our code be loosely coupled. Dependency injection is a technique that helps us to accomplish this goal. Dependency Injection is a form of Inversion of Control (IoC) [5].

When applications use dependency injection, the code becomes much cleaner and easier to follow. It is also loosely coupled, allowing for easier configuration and testing. The developed application uses several Spring application context files to define dependencies between the layers.

The developed application consists of two distinct parts: *code* and *configuration*. Code resides in a particular application layer and focuses on a particular piece of the application solution. This could be presenting data to the screen, connecting to a database. Configuration glues the various layers of the application together. Separating configuration from code allows us to manage configuration independently, giving us the flexibility of applying different configurations to the same code base. For example, DAO implementation knows that it is using Java Database Connectivity (JDBC) to connect to a database through a data source, but it does not know anything about the implementation of that data source [1]. It may point to the remote database or a local database. Regardless of where the data source comes from, the DAO implementation will operate on the data source in the same manner. Likewise, a Service object may depend on a DAO, but it does not know whether the DAO is implemented via JDBC, or Hibernate [1]. The service object interacts with the DAO in the same way, regardless of the DAO's implementation.

Spring framework allows us to manage our application's entire configuration through a Spring application context, defined by a set of Extensive Markup Language (XML) files. We could define the application context in one file [1]. However, by defining it in groups of smaller files, we can simplify configuration management.

The developed application has separated its configuration from its code. We can use an alternate configuration set targeted specifically towards development.

The developed application defines two configuration sets: *default* and *standalone*. The *default* configuration set connects to the development database using the datasource defined in Java Naming and Directory Interface (JNDI). It uses fully developed application services and DAOs. The *standalone* configuration set is the most flexible environment for development. This configuration set: (1) Connects to either a locally installed database or the development database using a

DriverManagerDataSource; (2) Uses developed application Services and DAOs; (3) Spring application contexts can be run and tested entirely outside of the application server.

The developed application is configured by its application context. The application context may be defined in XML file. A configuration set is a set of XML files that define one application context. The configuration set consists of two parts: *service* and *web*. The *service* part defines services, DAOs, and resources for the Service and Integration layers. The *web* part defines components for the presentation layer [1].

The following will be typically required to develop a User Interface screen [1]: (a) Action, ActionForm classes and validation.xml; (b) Service interface and implementation class; (c) DAO interface and implementation class; (d) Dependency management between all of the above.

Web Layer

The developed application uses the Struts framework concepts and JavaScript to implement presentation concerns. When using Struts framework for development, at first we setup the Action Servlet in web.xml; then we setup configuration, action mappings, form beans and local forwards in the struts-config.xml; and at last we setup validation rules in validation.xml.

There are two types of validations that are required: data format validation and business logic validation. Data format validations are best done in the presentation layer, while business logic validations are best done in the Service layer. Business logic validation errors, which occur in the service layer, should be handled by throwing custom exceptions.

The developed application uses the Spring framework to maintain dependencies between code artifacts in applications. Some of these dependencies (for example between Action class and ActionForm) are configured in “struts-config.xml”, while some others (for example between Service and DAO) are configured in Spring application context files (applicationContext.xml).

Integration Layer

Integration layer is used to integrate with the external resources such as databases. Access to databases using JDBC is encapsulated in DAO. The developed application supports the use of direct JDBC calls to access relational databases. The application

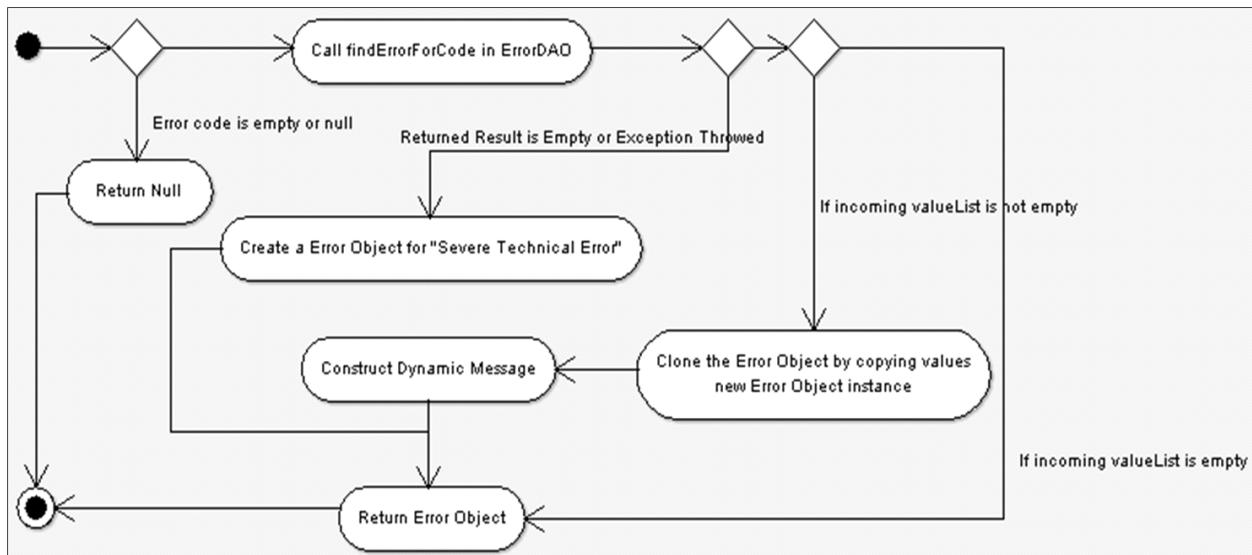
uses Spring framework’s template classes: JdbcTemplate [1]. When using direct JDBC to access relational databases, it is recommended that the application’s DAOs extend from Spring framework’s JdbcDaoSupport. The JdbcTemplate class manages resources used in accessing databases (for example a PreparedStatement). The developed application inserts the data source into DAOs using application configuration files.

Business logic was declared as interfaces. All service implementations implement one or more business interfaces. It is recommended that the service layer throws custom business exceptions when there are business rule validation errors. The developed application adopts a declarative transaction management approach based on the Spring framework [7]. This is implemented using Aspect-Oriented Programming (AOP). The testable functions of the application were developed based on the JUnit Framework [6].

EXCEPTION HANDLING CONCEPTS

Software applications should properly handle errors that are encountered. It is the application’s responsibility to properly identify the reason for an error that it encountered and to propagate the meaningful error message to the end user, so that the appropriate action can be taken to fix the error.

Exceptions are objects that store information about the occurrence of an unusual or error condition. There are two types of exceptions, *checked* and *unchecked* in Java [1]. The *checked* exception is handled by the programmer, and the *unchecked* exception may occur anywhere in the application and known as a run time exception [1]. This article explains how the *checked* and *unchecked* exceptions are handled in the developed J2EE Web-based application [9]. User defined exceptions were created for the *checked* exceptions and are handled properly in the application. *Unchecked* exceptions are handled at the point where they occur and are carried out to the controlling layer, where this exception is wrapped in the user defined exception. The exception handling has been extended to log the exceptions raised in the application to the log files. These log files are used to debug the errors. In the developed application the technical exceptions are logged in the log file and also converted into a meaningful message, and displayed to the end user.



Error table is used to store error codes and respective meaningful error messages [9]. In the application, whenever any checked exception occurs, it is wrapped into user defined exceptions and based on the type of the exception; the error code will be set in the user defined exception class. This error code will be used to show the meaningful error message to the user [9]. These techniques provides good maintainability to the application.

The scope of Exception Handler component

1. On any exception in Services, Exception Handler returns exception details with exception code to the caller.
2. When the caller invokes Error Handler component with error messages then:
 - a. Get the error message as mentioned above.
 - b. Wrap the exception to appropriate Service exception and throw to the client.
3. Collect all the exceptions and get the user-friendly message from the error table with the help of Error DAO based on the exception code available in the exception object.
4. The external application needs to handle the exceptions thrown by the Services.
5. At the controlling layer, log the exception and its stack trace will be logged to log file using the Log4j component.

CONCLUSION

The paper presented the results of the developed project created for an insurance company. The

project was aimed at developing a web based system, to support the management of information for a claim processing system. The system supports, through a relational database and a web server. The scalable architecture runs on a variety of configurations.

The architecture is fully Web based and the standard client requires only the availability of a browser. The author has presented various concepts behind the developed Information System. Some important architectural topics and technologies were addressed. The information is intended to help developers build their own Information systems.

Many organizations all over the world increasingly use Web-based Information Systems for the implementation of their user interface. Real-time Web-based access to enterprise software applications has become a critical part of many systems. Intensive technological change in hardware and networking software [10] has provided more choices than it had in the past [11]. Therefore, the rational selection and development of web-based applications is of increasing importance for the whole area of health insurance and its numerous applications.

REFERENCES

1. Boranbayev A.S. Defining methodologies for developing J2EE web-based information systems, Nonlinear Analysis (2009), doi: 10.1016/j.na.2009.02.002
2. Sun's Java Tutorial. Lesson: Exceptions. Retrieved April 3, 2009 from <http://java.sun.com/docs/books/tutorial/essential/exceptions/index.html>.
3. Boranbayev A.S. Reference Architecture for Web Applications, Reports of the National Academy of Science of the Republic of Kazakhstan, 2007, №5, 18-26.

4. The Spring Framework official website. Retrieved December 5, 2009 from <http://www.springframework.org/>
5. Martin Fowler discusses details of the dependency injection pattern and how Spring injects dependencies: <http://www.martinfowler.com/>
6. JUnit framework. Retrieved June 5, 2008 from <http://www.junit.org/>
7. Spring Framework official website - Chapter 9, Transaction management: <http://static.springframework.org/spring/docs/2.0.x/reference/transaction.html>
8. Boranbayev A.S. Optimal Methods for Java Web Services, *News of the National Academy of Science of the Republic of Kazakhstan*, №5, 2007, 38-43.
9. Boranbayev A. S. (April 23-26, 2009). Designing and developing exception handling in the modern custom web applications. the iabpad conference proceedings, the international academy of business and public administration disciplines (iabpad) conference; dallas, texas; volume 6, number 2, 1217-1226.
10. Hritonenko N. and Yatsenko Yu. Creative destruction of computing systems: Analysis and modeling, *Journal of Supercomputing*, **38**(2006), 143-154.

11. Yatsenko Yu. and Hritonenko N. Network economics and optimal replacement of age-structured IT capital, *Mathematical Methods of Operations Research*, **65**(2007), 483-497.

Резюме

Макаланың мақсаты Веб ақпараттық жүйені жасайтын және имплементтейтін әдісті суреттеп көрсету. Бұл макалада келтірілген ақпаратты жүйені жасайтын әдіс Java технологиясына сүйенеді.

Резюме

Цель статьи состоит в том, чтобы описать метод, по которой была разработана и имплементирована Веб информационная система. Метод разработки информационной системы, обсуждаемый в этой статье, основан на технологии Java.

Казахский университет технологий и бизнеса
г. Астана

Поступила 18.05.09 г.

UDC 681.3

A. S. BORANBAYEV

SOFTWARE MANAGEMENT USING CONCURRENT VERSIONS SYSTEM IN THE PROCESS OF DEVELOPMENT OF INFORMATION SYSTEMS

(Represented by academician of NAS of the RK M.O. Otelbayev)

This article discusses some of the problems that arise during the development and maintenance of large software applications in a distributed workgroup. The article specifies certain guidelines to follow while using CVS for management of software development process.

INTRODUCTION

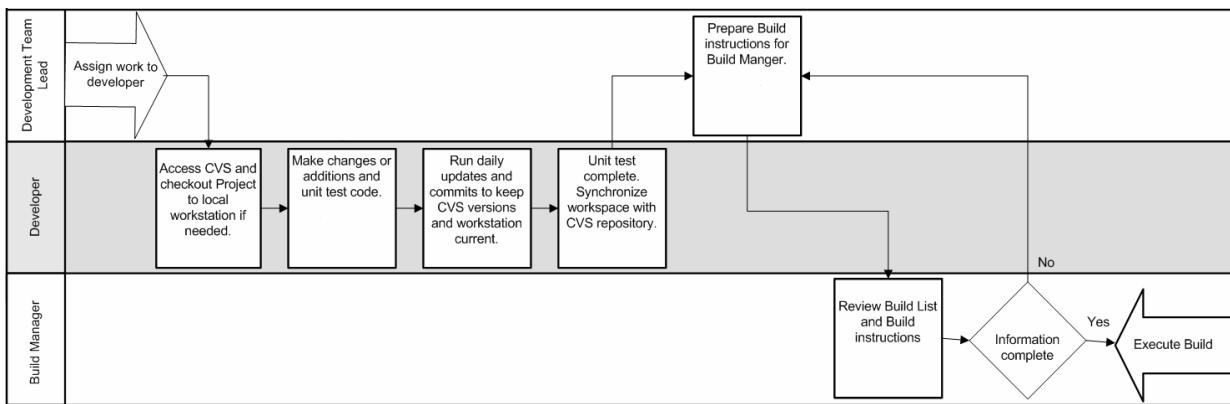
The development of software programs by groups of people is often done using version control systems (VCSs) [1]. Today these tools play an important role in software configuration management [2]. In the beginning of the project development, our team had problems with collaborative software development. To overcome some of these problems, the team decided to integrate CVS (Concurrent Versions System) into our development process [3]. This article presents some guidelines for using CVS [3] during the development of Information Systems, and discusses their effectiveness based on the real life experiences. Some tasks are being presented, so each developer may perform during a working session

in order to interface with the CVS repository in a shared project development environment.

CVS is an open-source version control system [4]. It supports the storage of source code. CVS enables multiple developers to work simultaneously on a given project, whether editing separate files or working in concert on the same file, without loss of data. Each developer works on their own local copy (sandbox) of the project. The changes they make are merged together (if needed) and returned to the master repository as a new version.

DEVELOPMENT FLOW USING CVS

While developers are working on the same content, CVS allows keeping a history of changes and allows developers to undo changes if necessary.



If two developers make changes to the same part of the content, the system can notify them of the conflict during the synchronization process. CVS usually has a client/server architecture [4]. Below are some important terms related to CVS [5]:

- **Repository.** This is where all the code, along with the versioning meta-data, is stored.

- **Version** - identifies the version of a file.

- **Branch.** Very often it is required to split the content into different “branches”. The same code is duplicated in the repository, and changes are made to each of them separately. For example, several programmers are working on a program. One of them may need to implement new features that will impact the program. This can be done in a new branch, so it will not affect the work of other developers. In the mean time the other developers will work on the “main” branch. Later it is possible to put changes from one branch into another.

- **Merging.** When developers are done making changes to the code, the different copies of the code eventually will need to be merged and turned into one. The developer needs to identify and resolve conflicts between the different versions. Very often if two developers make changes to the same file, but in different places, then both changes can be applied, one at a time.

The following is a high-level flow diagram (“A day in the life”) of the process that is followed by Project Development in relationship to version management using the CVS repository. The diagram is expanded to show the touch points needed for the Build Manager, Developers and the Team Lead, to present an example picture of the development process in the open development environments.

USING CVS WITH RAD

Many organizations nowadays use the Rational Application Development (RAD) tool for WebSphere

for development purposes []. It is critical that the developer have a valid Unix ID on the server, where the CVS master repository is located. It is also critical that the developer has requested and installed a copy of the RAD development tool on their local workstation. Once the access is granted the developer is able to access CVS from RAD.

Expanding a location in the CVS Repository view reveals branches and versions. The main integration branch usually is called *HEAD*, and it holds the Project’s current development state. The developer can expand the *HEAD* branch to view the projects in the CVS Repository.

Working with a Shared Project

The purpose of using CVS is to allow multiple developers to work as a team on the same Project. For our project, the hierarchy of a Project was created before the development began. The project repository can be shared by each Project developer using CVS. A developer usually begins their work by adding the selected project to their local workspace.

Once a developer has checked-out the latest version Project artifacts from the repository to their own workspace, they can begin to work on specific components. For example, the developer can start by expanding down through the directory structure and locate a module to be changed. The important thing to remember is that no component can be deleted from the *HEAD* or Release branches without an approved Change Request.

DAILY BEST PRACTICES

Changes and updates are always ongoing throughout the software project. The key to working smoothly is keeping the individual workstation Sandbox synchronized with the CVS repository and

vice-versa [6]. Since developers make changes often, they are required to commit their changes to the repository on a frequent basis and refresh their copies by retrieving the changes made by their teammates [6]. The CVS Repository allows for a description of the changes made for each commit. The developer MUST make meaningful comments that specify the change made, function affected, Change Request (CR) or Defect addressed, etc.

Updating Sandbox Repositories on the Local Workstation

1. Each developer must update their workstation version of the Project at the beginning of every work day. It would be wise to update at midday and also immediately after any major Project activity. Frequently updating the local workspace reduces the risk of major merge processing later.

2. Careful developers usually ensure the clean compile of any component before they commit when using CVS, thereby avoiding any gratuitous break in the build. However, by committing and updating often, and executing builds for all changes, it is simple to use CVS to identify the latest code change and work within the team to resolve a conflict.

Synchronizing with the Repository

The developer can select the necessary project, then select Team > Synchronize with Repository. Then the developer can compare the project with the repository, and the differences are usually displayed in the Synchronize view. This view allows developers to update resources in the Workbench with newer content from the repository, commit resources from the Workbench to the repository, and resolve conflicts that may occur in the process.

Developers can add any new components to version control by selecting the Project in the Synchronize view, right-clicking and then selecting Commit.

Unit Testing

Unit testing is usually done in the workspace of each developer [7]. Once a developer completes their unit test, it is important to share the updates with their team by synchronizing any changes they have made to the repository. It is critical that all updates be made before turning instructions over to the Build Manager to create an integrated application build for the deployment. The Development Team

Lead coordinates this process, notifying developers of the planned build and the deadline for updating CVS prior to handing the build instructions to the Build Manager.

BUILDS

After successful unit testing by each part of the development team, the Development Lead coordinates an application build for the first level of Application String Test.

Creating the Build Instructions

The Development Lead notifies the team of the deadline for synchronizing all changes to CVS. The Development Lead creates the build list and instructions for the build and communicates them to the Build Manager.

Creating the Unprotected String Test Build

The Build Manager always retrieves the components from the CVS Repository just prior to executing the build. No components are taken from local workspaces.

If there are any problems with the build, the Build Manager works with the Development Lead to resolve the errors. During String Test, errors may indicate that components must be further modified. The developer then reiterates the process steps in this document for editing, adding, or deleting components from both their workspace and the CVS repository until a working version of the application is built.

Moving to Open System Integration Testing (SIT)

When the development is determined to be ready to move to Open SIT test, the Development Lead instructs the Build Manager to tag the components that comprise the SIT build. The CM Focal must ensure that the correct Configuration Items have been documented as captured for the Open SIT Test Environment baseline at this time.

Build for Open SIT and Deploy

The Build Manager tags the component in CVS for the SIT build. Once the build is successful, the QA/Test team is contacted and asked to accept the deployment of the application code. Upon receipt of

that approval, the Build Manager deploys the application to the Open SIT Test Environment.

CONCLUSION

At the end I would like to say that in order to see the benefit to using software configuration management tools, the tools must be applied in conjunction with good software design principles. This article described the design process our team followed, and outlined how we incorporated CVS into the process. CVS can play an important role in the successful development of Information systems [8].

After observing how our team members used CVS, the productivity benefits were noticeable. The CVS conflict resolution features were always successful in integrating developer changes into the repository. Adopting CVS lead to improved coordination between team members. Before we introduced CVS, team members were personally notifying other team members of any development progress. The developers had to email other team members, or chase them down over the phone or in person in a timely manner. Even when the team members took the time to do it, it wasn't clear what changes had been made and how the changes would impact others. With the help of CVS a team member can know what code changes have been committed since the last development session.

REFERENCES

1. Eric Steven Raymond. The Art of Unix Programming. Version-Control Systems. Chapter 15. Tools. Retrieved May 7, 2009 from: <http://www.faqs.org/docs/artu/ch15s05.html>

2. *Alexis Leon*. Software Configuration Management Handbook. Artech House, 2 edition, 2004.
3. *Thomas D., Hunt A.* Pragmatic Version Control Using CVS. Pragmatic Bookshelf, 2003.
4. Introduction to CVS. Retrieved May 7, 2009 from: <http://www.nongnu.org/cvs/>
5. CVS Documentation XXX Specific Details XXX
6. *Mikkelsen T., Pherigo S.* Practical Software Configuration Management, The Latenight Developer's Handbook. Prentice Hall, 1997.
7. *Boranbayev A.S.* Defining methodologies for developing J2EE web-based information systems, Nonlinear Analysis (2009), doi: 10.1016/j.na.2009.02.002
8. *Boranbayev A. S.* (April 23-26, 2009). Designing and developing exception handling in the modern custom web applications. the iabpad conference proceedings, the international academy of business and public administration disciplines (iabpad) conference; dallas, texas; volume 6, number 2, 1217-1226.

Резюме

В статье обсуждаются некоторые проблемы, которые возникают во время разработки и обслуживания больших распределенных информационных систем. Предлагаются методы использования системы параллельных версий для управления процессом разработки информационных систем.

Резюме

Көлемді таратылған ақпараттық жүйелерді құрганда және оларды өндегендеге байкалатын кейбір проблемалар талқыланады. Ақпараттық жүйелерді құру процесін басқару үшін параллельді нұскалар жүйесін қолдану өдістері ұсынылады.

Казахский университет технологий и бизнеса
г. Астана

Поступила 18.05.09 г.

УДК 517.977.55

3.Н. МУРЗАБЕКОВ

КОНСТРУКТИВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ ЛИНЕЙНЫХ НЕСТАЦИОНАРНЫХ УПРАВЛЯЕМЫХ СИСТЕМ ПРИ НАЛИЧИИ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ И ОГРАНИЧЕНИЙ НА УПРАВЛЕНИЯ

(Представлено академиком НАН РК Н.К. Блиевым)

Рассматривается задача оптимального управления для нестационарных систем с закрепленными концами траекторий. Разработан новый метод построения синтезирующего управления с учетом ограничений на управления.

Введение. В настоящее время широкий размах приобрело применение математических методов в оперативной деятельности, в планировании народного хозяйства и управлении технологическими процессами.

Для многих задач оптимального управления используются две различные постановки. Согласно одной из них оптимальное управление ищется как функция времени и начального состояния системы. Другая постановка задачи синтеза предполагает поиск оптимального управления в виде некоторой функции от текущего состояния управляемой системы и времени.

Основные идеи решения задач оптимального управления в первой постановке связаны с принципом максимума [1] (решение сводится к соответствующей краевой задаче), а решение этой же задачи при использовании второй постановки связано с динамическим программированием (задача сводится к решению уравнения Беллмана [2]). В обзорной статье [3] рассматриваются задачи достижимости и целевого управления для систем, описываемых в основном обыкновенными дифференциальными уравнениями, с ограничениями на управления и координаты, в условиях полной информации и отсутствия возмущений.

В данной работе рассматривается постановка задачи оптимального управления, когда задаются оба граничных условия для управляемой системы. Предлагается новый подход построения синтезирующего управления, основанного на принципе обратной связи с учетом ограничений на управления. Задача оптимального управления системами с закрепленными концами траекторий возникает, например, при исследовании динамики

робототехнических и электроэнергетических систем, химических и ядерных реакторов. При этом требуется оптимальным образом перевести систему из некоторого начального состояния в желаемое конечное состояние за заданный интервал времени. В простейшем случае динамика исследуемых систем может быть описана линейными дифференциальными уравнениями, а критерием качества управления может служить квадратичный функционал.

Постановка задачи. Рассмотрим управляемую линейную нестационарную систему, описываемую векторным дифференциальным уравнением

$$\dot{x} = A(t)x + B(t)u + f(t), \quad t \in (t_0, T), \quad (1)$$

$$x(t_0) = x_0, \quad x(T) = x_1, \quad (2)$$

$$u(t) \in U(t) = \{u \mid \alpha(t) \leq u(t) \leq \beta(t), t \in (t_0, T); \\ \alpha, \beta \in C[t_0, T]\} \subset L_2((t_0, T), R_m), \quad (3)$$

где $x(t)$ – вектор состояния объекта управления размерности $n \times 1$; $u = u(t)$ – вектор управляющих воздействий размерности $m \times 1$; $f(t)$ – векторная функция размерности $n \times 1$, задана, вещественна, непрерывна и ограничена при $t \in [t_0, T]$; $A(t)$, $B(t)$ – матрицы размерности $n \times n$, $n \times m$ соответственно, заданы, непрерывны и ограничены; x_0 , x_1 – заданные векторы.

Будем предполагать, что система (1) управляема, т.е. выполняется следующее условие

$$G(t_0, T) = \int_{t_0}^T \Phi(t_0, t)B(t)B^*(t)\Phi^*(t_0, t)dt > 0, \quad (4)$$

где $\Phi(t, \tau) = \theta(t)\theta^{-1}(\tau)$, а $\theta(t)$ – фундаментальная матрица решений системы, описываемой одно-

родным дифференциальным уравнением

$$\dot{z} = A(t)z.$$

Обозначим через $\Delta(t_0, T, x_0, x_1)$ множество всех допустимых управлений, удовлетворяющих условию $u(t) \in U(t)$, $t \in [t_0, T]$, и соответствующих траекторий $x(t, u)$ системы (1), определенных на отрезке $t_0 < t < T$, т.е. множество всех допустимых пар $\{x(t), u(t)\}$:

$$\begin{aligned} \Delta(t_0, T, x_0, x_1) = & \{(x, u) : u(t) \in U(t), \\ & \dot{x}(t) = A(t)x(t) + B(t)u(t) + f(t), \\ & t_0 < t < T, \quad x(t_0) = x_0, \quad x(T) = x_1\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Пусть на множестве (5) задан функционал

$$J(x, u) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^T [x^* Q(t)x + u^* R(t)u] dt, \quad (6)$$

где $Q(t)$ и $R(t)$ - заданные симметричные непрерывные и ограниченные матрицы размерности $n \times n$ и $m \times m$ соответственно, удовлетворяющие условию: $Q(t) \geq 0$ (неотрицательно определенная), $R(t) > 0$ (равномерно положительно определенная).

Ставится задача. Найти синтезирующее управление $\tilde{u}(x, t, x_0, t_0, T)$ такое, что соответствующая ему пара $(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t)) \in \Delta(t_0, T, x_0, x_1)$ и доставляет минимальное значение функционалу (6).

Для решения поставленной задачи образуем вспомогательный функционал с применением множителей Лагранжа специального вида. Для этого прибавим к выражению для функционала (6) систему дифференциальных уравнений (1) с множителем $\lambda = K(t)x + W^{-1}(t, T)(x - y(t))$ и дополнительно следующее выражение $\lambda_1^*(\alpha - u) + \lambda_2^*(u - \beta)$, где $\lambda_1 \geq 0$, $\lambda_2 \geq 0$.

В результате получим следующий функционал:

$$\begin{aligned} L(x, u) = & \int_{t_0}^T [\frac{1}{2} x^* Q(t)x + \frac{1}{2} u^* R(t)u + \\ & + (K(t)x + W^{-1}(t, T)(x - y(t)))^* (A(t)x + \\ & + B(t)u + f(t) - \dot{x}) + \lambda_1^*(x, t)(\alpha(t) - u) + \\ & + \lambda_2^*(x, t)(u - \beta(t))] dt, \end{aligned} \quad (7)$$

где $y(t)$ - вектор размерности $n \times 1$; $K(t)$, $W(t, T)$ - симметричные положительно определенные матрицы размерности $n \times n$.

Множитель $\lambda = K(t)x + W^{-1}(t, T)(x - y(t))$ снимает ограничения, налагаемые на допустимые пары $\{x(t), u(t)\}$ в виде системы дифференциальных уравнений (1) и граничных условий (2), а функции $\{\lambda_1(x, t), \lambda_2(x, t)\}$ - соответствующие ограничения, налагаемые на управления (3).

Для рассматриваемой задачи метод множителей Лагранжа (принцип освобождения от связей) состоит в следующем: исходная задача оптимального управления с ограничениями сводится к другой задаче, но уже без ограничений. При этом новая задача формулируется так, чтобы ее решение являлось бы решением первоначальной задачи.

Введем в рассмотрение следующие функции:

$$\begin{aligned} V(x, t) = & \frac{1}{2} x^* K(t)x - \frac{1}{2} x(T)^* K(T)x(T) + \\ & + \frac{1}{2} (x - y(t))^* W^{-1}(t, T)(x - y(t)) + \\ & + \int_t^T [\frac{1}{2} (\lambda_1(x(\tau), \tau) - \\ & - \lambda_2(x(\tau), \tau))^* R^{-1}(\tau)(\lambda_1(x(\tau), \tau) - \lambda_2(x(\tau), \tau)) + \\ & + \lambda_1^*(x(\tau), \tau)(u - \alpha(\tau)) + \lambda_2^*(x(\tau), \tau)(\beta(\tau) - u) + \\ & + y^*(\tau)K(\tau)f(\tau)] d\tau. \end{aligned} \quad (8)$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \lambda = K(t)x + W^{-1}(t, T)(x - y(t)),$$

$$M(x, u, t) = \frac{1}{2} x^* Q(t)x + \frac{1}{2} u^* R(t)u + \frac{dV(x, t)}{dt}. \quad (9)$$

Тогда справедливо следующее представление функционала (7)

$$L(x, u) = V(x_0, t_0) + \int_{t_0}^T M(x, u, t) dt. \quad (10)$$

Решение задачи. Алгоритм решения задачи реализуется способом задания матриц $K(t), W(t, T)$ и функций $\{y(t), \lambda_1(x, t), \lambda_2(x, t)\}$, которые отвечают тому, чтобы пара $(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t))$, была бы допустимой, т.е. $(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t)) \in \Delta(t_0, T, x_0, x_1)$.

Производим выбор $(K, W, y, \lambda_1, \lambda_2)$ таким образом, чтобы при каждом фиксированном $t \in (t_0, T)$ функция $M(x, u, t)$ достигала наименьшего значения на паре (\tilde{x}, \tilde{u}) . Если при этом

функция \tilde{x} удовлетворяет дифференциальному уравнению (1) при управлении $\tilde{u} = u(x, t, x_0, t_0, T)$ с условиями (2), (3), то такая пара $(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t))$ будет искомым решением поставленной задачи.

Методами дифференциального исчисления из (10) находим управление, доставляющее минимальное значение функции $M(x, u, t)$ в следующем виде:

$$\begin{aligned}\tilde{u} = & -R^{-1}(t)[B^*(t)(K(t)x + \\ & + W^{-1}(t, T)(x - y(t))) - \lambda_1(x, t) + \lambda_2(x, t)].\end{aligned}$$

Обозначим $\varphi(x, t) = -R^{-1}(t)[- \lambda_1(x, t) + \lambda_2(x, t)]$, тогда синтезирующее управление примет вид:

$$\tilde{u} = -R^{-1}(t)B^*(t)(K(t)x + W^{-1}(x - y(t))) + \varphi(x, t). \quad (11)$$

Множители $\lambda_1 \geq 0$, $\lambda_2 \geq 0$, заданы таким образом, чтобы выполнялись условия:

$$\lambda_1^*(x, t)(\alpha(t) - \tilde{u}) = 0, \lambda_2^*(x, t)(\tilde{u} - \beta(t)) = 0. \quad (12)$$

Для этого осуществлен выбор λ_1 , λ_2 , φ в следующем виде:

$$\begin{aligned}\lambda_1(x, t) = & -R(t)\inf(0, w(x, t) - \alpha(t)), \\ \lambda_2(x, t) = & -R(t)\inf(0, \beta(t) - w(x, t)), \\ \varphi(x, t) = & -\inf(0, w(x, t) - \\ & - \alpha(t)) + \inf(0, \beta(t) - w(x, t)),\end{aligned} \quad (13)$$

где обозначено

$$w(x, t) = -R^{-1}(t)B^*(t)(K(t)x + W^{-1}(x - y(t))). \quad (15)$$

Матрицы $K(t)$, $W(t, T)$, $t \in [t_0, T]$, функция $y(t)$ заданы следующим образом:

$$\begin{aligned}\dot{K} + KA(t) + A^*(t)K - KB(t)R^{-1}(t)B^*(t)K + \\ + Q(t) = 0, \quad K(t_0) = K_0,\end{aligned} \quad (16)$$

$$\dot{W} = WA_1^*(t) + A_1(t)W - B_1(t), \quad W(T, T) = 0, \quad (17)$$

$$\begin{aligned}\dot{y} = A_1(t)y + (E + W(t, T)K(t))f(t), \quad t \in [t_0, T], \\ y(T) = x_1,\end{aligned} \quad (18)$$

где обозначено

$$\begin{aligned}A_1(t) = & A(t) - B(t)R^{-1}(t)B^*(t)K(t), \\ B_1(t) = & B(t)R^{-1}(t)B^*(t).\end{aligned} \quad (19)$$

Пусть существуют решения уравнений (16)–(18) и выполнены условия (12), тогда имеем значение функции

$$M(\tilde{x}, \tilde{u}, t) = 0, \quad (20)$$

а дифференциальные уравнения, определяющие закон движения системы (1) с управлением $\tilde{u}(x, t) = w(x, t) + \varphi(x, t)$, представим в следующем виде:

$$\begin{aligned}\dot{x} = & A_1(t)x - B_1(t)W^{-1}(t, T)(x - y(t)) + \\ & + f(t) + B(t)\varphi(x, t),\end{aligned}$$

$$x(t_0) = x_0, \quad (21)$$

Используя, решения дифференциальных уравнений (18) и (21), аналогично работе [4] получаем, что состояние системы (21), соответствующее управлению (11), в конечный момент времени будет равно $x(T) = x_1$.

Действительно, выполнение краевых условий (2) следует из следующего соотношения

$$\tilde{x}(t) = W(t, T)q(t) + y(t), \quad t \in [t_0, T], \quad (22)$$

где функция $q(t)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\begin{aligned}\dot{q} = & -A_1^*(t)q - K(t)f(t) + W^{-1}(t, T)B(t)\varphi(x, t), \\ q(t_0) = & W^{-1}(t_0, T)[x(t_0) - y(t_0)].\end{aligned} \quad (23)$$

Теперь, получаем минимальное значение функционала (10) в виде:

$$\begin{aligned}L(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t)) = & \frac{1}{2}x_0^*K(t_0)x_0 + \\ & + \frac{1}{2}(x_0 - y_0)^*W^{-1}(t_0, T)(x_0 - y_0) - \\ & - \frac{1}{2}x_1^*K(T)x_1 + \int_{t_0}^T \left[\frac{1}{2}\varphi^*(\tilde{x}, t)R(t)\varphi(\tilde{x}, t) + \right. \\ & \left. + y^*(t)K(t)f(t) \right] dt.\end{aligned} \quad (24)$$

Результаты установленные для поставленной задачи сформулируем в виде следующего утверждения.

Теорема. Для оптимальности пары $(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t)) \in \Delta(t_0, T, x_0, x_1)$ в задаче (1)–(3), (6), необходимо и достаточно, чтобы:

1) $\tilde{x}(t)$ удовлетворяла дифференциальному уравнению

$$\begin{aligned}\dot{x} = & A_1(t)x - B_1(t)W^{-1}(t, T)(x - y(t)) + \\ & + f(t) + B(t)\varphi(x, t)\end{aligned} \quad (25)$$

с условиями $x(t_0) = x_0$, $x(T) = x_1$;

2) управление $\tilde{u}(t)$ определяется следующим образом:

$$\begin{aligned}\tilde{u}(t) = u(\tilde{x}(t), t, x_0, t_0, T) &= -R^{-1}(t)B^*(t)(K(t)\tilde{x}(t) + \\ &+ W^{-1}(t, T)(\tilde{x}(t) - y(t))) + \varphi(\tilde{x}(t), t),\end{aligned}\quad (26)$$

где матрицы $K(t), W(t, T)$ являются решениями уравнений (16) и (17), функция $y(t)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению (18), а функция $\varphi(x, t)$ определена в виде (14).

Доказательство. Необходимость следует из выражений (11)-(18). Достаточность. Пусть для пары $(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t))$ выполнены условия теоремы. Тогда для фиксированного $t \in [t_0, T]$ функция $M(\tilde{x}, \tilde{u}, t)$ достигает значения (20).

Пусть

$(x_k(t), u_k(t)) \in \Delta(t_0, T, x_0, x_1)$, $t \in [t_0, T]$ - произвольная допустимая пара, для которой справедлива формула

$$L(x_k, u_k) = V(x_k, t_0) + \int_{t_0}^T M(x_k, u_k, \tau) d\tau, \quad (27)$$

где обозначено

$$\begin{aligned}V(x_k, t) &= \frac{1}{2} x_k^* K(t) x_k - \frac{1}{2} x_k^* (T) K(T) x_k (T) + \\ &+ \frac{1}{2} (x_k - y(t))^* W^{-1}(t, T) (x_k - y(t)) + \\ &+ \int_{t_0}^T [\frac{1}{2} (\lambda_1(x_k(\tau), \tau) - \lambda_2(x_k(\tau), \tau))^* R^{-1}(\tau) (\lambda_1(x_k(\tau), \tau) - \\ &- \lambda_2(x_k(\tau), \tau)) + \lambda_1^*(x_k(\tau), \tau) (u_k - \alpha(\tau)) + \\ &+ \lambda_2^*(x_k(\tau), \tau) (\beta(\tau) - u_k) + y^*(\tau) K(\tau) f(\tau)] d\tau.\end{aligned}\quad (28)$$

$$\begin{aligned}M(x_k, u_k, t) &= \frac{1}{2} x_k^* Q(t) x_k + \\ &+ \frac{1}{2} u_k^* R(t) u_k + \frac{dV(x_k, t)}{dt}.\end{aligned}\quad (29)$$

Тогда имеем из (24) и (27)

$$\begin{aligned}L(x_k, u_k) - L(\tilde{x}, \tilde{u}) &= V(x_k, t_0) - V(\tilde{x}, t_0) + \\ &+ \int_{t_0}^T [M(x_k, u_k, \tau) - M(\tilde{x}, \tilde{u}, \tau)] d\tau.\end{aligned}\quad (30)$$

Теперь получаем с учетом (8), (20) и (28), (29)

$$L(x_k(t), u_k(t)) - L(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t)) =$$

$$\begin{aligned}&= \int_{t_0}^T \left\{ \frac{1}{2} [u_k + R^{-1} B^* ((K + W^{-1}) x_k - W^{-1} y)]^* R [u_k + \right. \\ &\quad \left. + R^{-1} B^* ((K + W^{-1}) x_k - W^{-1} y)] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \varphi^*(\tilde{x}, t) R \varphi(\tilde{x}, t) \right\} dt \geq 0.\end{aligned}\quad (31)$$

Здесь учтено, что

$$\begin{aligned}\varphi(\tilde{x}, t) &= -\inf(0, w(\tilde{x}, t) - \alpha(t)) + \inf(0, \beta(t) - w(\tilde{x}, t)) \\ w(\tilde{x}, t) &= -R^{-1}(t) B^*(t) [(K(t) + \\ &+ W^{-1}(t, T)) \tilde{x}(t) - W^{-1}(t, T) y(t)].\end{aligned}\quad (32)$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned}J(x_k, u_k) - J(\tilde{x}, \tilde{u}) &= \\ &= \int_{t_0}^T \left\{ \frac{1}{2} [u_k + R^{-1}(t) B^*(t) ((K(t) + W^{-1}(t, T)) x_k - \right. \\ &\quad \left. - W^{-1}(t, T) y(t))]^* R(t) [u_k + \right. \\ &\quad \left. + R^{-1}(t) B^*(t) ((K(t) + W^{-1}(t, T)) x_k - \right. \\ &\quad \left. - W^{-1}(t, T) y(t))] - \frac{1}{2} \varphi^*(\tilde{x}, t) R(t) \varphi(\tilde{x}, t) \right\} dt \geq 0.\end{aligned}\quad (33)$$

Отсюда следует, что

$$J(\tilde{x}, \tilde{u}) = \inf\{J(x, u), (x, u) \in \Delta(t_0, T, x_0, x_1)\}. \quad (34)$$

Теорема доказана.

Резюмируя полученные результаты, можно сделать следующие выводы:

1. Предлагается новый подход построения управления, основанного на принципе обратной связи, приводящие управляемую систему в требуемое состояние за конечное время при наличии ограничений на управления.

2. Предлагаемый подход построения функции в виде (8), удовлетворяет условиям оптимальности Беллмана. Для поставленной задачи имеем:

$$\inf_{(x, u) \in \Delta} M(x, u, t) = 0, \quad (35)$$

$$M(x_k, u_k, t) = \frac{1}{2} x_k^* Q(t) x_k + \frac{1}{2} u_k^* R(t) u_k +$$

$$\frac{dV(x_k, t)}{dt} = \frac{1}{2} (u_k - u_n)^* R(t) (u_k - u_n) \geq 0, \quad (36)$$

где $(x_k, u_k) \in \Delta(t_0, T, x_0, x_1)$, $u_n = -R^{-1}(t) B^*(t) (K(t) x_k + W^{-1}(x_k - y(t))) + \varphi(x_k, t)$.

Множители заданы таким образом, чтобы выполнялись условия:

$$\lambda_1^*(x_k, t)(\alpha(t) - u_n) = 0, \lambda_2^*(x_k, t)(u_n - \beta(t)) = 0. \quad (37)$$

Для этого осуществлен выбор λ_1 , λ_2 , φ в следующем виде:

$$\begin{aligned} \lambda_1(x_k, t) &= -R(t) \inf(0, w(x_k, t) - \alpha(t)), \\ \lambda_2(x_k, t) &= -R(t) \inf(0, \beta(t) - w(x_k, t)), \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \varphi(x_k, t) &= -\inf(0, w(x_k, t) - \\ &- \alpha(t)) + \inf(0, \beta(t) - w(x_k, t)), \end{aligned} \quad (39)$$

где обозначено

$$w(x_k, t) = -R^{-1}(t)B^*(t)(K(t)x_k + W^{-1}(x_k - y(t))). \quad (40)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Понtryгин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкrelidze Р.В., Мищенко Е.Ф. Математическая теория оптимальных процессов. - М.: Наука, 1976. – 392 с.

2. Беллман Р., Калаба Р. Динамическое программирование и современная теория управления. – М.: Наука, 1968. – 446 с.

3. Куржанский А.Б. Дифференциальные уравнения в задачах синтеза управлений // Дифференциальные уравнения. – 2005. том 41, №1. – С. 12-22.

4. Мурзабеков З.Н. Оптимизация управляемых линейных нестационарных систем при наличии ограничений на управление // Вестник КазНУ. Серия математика, механика, информатика. – 2008. – №4. Специальный выпуск. С. 105– 109.

Резюме

Ұштарынан бекітілген траекториялы стационарлы емес жүйе үшін тиімді басқару есебі қарастырылады. Шектеу есебімен басқаруға синтездеу басқаруының күрүлуына жаңа әдіс өндөлген.

Summary

The aim of optimal management for constables systems with fixed ends of trajectory is considered in the article. A new method of construction of synthesizing management taking into account limitation of management is worked out.

Алматинский технологический
университет

Поступила 14.05.09 г.

УДК 621.039.531: 620.187.3

K.B. ЦАЙ

ОСОБЕННОСТИ РАДИАЦИОННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ СТАЛИ 12Х18Н10Т, ОБЛУЧЕННОЙ ДО ДОЗ 26-59СНА В РЕАКТОРЕ БН-350

(Представлена академиком НАН РК Б.Н. Мукашевым)

Методом просвечивающей электронной микроскопии исследована микроструктура стали 12Х18Н10Т – материала шестигранного чехла сборки ЦЦ-19, облученной в реакторе БН-350 до доз 26-59сна в интервале температур 330-423°С.

Развитие радиационно-индуцированных дефектов в аустенитных сталях в результате долговременного нейтронного облучения приводит к изменению их структурно-фазового состояния и физико-механических свойств [1]. Такие явления как радиационное распухание и охрупчивание сильно сокращают срок безопасной эксплуатации стальных конструкций активных зон в реакторных установках. Это актуализирует проведение детальных материаловедческих исследований влияния облучения на деградацию микроструктуры сталей.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Объектом изучения в работе являлась аустенитная сталь 12Х18Н10Т-материал шестигранного чехла тепловыделяющей сборки (ТВС) ЦЦ-19, длительное время облучавшейся в реакторе БН-350 (г.Актау) вблизи центра активной зоны (ц.а.з.). Максимальная повреждающая доза, набранная за все время эксплуатации ТВС, составила 58.9 сна при скорости повреждения 1.2×10^{-6} сна/с. Химический состав стали в состоянии поставки следующий (в вес. %): С-0.12; Cr-17.00; Ni-10.66; Ti-0.50; Si-0.34; Mn-1.67; P-0.03; S-0.01; Fe-ост. Образцы для исследования вырезались из стенки (середины грани) шестигранного чехла с пятью отметками в зависимости от расстояния от ц.а.з., которым соответствовали различные дозовые и температурные характеристики облучения (рис. 1). Для характеристизации микроструктуры облученной стали 12Х18Н10Т применялась методика просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) (электронный микроскоп JEM-100CX). Утонение ПЭМ-объектов производилось с помощью струйной электрополировки в электролите состава: 20%HClO4 + 80%C2H5OH.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Известно [1,2], что состояние дефектной микроструктуры при нейтронном облучении, прежде всего, определяется дозой и температурой облучения ($T_{обл}$). По результатам ПЭМ-исследований сталь чехла сборки ЦЦ-19 (см, например, рис.2) содержит радиационные дефекты следующих типов: вакансационные поры, дефектные петли Франка, вторичные выделения, сетку дислокаций, а также мелкие комплексы дефектов (мк-дефекты). Средние размеры \bar{d} и плотность ρ дефектов, рассчитанные из ПЭМ-снимков, приведены на рис.3 в зависимости от условий облучения. Особый интерес представляют отметки «-160», «0» и «+160мм» от ц.а.з., которым отвечают близкие значения доз 55.7, 58.9 и 55.4сна, а $T_{обл}$ изменяется в интервале 330÷370°С. Здесь наблюдается снижение плотности петель Франка в 5 раз, плотности вторичных выделений в 4 раза, появляется и интенсивно развивается вакансационная пористость. Это свидетельствует о том, что определяющим фактором формирования дефектной структуры материала сборки на участке между отметками «-160» и «+160мм» является $T_{обл}$. Данный вывод относится к вакансационным порам, вторичным выделениям и петлям. Согласно исследованиям облученных аустенитных сталей (например, [3]) данные типы дефектов вносят основной вклад в радиационное упрочнение.

В модели дисперсных барьеров [3] вклад радиационных дефектов в упрочнение стали пропорционален $\sqrt{\rho \cdot \bar{d}}$. На отметках «-160мм» и «0мм» в микроструктуре наблюдается высокое содержание вторичных выделений и петель рис.4, ρ_{tot} в материале сборки изменяется в диапазоне

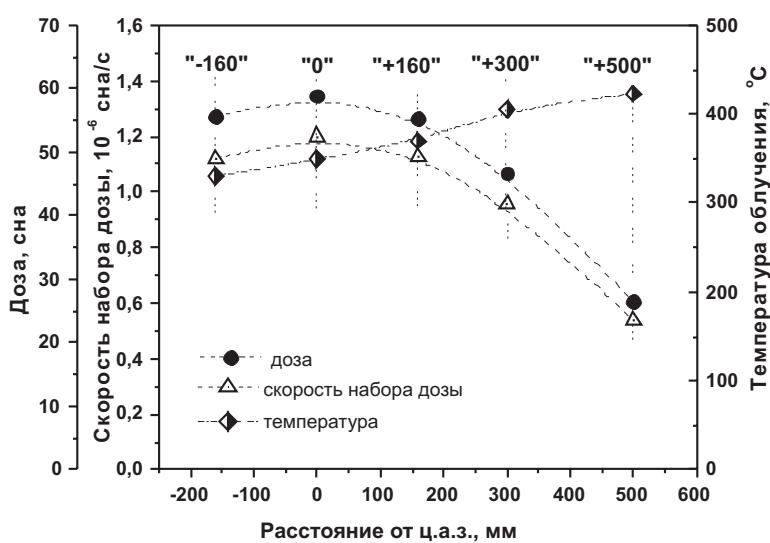
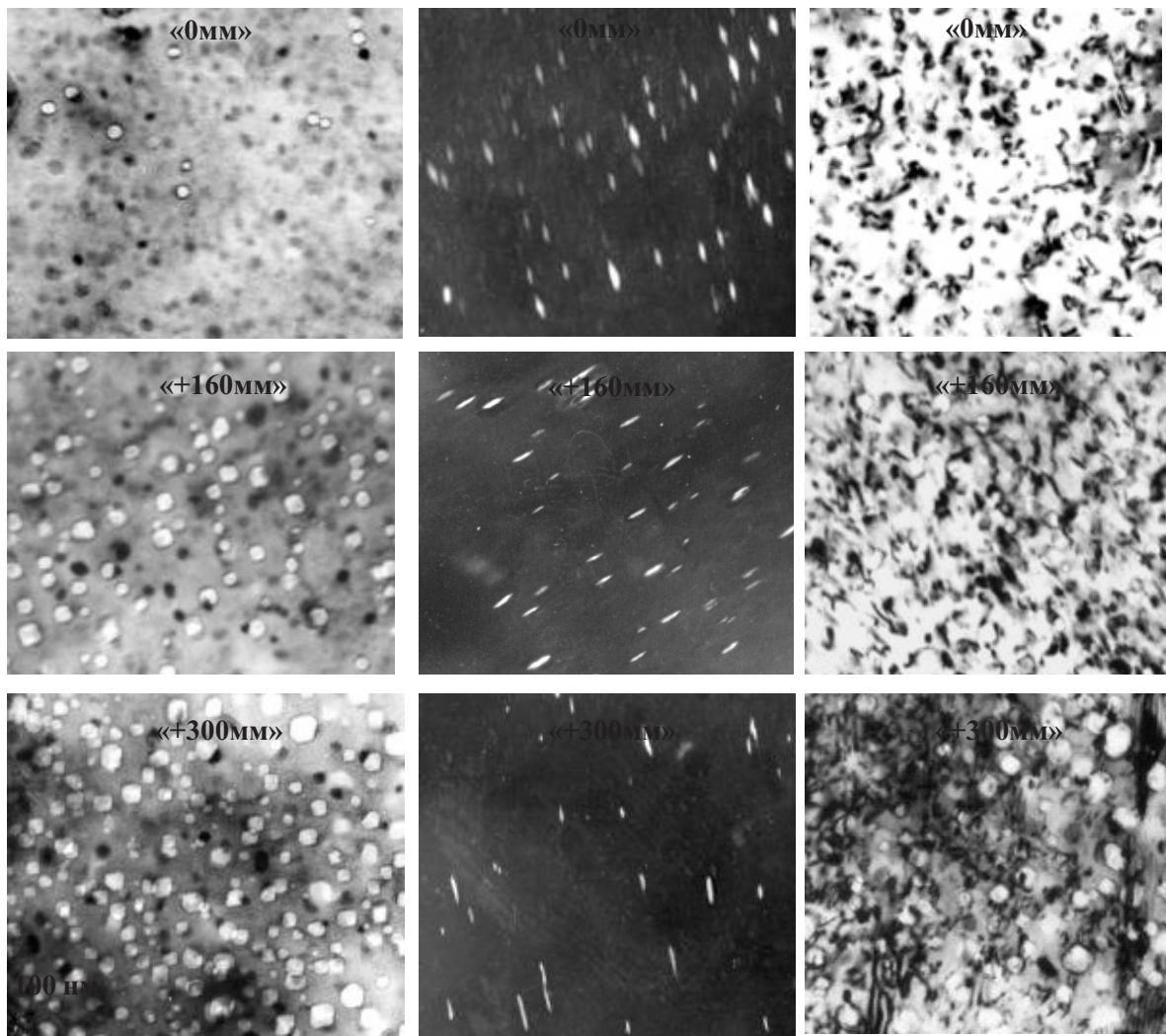


Рис.1. Параметры облучения образцов стали с 5-ти отметок ТВС ИЦ-19

Рис.2. Примеры дефектной микроструктуры на отметках <0>, <+160>, <+300>
(а - поры и выделения; б – петли Франка; в – дислокации и поры) г100000.

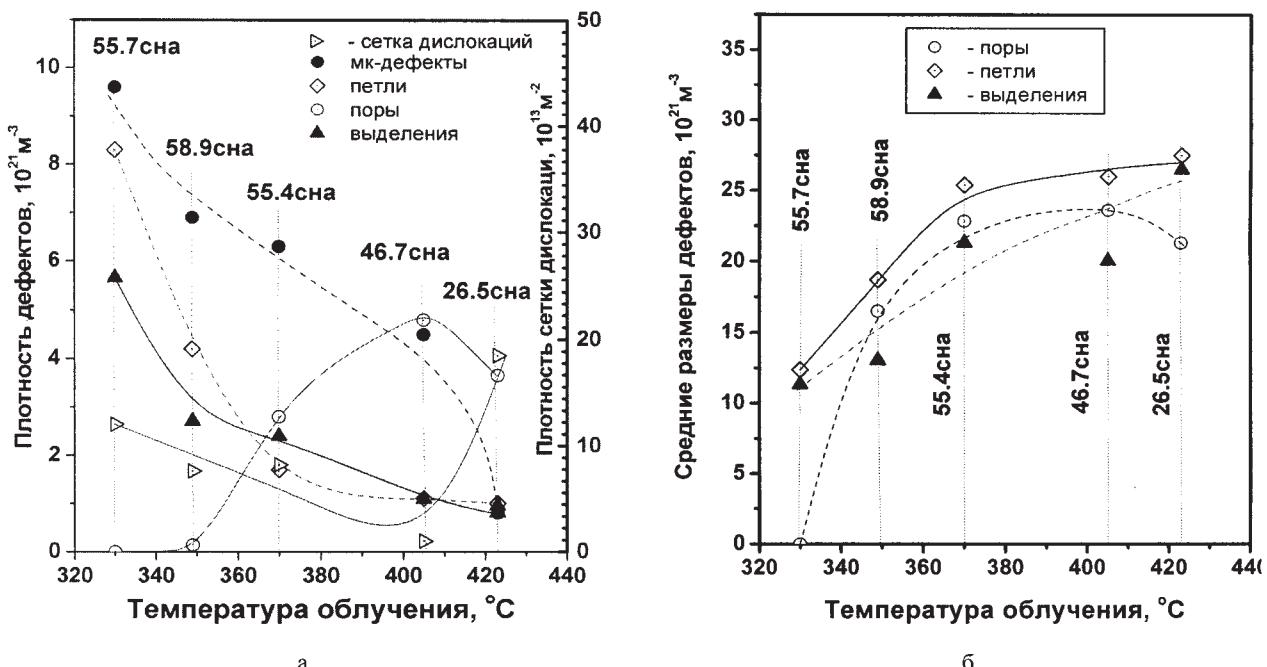


Рис.3 Изменение плотности (а) и средних размеров (б) радиационных дефектов в зависимости от температуры и дозы облучения

Начиная с «+160мм» ($T_{обл} = 370^\circ\text{C}$) и выше, содержание пор растет с ростом $T_{обл}$, а ρ выделений и петель, напротив, сильно снижается. Кроме того \bar{d} пор, петель Франка и выделений на отметках «+160мм»...«+500мм» близки к насыщению и сравнимы по величине (см. рис.3). Отсюда следует, что радиационное упрочнение стали на разных отметках по высоте сборки ЦЦ-19 обусловлено разными типами микроструктурных дефектов. На отметках «-160»...«0» (при $T_{обл} : 330 \div 349^\circ\text{C}$) за упрочнение ответственны вторичные выделения и петли Франка, тогда как на отметках «+160»...«+500» (при $T_{обл} : 370 \div 423^\circ\text{C}$) основной вклад в упрочнение вносят вакансационные поры.

Уровень вакансационного распухания оценивается по формуле $S = \sum_i \Delta V_i / V_0$ (где $\sum_i \Delta V_i$ – суммарный объем пор диаметром d_i на выбранном участке ПЭМ-изображения, а V_0 – объем необлученного материала на таком же участке). На отметке «-160мм» наблюдаются единичные поры небольшого размера, распухание близко к нулю. Распухание 0.04% зафиксировано на отметке «0мм» и возрастает по высоте сборки. Для рассмотренных образцов максимум вакансационного

распухания (4.8%) достигается на отметке «+300мм» ($T_{обл} = 405^\circ\text{C}$). При этом величины \bar{d} и ρ вакансационных пор принимают максимальные значения среди всех проб.

Разброс значений \bar{d} для вторичных выделений с ростом $T_{обл}$ (см. рис.3,б), по-видимому, связан с неоднородным фазовым составом частиц вторичных фаз на разных отметках. Расшифровка электронограмм, полученных для образцов со всех отметок показала, что в стали присутствуют, по крайней мере, два вида частиц: выделения типа МС (по составу близкие к вторичным карбидам TiC) и G-фаза [4]. В зависимости от температурно-дозовых параметров облучения соотношение количества частиц обеих фаз сильно меняется. Если на отметке «-160мм» наблюдаются только МС-карбиды, то, начиная с отметки «+160мм» и выше, обнаружена G-фаза.

Мк-дефекты с размерами 2-5 нм имеют вид черных точек на снимках в «светлом поле» и по морфологии похожи на «black dots»-дефекты. Согласно исследованиям облученных сталей [2], при температурах облучения $300 \div 400^\circ\text{C}$ содержание black dots должно существенно уменьшаться до их полного исчезновения из микроструктуры. Поэтому, по-видимому, основная часть мк-дефектов, наблюдавшихся в стальных образцах на всех отмет-

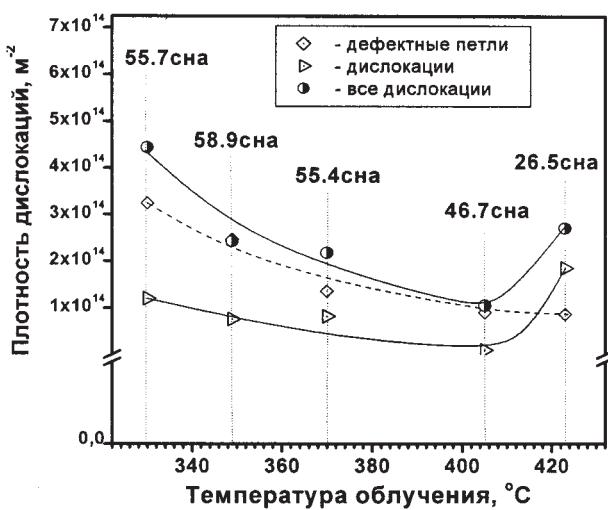


Рис.4. Температурная зависимость ρ_{tot} в облученной стали 12X18H10T

ках, представляют собой предвыделения вторичных фаз, например, карбидов TiC [5]. В пользу этого свидетельствует преимущественное образование мк-дефектов на дислокациях и полных петлях. С ростом $T_{\text{обл}}$ по высоте сборки ρ мк-дефектов монотонно уменьшается. Из-за малых размеров их роль в упрочнении стали незначительна.

Уменьшение плотности петель Франка с возрастанием $T_{\text{обл}}$ сопровождается увеличением среднего размера петель за счет преимущественного роста отдельных крупных дефектов и исчезновения мелких петель. Наиболее интенсивно этот процесс идет в интервале 330–370°C. При $T_{\text{обл}} > 370^\circ\text{C}$ скорость изменения ρ и \bar{d} дефектных петель невелика. Согласно [4, 5] с ростом $T_{\text{обл}}$ возможно преобразование петель Франка в полные петли по дислокационной реакции $a/2\langle 111 \rangle + a/6\langle 112 \rangle = a/2\langle 110 \rangle$. В подтверждение этого в стали на всех отметках наблюдаются крупные призматические (полные) петли без дефекта упаковки или фрагменты полных петель. Плотность петель Франка можно перевести в единицы измерения плотности сетки дислокаций через преобразование $\pi \cdot \rho \cdot \bar{d}$. Тогда полная плотность дислокаций ρ_{tot} находится как сумма плотности сетки дислокаций и петель Франка. Выросшие полные петли учитываются при расчете плотности сетки дислокаций. Как видно из рис.4, ρ_{tot} в материале сборки изменяется в диапазоне значений $(1.5 \div 5.3) \times 10^{14} \text{ м}^{-2}$. В интервале

$330 \div 405^\circ\text{C}$ наблюдается монотонное уменьшение ρ_{tot} , а на отметке «+500мм» при $T_{\text{обл}} = 423^\circ\text{C}$ отмечается рост ρ_{tot} , обусловленный увеличением плотности сетки дислокаций за счет превращения петель Франка в полные, роста размеров полных петель, их пересечения и слияния.

Таким образом, проведенное ПЭМ-исследование образцов стали 12X18H10T – материала облученного нейтронами чехла ТВС ЦЦ-19, показало наличие в микроструктуре пор, петель Франка, вторичных выделений, мелких комплексов дефектов и сетки дислокаций. Получены зависимости плотности и средних размеров дефектов от температуры облучения и определены величины вакансационного распухания стали на разных отметках по высоте сборки. Показано, что основной вклад в радиационное упрочнение стали чехла на отметках «-160»... «0мм» (при $T_{\text{обл}} : 330 \div 349^\circ\text{C}$) вносят выделения вторичных фаз и петли Франка, а на отметках «+160»...«+500мм» (при $T_{\text{обл}} : 370 \div 423^\circ\text{C}$) – вакансационные поры.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зеленский В.Ф., Неклюдов И.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и распухание металлов. Киев: Наукова думка. 1988. 296с.

2. Zinkle S.J., Masiasz P.J., Stoller R.E. Dose dependence of the microstructural evolution in neutron irradiated austenitic stainless steel // J.Nucl. Mater. 1993. V.206. P.266-286.

3. Garner F.A., Hamilton M.L., Panayotov N.F., Johnson G.D. The microstructural origins of yield strength changes in AISI 316 during fission or fusion irradiation //? J.Nucl. Mater.- 1981. V. 103-104. P.803-808.

4. Воеводин В.Н., Неклюдов И.М. Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов. Киев: Наукова Думка. 2006. 376с.

5. Цай К.В., Максимкин О.П., Турубарова Л.Г. Эволюция выделений вторичных фаз при отжиге аустенитной стали 12X18H9T, облученной нейtronами до 5 сна // ФММ. 2007. Т.103. №3. С.294-302.

Резюме

Температуранның 330–423°C аралығында 26-59 ақж дозасы дейін BN-350 реакторында сөүлелендірлген ЦЦ-19 жиналасының алты қырлы қабының материалы – 12X18H10T болаттың микрокұрылымы жарық түсіруші электрондық микроскопия әдісімен зерттелген.

Summary

The microstructure of 12Cr19Ni10Ti steel – the material of CC-19 fuel assembly shroud irradiated in the BN-350 reactor to doses of 26-59dpa in the temperature range 330-423°C – was investigated using the transmission electron microscopy.

Институт ядерной физики,

Национальный ядерный центр Республики Казахстан,
г. Алматы

Поступила 14.03.2009 г.

Ж.Р. АЗМАГАНБЕТОВА, А.Ч. ЛУЩИК,
А. МААРООС, Т.Н. НУРАХМЕТОВ, Б.Ж. ТОКСАНБАЕВ

ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННЫЕ И ТУННЕЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЛЮМИНОФОРАХ $\text{CaSO}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Na}^{1+}$

В $\text{CaSO}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Na}^{1+}$ изучены процессы возбуждения свечения Tb^{3+} -центров при прямом возбуждении Tb^{3+} фотонами 5,9 эВ, передаче примесным центрам энергии от возбужденных (например, фотонами 8,44 эВ) оксианионов, а также при рекомбинации электронов и дырок, создаваемых фотонами с $h\nu > 9,5$ эВ. Наряду с термостимулированной люминесценцией в $\text{CaSO}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Na}^{1+}$ обнаружены также излучательные туннельные рекомбинации между пространственно разделенными и локализованными электронами и дырками. Обсуждается возможность получение для тербивого свечения выхода $\eta > 1$ при возбуждении $\text{CaSO}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Na}^{1+}$ излучением ксенонового разряда.

В настоящее время ортосульфаты CaSO_4 , активированные редкоземельными ионами (Dy^{3+} , Eu^{3+}), являются эффективными и широко применяемыми материалами для дозиметрии γ - и рентгеновских (X) лучей. Фосфоры $\text{CaSO}_4:\text{Mn}$, давно используются в качестве дозиметров вакуумной ультрафиолетовой (ВУФ) радиации [1] и как объекты сравнения при разработке селективных дозиметров быстрых нейтронов [2]. Ведутся исследования различных люминофоров на базе щелочноземельных сульфатов для осветительных приборов и плоских плазменных телевизионных дисплеев [3-6]. К чувствительным методам исследования электронно-дырочных процессов относится метод термостимулированной люминесценции (ТСЛ). Исследование ТСЛ в соединениях со структурой CaSO_4 посвящены многочисленные работы. Наиболее изучены процессы ТСЛ в $\text{CaSO}_4:\text{Dy}^{3+}$, $\text{CaSO}_4:\text{Eu}^{3+}$ и $\text{CaSO}_4:\text{Sm}^{3+}$ фосфорах, облученных X-лучами [7-10]. Радиационные дефекты в номинально чистом кристалле CaSO_4 , X-облученном при 77 К, исследованы методом ЭПР [10]. Обнаружены два типа SO_4^{2-} -радикалов, расположенных около катионных вакансий (v_c) и стабильных до 395 и 465 К, соответственно. Общепринято, что дефектообразование в сульфатах щелочноземельных металлов, в частности в CaSO_4 , связано с распадом возбужденных оксианионных комплексов SO_4^{2-} .

Настоящая работа посвящена исследованию люминесценции (фосфоресценции) во время (после) возбуждения $\text{CaSO}_4:\text{Tb}^{3+},\text{Na}^{1+}$ фотонами 4-12 эВ, а также ТСЛ люминофоров, предварительно облученных фотонами разных энергий или электронами 5-10 кэВ. Целью работы является выделение основных механизмов передачи энергии, поглощаемой основным веществом люминофора, центрами люминесценции – ионами Tb^{3+} , замеща-

ющим близкие по ионному радиусу Ca^{2+} . Особое внимание уделено разделению процессов возбуждения линейчатого Tb^{3+} -свечения фотонами, вызывающими возбуждение или ионизацию оксианионов SO_4^{2-} , а также выделению на фоне ТСЛ туннельной люминесценции, подробно изученной ранее в щелочногалоидных кристаллах (см., например, [11]).

Объектами исследования были фосфоры $\text{CaSO}_4:\text{Tb}^{3+}, \text{Na}^{1+}$ где ионы Na^+ были введены в качестве компенсатора заряда. В дальнейшем люминофор $\text{CaSO}_4:\text{Tb}^{3+}(1 \text{ моль}\%), \text{Na}^{1+}(3 \text{ моль}\%)$ будет именоваться $\text{CaSO}_4:\text{Tb},\text{Na}-1$, а $\text{CaSO}_4:\text{Tb}^{3+}(4 \text{ моль}\%), \text{Na}^{1+}(12 \text{ моль}\%) - \text{CaSO}_4:\text{Tb},\text{Na}-2$. Порошки с размерами зерен ~6 мкм были синтезированы в Институте физики Тартуского университета по методике, описанной в [3]. В качестве исходных веществ использовались $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, TbO_2 , NaCl и $(\text{NH}_4)\text{SO}_4$ (для компенсации анионной части). Измельченная шихта прокаливалась два часа при 750°C, после быстрого охлаждения промывалась дистиллированной водой, отфильтровывалась и высушивалась при 130°C.

Измерения производились на двух экспериментальных установках Института физики (детальное описание см. в [12]). При исследовании спектров возбуждения люминесценции и ТСЛ источником ВУФ-радиации являлся разряд водорода в проточной кварцевой лампе, соединенной с монохроматором BMP-2. При измерении спектров возбуждения, путем варьирования ширины щелей вакуумного монохроматора, поддерживалось постоянство числа падающих на объект возбуждающих фотонов. Для нормировки использовалось свечение эталонного фосфора - салицилата натрия - с постоянным квантовым выходом $\eta = 0,60 \pm 0,03$ в диапазоне 4,5-11,5 эВ. После облучения объекта фотонами разных энергий при

80 или 300 К измерялись кривые ТСЛ (набором фильтров выделялась область 1,8-2,6 эВ, где осуществляются излучательные переходы в Tb^{3+}) со скоростью нагрева $\omega = 10$ К/мин. Для люминофора, предварительного облученного электронным пучком (5 кэВ, 300 нА, пятно ~ 2 мм 2) при температуре 5 К, ТСЛ измерялась с $\omega = 10$ К/мин для наиболее интенсивной линии свечения Tb^{3+} (2,27 эВ), выделяемой двойным монохроматором ДМР-4.

На рис. 1 приведены кривые ТСЛ для двух идентичных люминофоров $CaSO_4:Tb, Na-1$. Один образец был предварительно облучен 15 мин при 80 К фотонами с $h\nu = 10.5$ эВ ($\sim 10^{14}$ фотонов/см 2), селективно создающими, как показано в [6], разделенные электроны (e) и дырки (h). Второй люминофор был облучен при 5 К электронами (5 кэВ, 30 мин), создающими в тонком слое ($\sim 1-2$ мкм) значительно большую плотность различных электронных возбуждений, чем это делали фотоны 10,5 эВ. Для первого люминофора интенсивность ТСЛ, регистрируемой для Tb^{3+} -свечения, падала до нуля при нагреве от 390 до 450 К. С другой стороны, под существенно более интенсивной ТСЛ, измеренной для свечения 2,27 эВ в подвергнутом электронному облучению образце, наблюдался «пьедестал» примесного свечения, практически независимого от температуры в области 120-420 К и очень медленно спадающего со временем. Как показали дополнительные эксперименты, вторая стадия «пьедестала» полностью исчезает лишь после прогрева выше 500 К. Отметим, что рост дозы облучения фотонами 10,5 эВ ведет к накоплению созданных и локализованных e (h), а после 30-60 мин облучения наступает насыщение основного пика ТСЛ при ~ 235 К.

Аналогичное свечение, не зависящее от температуры в широкой области, изучено в кристаллах KCl и KBr (см., например, [11]) и несомненно соответствует туннельным рекомбинациям между пространственно разделенными локализованными e и h . Туннельная люминесценция (ТЛ) осуществляется без попадания e и h в зону проводимости и валентную зону, соответственно. ТЛ пропадает при нагреве образца лишь после термической ионизации электронного или дырочного центров захвата. В KCl к таким центрам относятся автолокализованная дырка, способная к прыжковой миграции лишь после нагре-

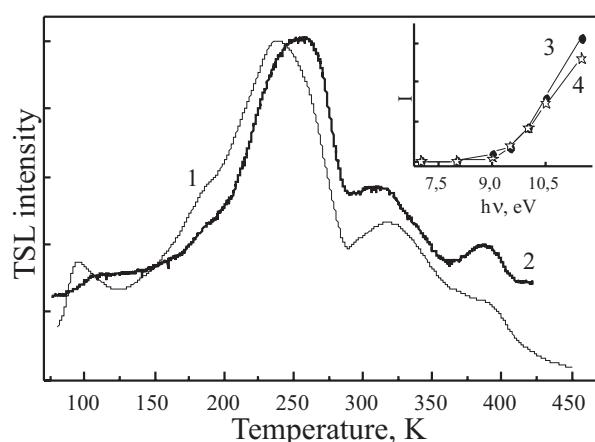


Рис. 1. Нормированные кривые ТСЛ люминофора $CaSO_4:Tb, Na-1$, облученного фотонами с $h\nu = 10.5$ эВ при 80 К (кривая 1) или электронами 5 кэВ при 5 К (2, реальная интенсивность примерно на два порядка выше). На вставке приведены спектры создания пиков ТСЛ ~ 235 (3) и 185 К (4). Кривые ТСЛ измерены для свечения Tb^{3+} , $\omega = 10$ К/мин.

ва до ~ 210 К, или дырка, локализованная около V_c и неподвижная до ~ 250 К [13]. В MgO термическая ионизация дырки, локализованной около V_c , осуществляется при 420 К. В $CaSO_4$ автолокализованной дырке соответствует один тип из SO_4^{2-} -радикалов, изученных методом ЭПР [7,9].

По данным работы [3], подтвержденным и нашими измерениями при прямом фотовозбуждении оксианионов SO_4^{2-} фотонами 8,44 эВ в спектре излучения зарегистрирована в основном $^5D_4 \rightarrow ^7F_1$ серия электронных переходов между энергетическими уровнями $4f^8$ конфигурации Tb^{3+} ионов. В спектре стационарной катодолюминесценции $CaSO_4:Tb, Na-1$ тоже доминируют эта серия с наиболее интенсивной линией излучения при 2,27 эВ ($^5D_4 \rightarrow ^7F_5$). На рис. 2 приведен спектр фосфоресценции, измеренный после облучения люминофора $CaSO_4:Tb, Na-1$ электронами 5 кэВ при 5,5 К и последующей паузы, в течение которой идет быстрая фаза затухания послесвечения. При последующем измерении спектра в области 1,8-3,5 эВ затухание фосфоресценции уже незначительно. В спектре такой ТЛ, возникающей при рекомбинации пространственно разделенных локализованных e и h , тоже зарегистрирована $^5D_4 \rightarrow ^7F_1$ серия электронных переходов в $4f^8$ конфигурации Tb^{3+} ионов. Кроме интенсивной линии свечения 2,27 эВ в ТЛ видны и менее вероятные переходы с уровня 5D_4 на 7F_6 (2,54 эВ), 7F_4 (2,13 эВ) и 7F_3 (2,02 эВ). Но наиболее важно, что в спек-

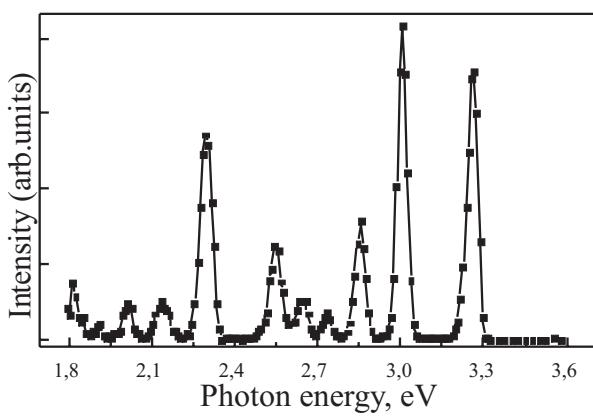


Рис. 2. Спектр фосфоресценции CaSO₄:Tb,Na-1, измеренный после двухминутного облучения электронами 5 кэВ и 10 мин паузы при 5,5 К

трёх ТЛ (туннельной фосфоресценции) видны и интенсивные линии при 2,55-3,35 эВ, связанные с возбуждением Tb³⁺ до более высокого по энергии уровня ⁵D₃ и последующими излучательными переходами на ⁷F₅ (3 эВ, наиболее интенсивная линия) и другие ⁷F_J уровни. Причины различия в процессах возбуждения примесного свечения при передаче ионам Tb³⁺ энергии от возбужденного оксианиона или энергии, выделяемой при туннельной рекомбинации пространственно разделенных локализованных *e* и *h*, будут детально рассмотрены в специальной публикации.

Были измерены также кривые ТСЛ фосфора CaSO₄:Tb,Na-2, облученного при 80 К фотонами с энергией 10 или 11,5 эВ. Как и в образце с меньшей концентрацией Tb³⁺ ионов в ТСЛ наблюдаются плохо разрешенные пики при ~110 К, 150, 185 и 235 К. Причем пики 185 и 235 К возникают лишь после облучения фосфоров фотонами с $h\nu \geq 9,5$ эВ (см. вставку на рис. 1). На рис. 3 для люминофоров с обеими концентрациями тербия приведены спектры возбуждения фосфоресценции равными квантовыми дозами фотонов разных энергий при 80 или 300 К. Как видно из спектров, фосфоресценция в обоих фосфорах появляется после их облучения фотонами с энергией выше 9,5 эВ. Это еще одно экспериментальное подтверждение области начала создания разделенных *e* и *h* (то есть ширины энергетической щели E_g) в CaSO₄ (см. также [6]).

На рис. 4 приведены спектр возбуждения для излучения Tb³⁺ (в области 2,27 эВ) в CaSO₄:Tb,Na-1 и CaSO₄:Tb,Na-2, выделенного комбинацией фильтров. В работах [3,6] широкую

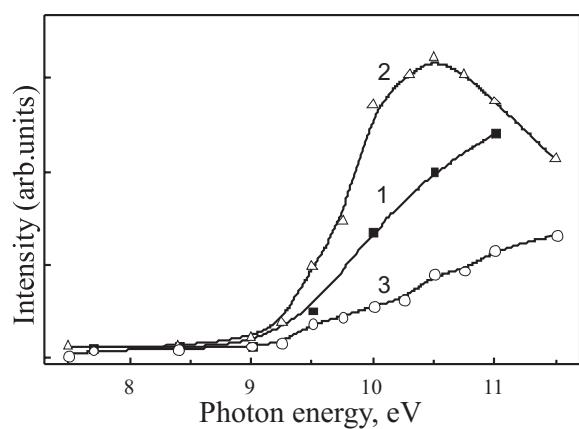


Рис. 3. Спектры возбуждения фосфоресценции для фосфоров CaSO₄:Tb,Na-1 (кривая 1) и CaSO₄:Tb, Na-2 (кривые 2 и 3) измеренные при 300 К (1,3) и 80 К (2)

полосу возбуждения с максимумом около 8,4 эВ интерпретируют как фотовозбуждение оксианионов SO₄²⁻. Эта полоса присутствует, как оказалось, в спектрах возбуждения CaSO₄, легированных не только ионами Tb³⁺, но и имеющими совершенно другие спектры излучения ионами Dy³⁺ и Gd³⁺. Предполагается, что в фосфоре CaSO₄:Tb,Na-2 после возбуждения оксианиона SO₄²⁻ фотоном 8,4 эВ энергия может быть передана сразу двум примесным ионам [3,6]. Весьма интенсивная в CaSO₄:Tb,Na-2 узкая полоса возбуждения в области 5,9 эВ (см. рис. 4) интерпретирована (см. [6] и цитируемую там литературу) как прямое возбуждение Tb³⁺-центров при электронных переходах 4f⁸ → 4f⁷4d. Вероятность таких переходов значительно выше, чем для переходов между уровнями 4f⁸-конфигурации. Так как интенсивность свечения Tb³⁺-центров при возбуждении оксианионов ($h\nu = 8,4$ эВ) значительно выше, чем при прямом возбуждении Tb³⁺ фотонами 5,9 эВ, то приведенные на рис. 4 результаты не противоречат предположению [3,6] о возможности получения примесного свечения с квантовым выходом $\eta > 1$ в CaSO₄ с большой концентрацией тербия (4 мол%). Рассмотрим этот вопрос более подробно.

В настоящее время делаются попытки использовать процессы фотонного умножения [6] или дробления фотонов [3-5] для получения на основе CaSO₄ эффективных спектральных трансформаторов резонансного свечения ксенонового разряда (8,44 эВ) в видимое свечение с квантовым выходом $\eta > 1$. Экспериментальные данные, приведенные в настоящей работе, надежно под-

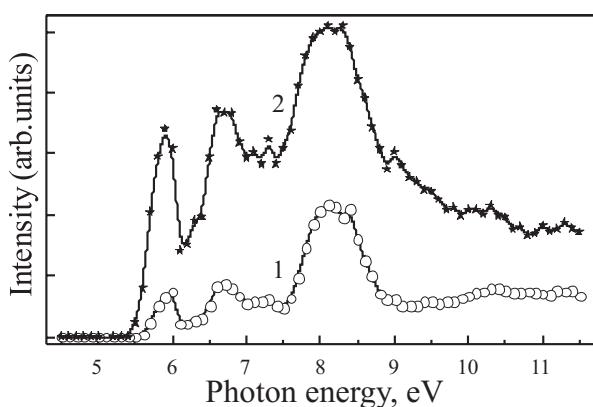


Рис. 4. Спектры возбуждения излучения тербия (545 нм, 2,27 эВ) в $\text{CaSO}_4\text{:Tb,Na-1}$ (кривая 1) и $\text{CaSO}_4\text{:Tb,Na-2}$ (2) при 300 К

тврждают определенную в [6] для CaSO_4 величину $E_g = 9,5$ эВ. Соответственно, по энергетическим соображениям нельзя получить свечение с $\eta > 1$ за счет создания одним возбуждающим фотоном 8,44 эВ двух $e-h$ пар: первичной, образующейся при поглощении фотона, и вторичной, созданной за счет избыточной кинетической энергии горячего электрона проводимости из первичной $e-h$ пары.

Наши результаты, однако, согласуются с принципиальной возможностью получения Tb^{3+} -свечения с $\eta > 1$ (см. [3, 6]) за счет передачи энергии одного возбуждающего фотона с $h\nu = 8,44$ эВ одному или сразу двум примесным центрам. При передаче энергии одному центру за счет последовательных каскадных переходов возможно испускание двух квантов свечения. Однако, вероятность каскадного излучения в $\text{CaSO}_4\text{:Tb}^{3+}$ мала [4, 5], так как верхний уровень $^1\text{S}_0$ для $4f \rightarrow 4f$ переходов расположен выше, чем уровни энергии для переходов, имеющих по правилам отбора большую вероятность. Теоретическую возможность передачи энергии от сенсибилизатора сразу двум люминесцирующим ионам активатора впервые рассмотрел Декстер [14]. Последующая экспериментальная проверка гипотезы на системе $\text{Zn}_2\text{SiO}_4\text{:Mn}$ не показала превышения $\eta = 1$ [15]. Вероятность механизма Декстера низка. Недавно эффект Декстера был предположительно обнаружен для фосфора $\text{CaSO}_4\text{:Tb}^{3+}, \text{Na}^{1+}$ с 4 моль% Tb^{3+} , где эффективность свечения Tb^{3+} -центров незначительно превышала единицу при возбуждении резонансным свечением Хе-разряда [3]. Наши экспериментальные данные для

лучшего образца $\text{CaSO}_4\text{:Tb,Na-2}$ дают для эффективности Tb^{3+} -свечения при возбуждении $h\nu = 8,44$ эВ величину $\eta = 0,94 \pm 0,05$ (определенна относительно свечения салицилата натрия с $\eta = 0,60 \pm 0,03$). Уже отмечалось, что в нашей системе кроме основной серии излучательных переходов $^5\text{D}_4 \rightarrow ^7\text{F}_J$ наблюдаются и переходы $^5\text{D}_3 \rightarrow ^7\text{F}_J$ (особенно эффективно в фосфоресценции, см. рис. 2). Их учет оставляет возможным получение примесного свечения с $\eta > 1$ при передаче энергии возбуждающего фотона сразу двум Tb^{3+} -центрам люминесценции. К сожалению, основное свечение $^5\text{D}_3 \rightarrow ^7\text{F}_J$ лежит в спектральной области, неблагоприятной для человеческого глаза.

Отметим, что величину $\eta > 1$ для суммарного свечения удалось получить в системе $\text{Al}_2\text{O}_3\text{:Mg,Ti}$ после фотосоздания экситонов фотонами 9 эВ при 80 К [16]. Причем один из двух фотонов, испускаемых после поглощения возбуждающего фотона, был результатом туннельной рекомбинации. Именно поэтому в настоящей работе особое внимание было уделено поиску туннельных переходов в фосфоресценции, которые и были обнаружены в $\text{CaSO}_4\text{:Tb,Na-1}$ (см. рис. 1, а также [6]). Туннельные переходы в более сложных по структуре сульфатах щелочных металлов исследовались в [17].

Очевидно, что вопрос о возможности получения примесного свечения с $\eta > 1$ при возбуждении $\text{CaSO}_4\text{:Tb}^{3+}, \text{Na}^{1+}$ излучением Хе-разряда требует дальнейшего изучения. Нужно учитывать, что наши фосфоры N1 и N2 оказались не достаточно стабильными. Их характеристики несколько меняются при длительном хранении, и еще сильнее - при длительном облучении электронами 5 кэВ при 5 К. Электроны не только возбуждают интенсивную люминесценцию, но и приводят к накоплению дефектов (например, ионов SO_3^-), проявляющихся в высокотемпературных пиках ТСЛ (450-700 К).

ЛИТЕРАТУРА

1. Архангельская В.А., Вайнберг Б.И., Разумова Т.К. Простой способ определения пропускания некоторых оптических материалов в шумановской области спектра // Оптика и спектроскопия. 1963. Т. 1. С. 1018-1020.
2. Кузьмин В.В., Луцук Ч.Б., Савиухин Ф.А., Соколов А.Д., Яэк И.В. Термолюминесцентный дозиметр быстрых нейтронов // Атомная энергия. 1967. №22. С. 482-488.
3. Lakshmanan A.R., Kim S.-B., Jang H.M., Kim B.G., Kang B.K., Heo S., Seo D. A quantum-splitting phosphor

- exploiting the energy transfer from anion excitons to Tb^{3+} in $CaSO_4:Tb, Na$ // Adv.Funct.Mater. 2007. V.17. P. 212-218.
4. Yamashita N., Hamada T., Tanaga M., Katsuki M., Nagakagama M. Photoluminescence and thermiluminescence of $MgSO_4$, $CaSO_4$, $SrSO_4$ and $BaSO_4$ powder phosphor activated with Tb^{3+} // Jpn. J.Appl. Phys. 2001. V. 40. P. 6732-6736.
5. Van der Kolk E., Dorenbos P., Vink A.P., Perego R.C. van Eijk C.W.E., Lakshmanan A.R. Vacuum ultraviolet excitation and emission properties of Pr^{3+} and Ce^{3+} in MSO (M=Ba, Sr, and Ca) and predicting quantum splitting by Pr^{3+} in oxides and fluorides // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. 195129.
6. Kudryavtseva I., Liblik P., Lushchik A., Maaroos A., Vasil'chenko E., Azmagambetova Z., Nurakhmetov T., Toxanbayev B.. Electron-hole and excitation processes in $CaSO_4$ doped with Gd^{3+} , Tb^{3+} and Dy^{3+} // J. Lumin. 2009. accepted.
7. Calvert R.L., Danby R.J. Thermoluminescence and radioluminescence from Eu- and Sm-doped $CaSO_4$. // Phys.Stat.Sol. (a). 1984. V. 83. P. 597-604.
8. Morgan M.D., Stoebe T.G. Thermoluminescent mechanisms in $CaSO_4:Dy$ single crystals // Radiation Protection Dosimetry. 1986. V. 17. P. 455-458.
9. Danby R.J., Boas J.F., Calvert R.L., Pilbrow J.R. ESR of thermoluminescence centers in $CaSO_4$ single crystals // J.Phys.C: Solid State Phys. 1982. V. 15. P. 2483-2493
10. Gerome V., Tacconi P., Laproz D., Prevost H., Bauer A. Thermoluminescence of undoped and Dy-doped $CaSO_4$: Influence of the preparation methods // Radiation Protection Dosimetry. 1996. V. 65. P. 309-312.
11. Aboltin D.E., Grabovskis V.J., Kangro A.R., Lushchik Ch.B., O'Konnel-Bronin A.A., Vitol I.K., Zirap V.E.. Thermally stimulated and tunneling luminescence and Frenkel defect recombination in KCl and KBr at 4.2 to 77 K //Phys. Status Solidi (a). 1978.V. 47. P. 667-675.
12. Nakonechnyi S., Körner T., Lushchik A. Lushchik Ch., Babin V., Feldbach E., Kudryavtseva I., Liblik P., Pung L., Vasil'chenko E. Low-temperature excitonic, electron-hole and interstitial-vacancy processes in LiF single crystals // J. Phys.: Condens. Matter. 2006. V. 18. P. 379-394.
13. Луцик Ч.Б., Луцик А.Ч.. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. М.: Наука, 1989. 263 с.
14. Dexter D.L.. A theory of sensitized luminescence in solids // Phys. Rev. 1957. V. 108. P. 630-635.
15. Луцик Н.Е., Луцик Ч.Б., Мерилло И.А., Соовик Х.А.. Миграция энергии и фотонное умножение в кристаллофосфорах, активированных марганцем // Труды ИФА АН ЭССР. 1966. Т. 34, С. 49-67.
16. Lushchik A., Kirm M., Lushchik Ch., Martinson I., Nagirnyi V., Vasil'chenko E., Savikhin F. Multiplication of electronic excitations and prospects for increasing scintillation efficiency in wide-gap crystals // Nucl. Instr. and Meth. A. 2005. V. 537. P. 45-49.
17. Нурахметов Т.Н., Кайнарбаев А.Д., Жунусбеков А.М., Токбергенов И.Т. Накопления дефектов в облученных сульфатах щелочных металлов. //Доклады 10-ой международной конференции «Физико-химические процессы в неорганических материалах», Кемерово, Россия. 2007. Т. 1. С. 123-124.

Резюме

$CaSO_4:Tb^{3+}, Na^{1+}$ люминофорында Tb^{3+} иондарын 5,9 эВ фотондармен тікелей қоздыру кезінде Tb^{3+} -центрлерінің сөүлеленуі және 8,44 эВ фотондар энергиясымен қозған оксиаиондардан, сондай- ақ $h\nu > 9,5$ эВ фотондардың әсерінен пайда болған электрондар мен кемтіктердің рекомбинациялануы кезінде бөлінетін энергияның коспа центрлеріне берілу процестері қарастырылған. $CaSO_4:Tb^{3+}, Na^{1+}$ фосфорының термоынталандырылған люминесценциясы сонымен катар, кеңістікте бөлінген және орнықкан электрондар мен кемтіктердің арасындағы туннельдік сөүле шығара рекомбинациялануы анықталған. Ксенон разрядының сөүлеленуімен $CaSO_4:Tb^{3+}, Na^{1+}$ қоздыру арқылы тербий жарқырауының кванттық шығымын $\eta > 1$ алу мүмкіндігі талқыланады.

Summary

In $CaSO_4:Tb^{3+}, Na^{1+}$, the excitation processes of Tb^{3+} centres are caused by the direct excitation of Tb^{3+} by 5.9-eV photons and due to the energy transferred from an excited oxyanion or released at the recombination between electrons and holes formed by photons of $h\nu > 9,5$ eV. In parallel with thermostimulated luminescence the radiative tunnel recombination between spatially separated localized electrons and holes has been revealed in $CaSO_4:Tb^{3+}, Na^{1+}$. The prospects for obtaining the efficiency of Tb^{3+} -emission with quantum yield above unity at the excitation of the phosphor by Xe-discharge emission are analyzed.

Евразийский национальный
университет им. Л.Н.Гумилева,
г. Астана;
Институт физики Тартуского
университета, г. Эстония

Поступила 14.05.09 г.

УДК 539.17

С.Б. ДУБОВИЧЕНКО, А.В. ДЖАЗАИРОВ-КАХРАМАНОВ

АСТРОФИЗИЧЕСКИЙ S-ФАКТОР РАДИАЦИОННОГО ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ ЗАХВАТА ПРИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ

В потенциальной кластерной модели рассмотрена возможность описания астрофизического S-фактора радиационного ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ захвата при энергиях 0.1-4.0 МэВ.

Введение

Процесс радиационного захвата ${}^{12}\text{C}({}^4\text{He},\gamma){}^{16}\text{O}$, наряду с тройным гелиевым захватом (процесс Солпитера), присутствует в цикле термоядерных реакций для звезд на горячей стадии их развития, когда температура внутри звезды составляет сотни миллионов Кельвинов [1]. Столь высокие температуры дают взаимодействующим частицам достаточно энергии для увеличения вероятности прохождения кулоновского барьера, а значит, выход такой реакции заметно возрастает. Эта реакция приводит к образованию стабильного ядра ${}^{16}\text{O}$, которое является промежуточным звеном в процессе образования более тяжелых элементов, например, с помощью реакций ${}^{16}\text{O}({}^4\text{He},\gamma){}^{20}\text{Ne}$ и ${}^{20}\text{Ne}({}^4\text{He},\gamma){}^{24}\text{Mg}$ и т.д. Однако, довольно долго существовали большие неопределенности в точном определении скорости реакции ${}^{12}\text{C}({}^4\text{He},\gamma){}^{16}\text{O}$, но сравнительно недавно появились новые, измеренные с хорошей точностью экспериментальные данные в области энергий 1.9-4.9 МэВ [2], которые, по-видимому, устраняют большую часть этих неопределенностей.

Ранее нами была показана возможность описания астрофизических S-факторов легчайших ядер на основе потенциальной кластерной модели (ПКМ) с запрещенными состояниями (ЗС). Такая модель учитывает супермультиплетную симметрию волновой функции (ВФ) относительного движения кластеров при разделении орбитальных состояний по схемам Юнга [3]. Используемая классификация орбитальных состояний позволяет анализировать структуру межкластерных взаимодействий, определять наличие и количество разрешенных (РС) и запрещенных состояний в межкластерных потенциалах, а значит и число узлов межкластерной радиальной ВФ [4].

В данной работе на основе потенциальной кластерной модели с запрещенными состояниями мы рассматриваем астрофизический S-фактор реакции радиационного ${}^{12}\text{C}({}^4\text{He},\gamma){}^{16}\text{O}$ захвата на различные состояния ядра ${}^{16}\text{O}$ при энергиях от 0.3 до 4.0 МэВ, а для сравнения результатов наших расчетов используем, в основном, новые экспериментальные данные работы [2].

Потенциалы и фазы рассеяния

Вначале заметим, что выполнить точную классификацию ЗС и РС в системе 16 частиц, за исключением S-состояния ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ системы, не представляется возможным из-за отсутствия таблиц схем Юнга. Поэтому для построения потенциалов рассеяния и связанных состояний (СС) использовалось качественное представление о числе ЗС в заданной парциальной волне. А именно, потенциал каждой следующей парциальной волны обычно имеет на одно запрещенное состояние меньше – примерно такая тенденция наблюдалась для более легких кластерных систем в ядрах с массой меньше или равной восьми [5].

Для проведения расчетов были получены более точные, чем приведены в нашей ранней статье [6], потенциалы ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ взаимодействий, которые можно использовать теперь для расчетов астрофизических S-факторов реакции ${}^{12}\text{C}({}^4\text{He},\gamma){}^{16}\text{O}$ захвата практически при любых низких энергиях. Уточнение параметров взаимодействий для связанных состояний обусловлено тем, что при переходах из состояний континуума для энергий порядка 1-100 кэВ на различные связанные уровни ядра ${}^{16}\text{O}$ требуется максимально точное воспроизведение их энергии связи.

При выполнении расчетов была переделана компьютерная программа, основанная на конеч-

но-разностном методе (КРМ) и написанная ранее на языке TurboBasic (TB) [7]. Программа переведена на язык Fortran 90, который позволяет заметно поднять точность всех вычислений и, например, получать более точные значения энергии связи ядра в двухчастичном канале. Теперь абсолютная точность поиска энергии связанных уровней ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ системы реально составляет 10^{-6} МэВ, точность поиска нуля детерминанта 10^{-15} , а вронскианы кулоновских функций находятся на уровне $10^{-15}\text{--}10^{-20}$ [7].

Рассмотрим теперь классификацию орбитальных состояний ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ системы, где спин S и изоспин T равны нулю, которая позволяет определить общее количество ЗС в потенциале S-взаимодействия. Возможные орбитальные схемы Юнга системы ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ определяются по теореме Литлвуда [8], что в данном случае дает $\{444\} \times \{4\} = \{844\} + \{754\} + \{7441\} + \{664\} + \{655\} + \{6442\} + \{6541\} + \{5551\} + \{5542\} + \{5443\} + \{4444\}$ [6]. Схемы {4} и {444} соответствуют ядрам ${}^4\text{He}$ и ${}^{12}\text{C}$ в основном состоянии. В соответствии с правилами [8] можно сделать вывод, что разрешенной будет только схема {4444}, а все остальные орбитальные конфигурации запрещены. В частности, все возможные конфигурации, где в первой строке находится число больше четырех, не могут реализовываться, так как в S-оболочке не может быть больше четырех нуклонов.

Используя правило Элиота [8] можно определить орбитальные моменты, соответствующие различным схемам Юнга. Тогда получим, что основное состояние (ОС) ядра ${}^{16}\text{O}$ с моментом L = 0 может реализоваться для следующих орбитальных схем {4444}, {5551}, {664}, {844} и {6442}. Этот результат можно использовать для определения числа связанных запрещенных состояний в потенциале основного состояния. Поскольку в ОС разрешена только симметрия {4444}, то остальные схемы будут запрещены и такой потенциал ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ взаимодействия должен иметь четыре связанных запрещенных состояния и одно разрешенное состояние при энергии связи ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ системы в ядре ${}^{16}\text{O}$ [6].

Для описания процессов упругого рассеяния ${}^4\text{He}$ на ядре ${}^{12}\text{C}$ и связанных состояний этих кластеров, потенциал взаимодействия выбирался в обычном виде

$$V(r) = -V_0 \exp(-\alpha r^2)$$

со сферическим кулоновским взаимодействием при $R_c = 3.55$ фм и строился исходя из требований описания таких характеристик, как энергия связи, зарядовый радиус, кулоновский формфактор при малых переданных импульсах, вероятности электромагнитных переходов между связанными уровнями и парциальной фазы упругого рассеяния. В работе [6] был найден потенциал взаимодействия для основного 1S-состояния ядра ${}^{16}\text{O}$ в ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ канале и другие потенциалы для СС, удовлетворяющие описанным выше требованиям.

Здесь мы уточнили параметры потенциалов СС для более правильного описания энергий связи, в частности, для ОС 1S - состояния получено

$$V_{1S} = 256.845472 \text{ МэВ}, \alpha = 0.189 \text{ фм}^{-2}. \quad (1)$$

Такой потенциал имеет ЗС при энергиях: -37.56; -80.80; -134.46; -197.25 МэВ, в полном соответствии с выполненной выше классификацией ЗС и РС. Конечно-разностным методом [7] найдена энергия связи -7.161950 МэВ при экспериментальной величине -7.16195 МэВ [9] и зарядовый радиус 2.705 Фм при радиусах ${}^4\text{He}$: 1.671(14) фм [10] и ${}^{12}\text{C}$: 2.4829(19) фм [11], а экспериментальное значение радиуса ядра ${}^{16}\text{O}$ равно 2.710(15) фм [9].

Для потенциала 2S-уровня с экспериментальной энергией связи -1.113 МэВ [9] также получены более точные параметры взаимодействия $V_0 = 97.7285$ МэВ, $\alpha = 0.111 \text{ фм}^{-2}$ с тем же кулоновским радиусом. Потенциал точно воспроизводит канальную энергию, имеет запрещенные связанные состояния при трех энергиях -16.0, -38.2 и -66.2 МэВ и дает среднеквадратичный радиус 2.97 фм. Можно построить и потенциал с четырьмя запрещенными связанными состояниями и параметрами $V_0 = 143.1092$ МэВ, той же ширины и кулоновским радиусом, который воспроизводит энергию СС, и приводят к ЗС при -16.9, -40.5, -70.6 и -106.1 МэВ, а зарядовый радиус оказывается равен 3.07 фм.

При уточнении параметров потенциала связанныго 1P - состояния получены следующие значения: $V_0 = 104.11325$ МэВ, $\alpha = 0.16 \text{ фм}^{-2}$ при таком же кулоновском радиусе. Этот потенциал содержит связанные запрещенные состояния при энергиях -19.2 и -48.6 МэВ и разрешенное состояние при -0.0450 МэВ, в полном согласии с данными [9]. Можно предложить и потенциал с тремя ЗС и параметром глубины $V_0 = 161.2665$ МэВ,

той же ширины и кулоновским радиусом. Он точно воспроизводит энергию связанных состояний и имеет ЗС при энергиях: -20.4, -52.0, -92.5 МэВ.

Следуя представлениям, изложенным в начале статьи, можно считать, что вторые варианты потенциалов 2S и 1P СС, имеющие четыре и три ЗС соответственно, что совпадает с числом ЗС для S и P потенциалов рассеяния, описанным далее, являются более правильными и, именно, их мы будем использовать в дальнейших расчетах.

Для параметров потенциала 1D-состояния получено: $V_0 = 90.3803$ МэВ и $\alpha = 0.1$ фм $^{-2}$ с таким же кулоновским радиусом. Он приводит к энергии связанных уровня -0.2450 МэВ в полном соответствии с данными [9] и содержит два запрещенных состояния при -14.0 и -34.3 МэВ.

Для 1F-состояния ядра ^{16}O получены следующие параметры: $V_0 = 191.4447$ МэВ и $\alpha = 0.277$ фм $^{-2}$. Потенциал дает энергию связанных состояния -1.0320 МэВ, полностью согласующуюся с данными [9] и содержит запрещенное состояние при энергии -38.3 МэВ.

Потенциал основного 1S-состояния приводит к неправильной величине S-фазы рассеяния, как показано на рис.1 штриховой линией. Примерно такие же результаты получаются и для других парциальных волн. Для того, чтобы правильно описать S-фазу, полученную из фазового анализа [13, 14], приходится изменить его глубину и принять $V_s = -155$ МэВ, $\alpha_s = 0.189$ фм $^{-2}$ с $R_c = 3.55$ фм. Потенциал содержит четыре связанных запрещенных состояния при энергиях -1.3, -25.1, -61.5 и -107.7 МэВ и вполне приемлемо описывает S-фазу (рис.1 непрерывная линия).

Для P, D, F и G-волн процессов упругого рассеяния получены новые потенциалы взаимодействия, которые также, как в [6], отличны от потенциалов связанных состояний. Приведем их параметры вместе с энергиями ЗС в МэВ ($R_c = 3.55$ фм):

$$V_p = 145.0 \text{ МэВ}, \alpha_p = 0.160 \text{ фм}^2, \quad \text{ЗС: } -13.6, -42.1, -79.7; \quad (2)$$

$$V_D = 435.25 \text{ МэВ}, \alpha_D = 0.592 \text{ фм}^2, \quad \text{ЗС: } -61.9, -167.0;$$

$$V_F = 73.4 \text{ МэВ}, \alpha_F = 0.125 \text{ фм}^2, \quad \text{ЗС: } -7.5; \\ V_G = 55.55 \text{ МэВ}, \alpha_G = 0.1 \text{ фм}^2, \quad \text{ЗС: Нет}$$

Результаты расчета фаз для новых потенциалов показаны на рис.2-5 непрерывными кривыми.

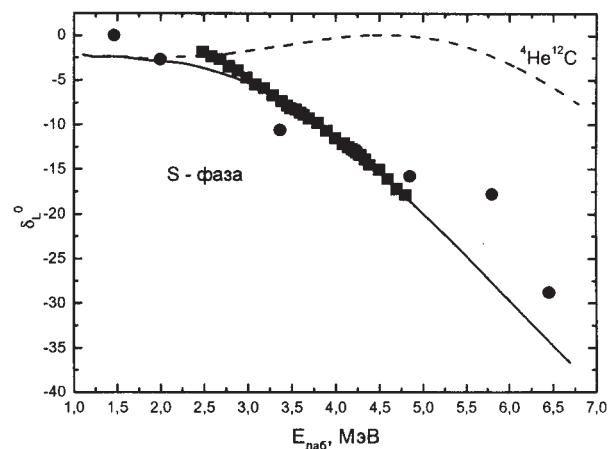


Рис.1. S – фаза упругого $^4\text{He}^{12}\text{C}$ рассеяния в градусах. Квадраты – данные работы [13]. Точки – наши результаты [14], полученные на основе эксперимента [12]. Кривые – результаты расчетов с найденными потенциалами.

Полученное различие параметров потенциалов, описывающих фазы рассеяния и характеристики СС, по-видимому, может быть объяснено малостью вклада рассмотренного канала в связанные состояния ядра ^{16}O . Возможно, простая кластерная $^4\text{He}^{12}\text{C}$ модель, в отличие от более легких ядер [5, 15], не способна полностью описать различные характеристики ядра ^{16}O на базе единых потенциалов. Другой причиной такого расхождения, как уже говорилось, может служить отсутствие точной классификации ЗС и РС в системе 16 частиц для всех парциальных волн.

Астрофизический S-фактор

Для вычисления астрофизического S-фактора использовалось известное выражение [16]

$$S(EJ) = \sigma(EJ)E_{cm} \exp\left(\frac{31.335Z_1Z_2\sqrt{\mu}}{\sqrt{E_{cm}}}\right),$$

где σ – полное сечение процесса радиационного захвата в барн, E_{cm} – энергия частиц в кэВ (с.ц.м.), μ – приведенная масса частиц в а.е.м. и Z – заряды частиц в единицах элементарного заряда. Численный коэффициент 31.335 получен нами на основе современных значений фундаментальных констант [17].

Полные сечения радиационного захвата $\sigma(EJ)$ в потенциальной кластерной модели имеют вид (см., например, [5] или [18])

$$\sigma_c(EJ) = \frac{8\pi K e^2}{\hbar^2 q^3} \frac{\mu}{(2S_1+1)(2S_2+1)} \frac{J+1}{J[(2J+1)!!]^2} |A_J(K)P_J(EJ)I_J|^2$$

где для электрических EJ(L) переходов [5]

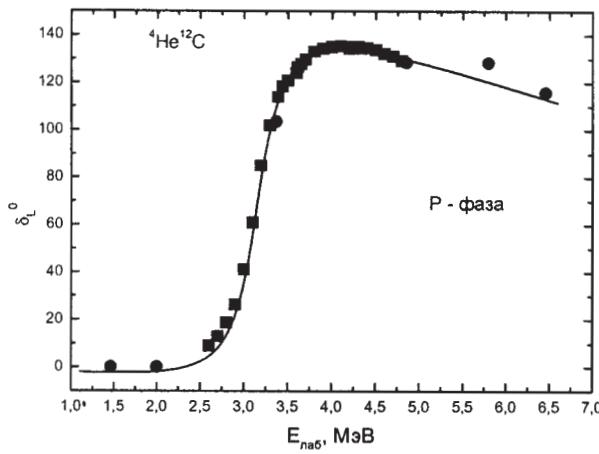


Рис.2. P-фаза упругого ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ рассеяния.
Описание результатов, как на рис.1

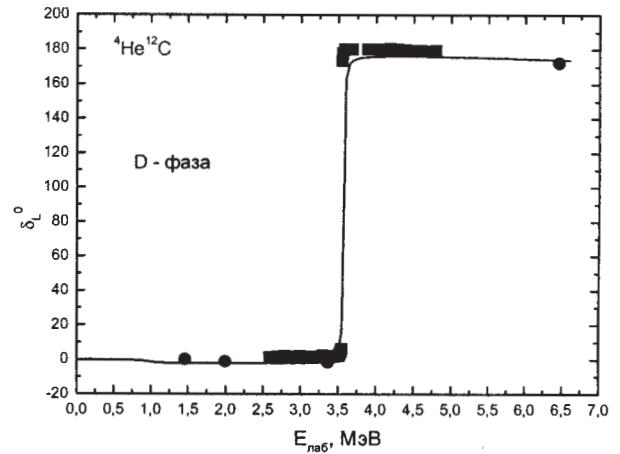


Рис.3. D-фаза упругого ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ рассеяния.
Описание результатов, как на рис.1

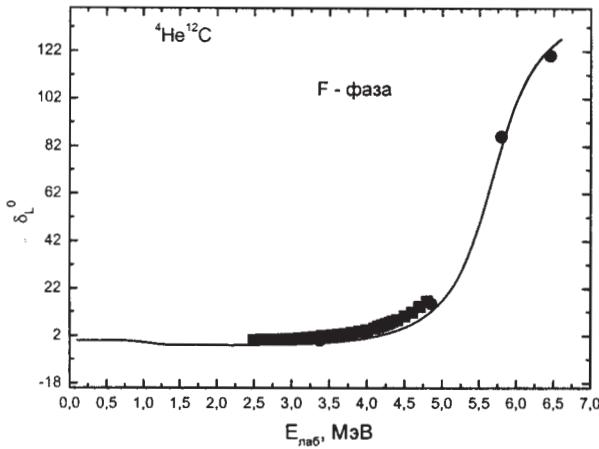


Рис.4. F-фаза упругого ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ рассеяния.
Описание результатов, как на рис.1

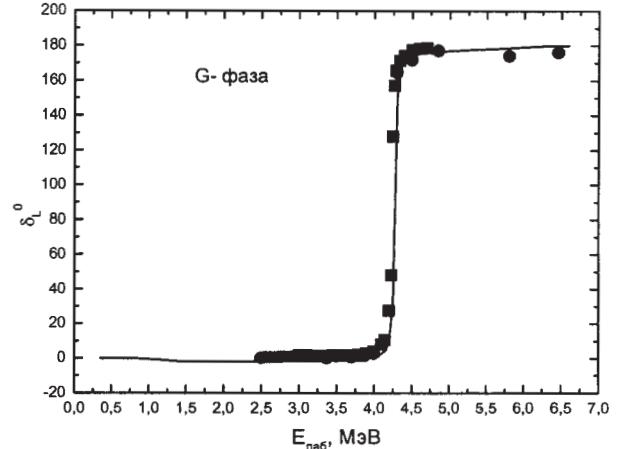


Рис.5. G-фаза упругого ${}^4\text{He}{}^{12}\text{C}$ рассеяния.
Описание результатов, как на рис.1

$$P_J(EJ) = \delta_{S_i S_f} (-1)^{J_i + S + L_f + J} \times \\ \times \sqrt{(2J+1)(2L_i+1)(2J_i+1)(2J_f+1)} (L_i 0 J_0 | L_f 0) \begin{Bmatrix} L_i & S & J_i \\ J_f & J & L_f \end{Bmatrix}, \\ A_J(K) = K^J \mu^J \left(\frac{Z_1}{m'_1} + (-1)^J \frac{Z_2}{m'_2} \right), \quad I_J = \langle \Phi_f | R^J | \Phi_i \rangle.$$

Здесь μ – приведенная масса, K^J – волновое число γ – кванта, q – волновое число частиц входного канала, m_1 , m_2 , Z_1 , Z_2 – массы и заряды частиц, $S_i = S_f = S = 0$.

Для выполнения расчетов задавались точные значения масс частиц [17], а константа \hbar^2 / m_0 , принималась равной 41.4686 МэВ фм². Кулоновский параметр $\eta = \mu Z_1 Z_2 e^2 / (k \hbar^2)$ представлялся в виде $\eta = 3.44476 \cdot 10^{-2} Z_1 Z_2 \mu / k$, где k – волновое число в

фм⁻¹, μ – приведенная масса в а.е.м. Кулоновский потенциал при $R_c = 0$ записывался в форме $V_c(\text{МэВ}) = 1.439975 Z_1 Z_2 / r$, где r – расстояние в фм.

В настоящих расчетах рассматривались E1 и E2 процессы с переходами из P- и D-волн рассеяния на основное 1S состояние ядра ${}^{16}\text{O}$, спектр уровней которого показан на рис.6. Первый из них возможен только благодаря отличию массы ${}^4\text{He}$, которая равна 4.001506179127 [17], от целого числа. Результаты расчета S-фактора этого процесса оказались на два-три порядка меньше экспериментальных данных, хотя и имеет правильную форму, обусловленную резонансным поведение P-фазы рассеяния [6].

Переход типа E2 из D-волны рассеяния на основное 1S-состояние приводит к S-фактору,

^{16}O	G	4^+	3.19
	D	2^+	2.69
	P	1^-	2.46
$^4\text{He}^{12}\text{C}$			
	1P	1^-	-0.045
	1D	2^+	-0.245
	1F	3^-	-1.032
	2S	0^+	-1.113
	1S	0^+	-7.162

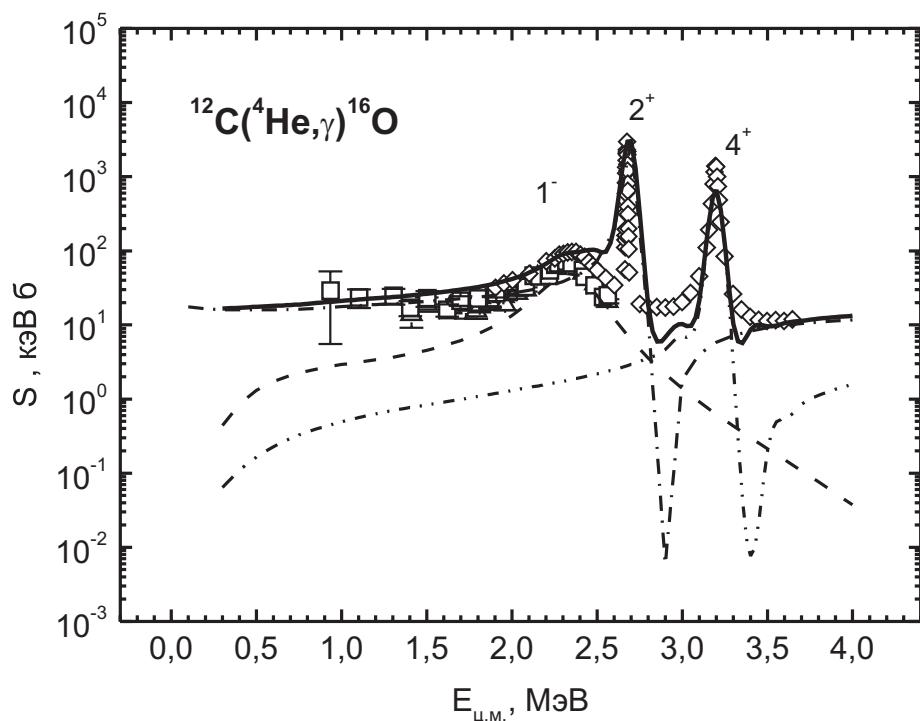
Рис.6. Спектр уровней ядра ^{16}O

показанному на рис.7 штрих-пунктирной линией. Он вполне объясняет эксперимент при энергиях в области 0.9 - 3.0 МэВ, но не описывает резонанс при 2.46 МэВ, поскольку он обусловлен поведением Р-фазы рассеяния, имеющей резонанс в этой области энергий. При энергиях от 2.5 до 3.0 МэВ расчетный S-фактор в целом передает

положение и высоту пика обусловленного резонансом в D-волне рассеяния при энергии 2.69 МэВ, но ширина уровня оказывается несколько больше экспериментальной. Величина расчетного S-фактора 2^+ резонанса, оказывается, очень чувствительна к глубине потенциала в D-волне - ее увеличение на 0.05 МэВ приводит к более резкому подъему фазы рассеяния и, практически не изменяя положение резонанса, уменьшает его величину примерно в три раза.

Если допустить, что эксперимент включает сечения с переходом на 1P уровень, то можно рассмотреть E2 процесс из P-волны рассеяния на связанное 1P-состояние ядра ^{16}O при энергии -0.045 МэВ (рис.6). Результаты этого расчета для второго варианта потенциала связанного 1P-состояния, показанные на рис.7 пунктирной линией, вполне передают форму резонанса при 2.46 МэВ. Если использовать первый, из приведенных выше вариантов 1P взаимодействий с двумя ЗС, то величина пика 1^- резонанса уменьшается примерно в два раза.

Двойной штрих-пунктирной линией показаны результаты расчета E2 перехода из G-волны на 1D связанное состояние, которые правильно передают положение и ширину максимума 4^+ резо-

Рис.7. Астрофизический S-фактор радиационного $^4\text{He}^{12}\text{C}$ захвата.

Квадраты - экспериментальные данные, взятые из обзора [18], нижние треугольники из [19] и верхние треугольники из [20], ромбы из работы [2]. Кривые - расчеты S-фактора для разных переходов

нанса, но его величина оказывается примерно в два раза меньше эксперимента. Следует отметить, что не удалось найти такие параметры потенциала для G-волны, чтобы правильно описать величину S-фактора при энергии 4^+ резонанс. Если потенциал этой волны содержит одно ($V_G = 110.7$ МэВ, $\alpha_G = 0.127 \text{ fm}^{-2}$, ЗС: -13.6) или два ЗС ($V_G = 222.4$ МэВ, $\alpha_G = 0.127 \text{ fm}^{-2}$, ЗС: -42.8; -14.6), то расчетная величина пика 4^+ резонанса заметно уменьшается, а уменьшение числа ЗС до одного ($V_D = 254.8$ МэВ, $\alpha_D = 0.592 \text{ fm}^{-2}$, ЗС: -57.0) или вообще без ЗС ($V_D = 57.7833$ МэВ, $\alpha_D = 0.1 \text{ fm}^{-2}$) в связанном 1D состоянии не приводит к существенному увеличению S-фактора в области 4^+ резонанса.

Дополнительно были рассмотрены сечения E4 перехода из G-волны на основное 1S-состояние ядра ^{16}O и E1 перехода из G-волны на связанное 1F состояние – они оказались на несколько порядков меньше предыдущего E2 процесса.

Непрерывной линией на рис.7 приведена сумма всех трех E2 переходов, которая в целом описывает экспериментальное поведение астрофизического S-фактора при энергиях от 0.9 до 4.0 МэВ.

Наш расчетный S-фактор при 300 кэВ, обусловленный E2 процессом с переходом из D-волны на ОС ядра, оказывается равен 16.0 кэВ бн, а при 100 кэВ его величина несколько больше - 17.5 кэВ бн. Однако, эти результаты заметно меньше известных данных, приводящих, например, к $S_{E1} = 79(21)$ или $82(26)$ кэВ бн [21] и $S_{E2} = 120(60)$ кэВ бн [18], а методом генераторных координат [22], учитывающих различные кластерные конфигурации, получено $S_{E1} = 160$ кэВ бн и $S_{E2} = 70$ кэВ бн при 300 кэВ. Тем не менее, из имеющихся экспериментальных данных, приведенных на рис.7, не следует, что при энергиях ниже 1 МэВ S-фактор испытывает явный подъем и при 300 кэВ имеет значения порядка 100 кэВ бн.

Заключение

Таким образом, проведенный качественный анализ числа ЗС и РС в межклusterных взаимодействиях $^4\text{He}^{12}\text{C}$ системы и полученные на его основе парциальные потенциалы, согласованные с фазами упругого рассеяния и энергиями связанных состояний ядра ^{16}O , дают возможность приемлемого описания поведения астрофизического S-фактора при энергиях от 0.3 до 4.0 МэВ. Такой результат вполне можно рассматривать, как определенное свидетельство в пользу потен-

циального подхода в кластерной модели, когда межклusterные взаимодействия, содержащие ЗС, строятся на основе фаз упругого рассеяния кластеров, а каждая парциальная волна описывается своим потенциалом, например, гауссово-го вида с определенными параметрами.

Такое разделение общего взаимодействия по парциальным волнам позволяет детализировать его структуру, а даже качественная классификация орбитальных состояний по схемам Юнга, которая дает возможность определить наличие и количество запрещенных состояний, приводит к вполне определенной глубине взаимодействия, что позволяет избавиться от дискретной неоднозначности глубины потенциала, присущей оптической модели. Форма каждой парциальной фазы рассеяния может быть правильно описана только при определенной ширине такого потенциала, что избавляет нас от непрерывной неоднозначности, которая также имеет место в классической оптической модели.

Конечно, все сказанное верно только в случае точного определения фаз рассеяния из экспериментальных данных по упругому рассеянию. Однако, до настоящего времени, для большинства легчайших ядерных систем, фазы рассеяния найдены с довольно большими ошибками, которые иногда доходят до 20-30%. Это очень затрудняет построение точных потенциалов межклusterного взаимодействия и приводят, в итоге, к большим неоднозначностям в конечных результатах, получаемых в потенциальной кластерной модели. В данном случае, сказанное выше имеет отношение к некоторой неоднозначности потенциала $^4\text{He}^{12}\text{C}$ упругого рассеяния в D-волне.

ЛИТЕРАТУРА

1. Salpeter E.E. Nuclear Reactions in Stars // Phys. Rev., 1957, V.107, P.516; Salpeter E.E. Nuclear Reactions in Stars Without Hydrogen // Astrophys. Jour., 1952, V.115, P.326; Rolfs C. Nuclear reactions in stars far below the Coulomb barrier // Progress in Particle and Nuclear Physics 2007, V.59, P. 43; <http://www.shef.ac.uk/physics/teaching/phy320/topic5.html>; <http://astrolab.ru/cgi-bin/manager2.cgi?id=32&num=1512>; <http://www.proza.ru/2008/07/19/466>; <http://www.astronet.ru/db/msg/1171260>.

2. Schurmann et al., First direct measurement of the total cross section $^{12}\text{C}(^4\text{He},\text{g})^{16}\text{O}$ // ArXiv:nucl-ex/0511050v1, 29 Nov. 2005.

3. Dubovichenko S.B., Dzhazairov-Kakhramanov A.V. Astrophysical S-factor of the radiative $p^2\text{H}$ capture. // Euro. Phys. Jour. 2009, V.A39, №2, P.139-143; Дубовиченко С.Б.

Астрофизические S-факторы радиационного p^2H и p^3H захвата // Изв. ВУЗов, России, Сер. Физика, 2009, №3, С.68.

4. Neudatchin V.G. et al. Generalized potential - model description of mutual scattering of the lightest p^2H , $^2H^3He$ nuclei and the corresponding photonuclear reactions // Phys. Rev. 1992, V.C45, P.1512; Неудачин В.Г., Сахарук А.А., Смирнов Ю.Ф. Обобщенное потенциальное описание взаимодействия легчайших кластеров - рассеяние и фотоядерные реакции // ЭЧАЯ, 1993, Т.23, С.480; Неудачин В.Г., Стружко Б.Г., Лебедев В.М. Супермультиплетная потенциальная модель взаимодействия легчайших кластеров и единое описание различных ядерных реакций// ЭЧАЯ, 2005, Т.35, №4, С.890.

5. Дубовиченко С.Б. Свойства легких атомных ядер в потенциальной кластерной модели. Алматы: Данекер, 2004, 248 с.

6. Дубовиченко С.Б. Фотопроцессы в $^4He^{12}C$ канале ядра ^{16}O на основе потенциальной кластерной модели // ЯФ. 1996, Т. 59, С. 447.

7. Дубовиченко С.Б. Методы расчета ядерных характеристик. Алматы: Комплекс, 2006. 311с.

8. Неудачин В.Г., Смирнов Ю.Ф. Нуклонные ассоциации в легких ядрах. Москва: Наука, 1969. 414 с.

9. Tilley D.R., Weller H.R., Cheves C.M. Energy Levels of Light Nuclei A=16 // Nucl. Phys., 1993, V.A565, P.1.

10. Tilley D.R., H.R. Weller H.R. Energy Levels of Light Nuclei A = 4 // Nucl. Phys., 1992, V.A541, P.1.

11. Ajzenberg-Selove F. Energy level of light nuclei A = 12 // Nucl. Phys. 1990. V.A506. P.1.

12. Plaga R. et. al. The scattering of alpha particles from ^{12}C and the $^{12}C(a,g)^{16}O$ stellar reaction rate // Nucl. Phys. 1987. V.A465. P.291.

13. Jones C.M., et al. The scattering of alpha particles from ^{12}C // Nucl. Phys. 1962. V.37. P.1.

14. Дубовиченко С.Б., Буртебаев Н.Т., Джазаиров-Кахраманов А.В., Науменко Н.В., Зазулин Д.М. Фазовый анализ упругого $^4He^{12}C$ рассеяния при энергиях 1.5-6.5 МэВ. // Доклады НАН РК, 2008, №6, С.24.

15. Дубовиченко С.Б., Джазаиров-Кахраманов А.В. Электромагнитные эффекты в легких ядрах на основе потенциальной кластерной модели // ЭЧАЯ, 1997, Т. 28, С. 1529.

16. Fowler W.A., Caughlan G.R., Zimmerman B.A. Thermonuclear Reaction Rates, II // Ann. Rev. Astr. Astrophys., 1975, V.13, P.69.

17. <http://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Category?view=html&Atomic+and+nuclear.x=78&Atomic+and+nuclear.y=12>.

18. Angulo C. et al. A compilation of charged-particle induced thermonuclear reaction rates // Nucl. Phys., 1999, V.A656, P.3.

19. Kettner K.U. et al., The $^4He(^{12}C,g)^{16}O$ reaction at stellar energies // Z. Phys., Atom and Nucl., 1982, V.A308, P.73.

20. Dyer P., Barnes C.A. The $^{12}C(a,g)^{16}O$ reaction and stellar helium burning // Nucl. Phys., 1974, V.A233, P.495.

21. Asuma R.E. et al., Constraints on the low - energies E1 cross section of $^{12}C(a,g)^{16}O$ from the b - delayed a spectrum of ^{16}N // Phys. Rev., 1994, V.C50, P.1194.

22. Descouvemont P., Baye D. $^{12}C(a,g)^{16}O$ reaction in a multiconfiguration microscopic model // Phys. Rev., 1087, V.C36, P.1249.

Резюме

Потенциалды кластерлік үлгіде құат 0.1-4.0 МэВ болғандагы радиациялық $^4He^{12}C$ -қармаудың астрофизикалық S-факторын сипаттай мүмкіндігі қарастырылған.

Summary

The astrophysical S-factor of radiative $^4He^{12}C$ capture at energies 0.1-4.0 MeV was calculated within the frames of the potential cluster model.

*Астрофизический институт
им. В.Г. Фесенкова НЦ КИТ НКА РК,
г. Алматы*

Поступила 6.04.2009 г.

УДК 621.01

Г. УАЛИЕВ, А.А. ДЖОМАРТОВ

НАДЕЖНОСТЬ МАШИНЫ-АВТОМАТА И ЦИКЛОГРАММА ЕЕ МЕХАНИЗМОВ

Исследуется связь между надежностью машины-автомата выполненной на базе кулачковых и рычажных механизмов и циклограммой. Задача повышения надежности машины-автомата сводится к расширению фазовых углов срабатывания механизмов, снижающих ресурс её работы. Разработана математическая модель циклограммы машины-автомата с возможностью варьирования фазовых углов срабатывания механизмов.

С точки зрения надежности машины-автоматы относятся к сложным системам с последовательным соединением элементов. Выход из строя любого приводит к останову всей машины. Согласно теории вероятности коэффициент надежности H сложной машины-автомата выражается произведением коэффициентов надежности H_i отдельных составляющих ее n -механизмов

$$H = \prod_{i=1}^n H_i \quad (1)$$

Из (1) видно, что надежность машины всегда меньше надежности самого ненадежного механизма, поэтому важно не допустить в систему ни одного слабого механизма. Уровень надежности машины-автомата характеризуется простыми, которые разделяются на четыре группы, t_1 – технологические, t_2 – механические, t_3 – простой, связанные с планово-предупредительными работами, t_4 – организационные простой.

Будем рассматривать повышение надежности машины-автомата только за счет уменьшения простоев группы t_2 . Главной причиной данных простоев является недостаточная долговечность деталей механизмов машины-автомата и чрезмерный их износ. Причина того, что долговечность деталей машин конечна, заключается в том, что они (подшипники, зубчатые передачи, кулачковые механизмы и т.д.) подвержены контактным разрушениям усталостного характера. Даже в точно рассчитанных деталях машины-автомата, при условии их нормальной смазки усталостные разрушения ведут к сокращению полезного срока их службы [1,2]. В результате изменений нагрузки и скорости в деталях механизмов обычно возникают циклические напряжения, поэтому для большинства механизмов машины-автомата усталостные контактные раз-

рушения считаются основным видом разрушения. Переменные контактные напряжения вызывают усталость поверхностных слоев деталей. На поверхности образуются микротрешины с последующим выкрашиванием мелких частиц металла. Кривые выносливости по контактным напряжениям подобны кривым выносливости по напряжениям изгиба, растяжения, сжатия и т.д. [2].

По кривой выносливости можно определить предел контактной выносливости σ_0 , соответствующий заданному числу циклов N_0 в соответствии с рисунком 1. Для того, чтобы определить число циклов, выдерживаемых механизмом по соответствующей кривой выносливости, необходимо определить максимальные контактные напряжения в механизмах. Большинство машин-автоматов с централизованной системой управления содержат в своем составе в основном кулачковые механизмы. В высших парах кулачковых механизмов, контакт звеньев теоретически осуществляется по точке или по линии, а практически по пятну или полоске. При этом в зоне контакта возникают значительные удельные давления и точки максимальных нормальных напряжений располагаются по продольной оси симметрии контактной площадки. Величину этих напряжений в зоне контакта двух цилиндрических поверхностей определяют по формуле Герца-Беляева.

После того, как по кривой долговечности определено количество циклов N_i , выдерживаемое i -м механизмом, ее сравнивают с базовым числом циклов N_0 . Базовое число циклов определяется из среднего срока службы машины до капитального ремонта. Если $N_i < N_0$, то механизм является недостаточно долговечным, что снижает надежность машины. Случай $N_i > N_0$ говорит о том, что данный механизм обладает чрезмерной долговечностью.

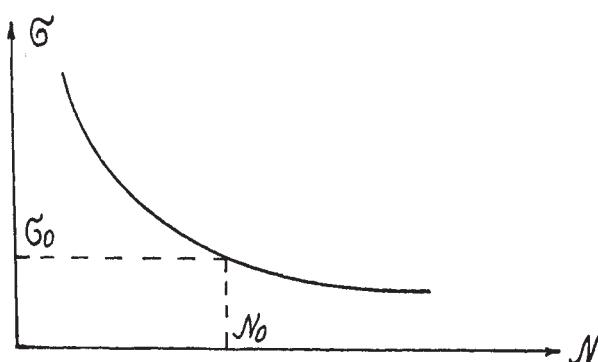


Рис. 1. Кривая выносливости по контактным напряжениям

В данной работе будем исследовать повышение надежности машины-автомата выполненной на базе кулачковых и рычажных механизмов, таких, как ткацкие станки, полиграфические машины и.т.д. В таких машинах, как показывает практика, существенное влияние на надежность оказывают высшие пары кулачковых механизмов.

Для создания надежной машины-автомата необходимо, выполнение следующего условия:

$$N_i \rightarrow N_0, \quad i=1, n \quad (2)$$

Для выполнения условия (2) необходимо уменьшить максимальные контактные напряжения в высшей паре кулачкового механизма. В

кулачковых механизмах контактные напряжения зависят от радиуса кривизны профиля кулачка, который в свою очередь зависит от величины фазового угла срабатывания механизма. Значит для того, чтобы уменьшить контактные напряжения в кулачковом механизме, при заданных ходах необходимо расширить фазовые углы срабатывания механизма по циклограмме. И, следовательно, условие (2) сводится к расширению фазовых углов срабатывания механизмов. Тогда задача повышения надежности машины-автомата с централизованной системой управления сводится к расширению фазовых углов срабатывания механизмов, снижающих ресурс её работы. Для того, чтобы иметь возможность варьирования фазовыми углами срабатывания механизмов необходимо получить математическую модель их циклограммы.

Для получения математической модели о взаимодействии механизмов машины-автомата друг с другом введем вместо отрезков линейной циклограммы вектора (рисунок 2). последовательно соединенные между собой, причем вектора направлены последовательно от одного положения к другому – обозначим вектора буквой \vec{l}_{ij} , n – число механизмов, i – номер механизма, j – номер положения i -го механизма, m_i – число положений i -го механизма. Причем проекция век-

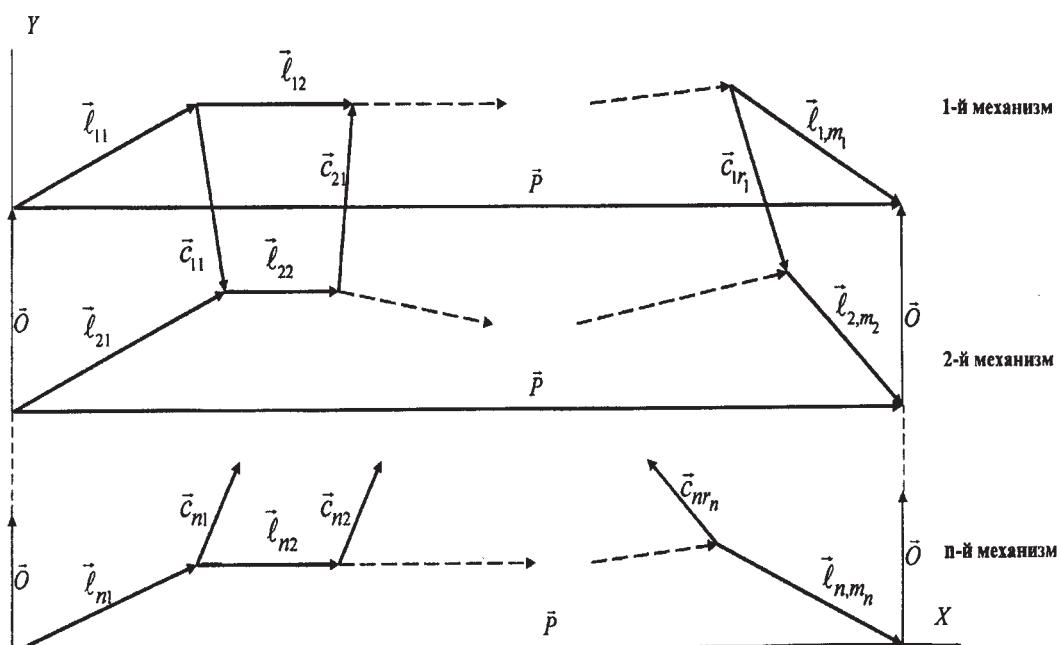


Рис. 2. Векторная модель циклограммы машины-автомата

торов $\overline{\ell_{ij}}$ на ось X характеризует α_{ij} – фазовые углы срабатывания механизмов, а проекция на ось Y указывает величину хода δ_{ij} j -го положения i -го механизма, которую вводим как безразмерную величину

$$\delta_{ij} = \frac{S_{ij}}{S_{\max}}, i = \overline{1, n}; j = \overline{1, m_i},$$

где S_{ij} – ход j -го положения i -го механизма (размерная величина);

$$S_{\max} = \max S_{ij}.$$

Введем вектор \overline{P} соединяющий точки начала и конца цикла. Проекция вектора \overline{P} на ось X равна 2π , на ось Y равна нулю. Взаимодействие механизмов друг с другом отразим в виде векторов связи $\overline{c_{ik}}$, где $k = \overline{1, R_i}$, R_i – число векторов связи i -го механизма выходящих из какого либо j -го положения.

При исследовании циклограммы машины-автомата необходимо учитывать технологические и конструктивные ограничения, т.е. точность изготовления и работы механизмов, а также взаимосвязь работы механизмов между собой. Взаимосвязь работы механизмов отразим в виде векторов связи $\overline{c_{ik}}$, где $k = \overline{1, R_i}$, R_i – число векторов связи i -го механизма, направление которых указывает на последовательность срабатывания механизмов. Проекция векторов связи на ось X характеризует величину запаздывания срабатывания механизма, а проекция на ось Y – разность между максимальными перемещениями механизмов.

Наложим циклограммы механизмов друг на друга при помощи нулевых векторов $\overline{0}$ (рисунок 2) соединяющих граничные точки циклограммы механизмов по оси Y.

Составим систему векторных уравнений, описывающих работу механизмов машины-автомата (рисунок 2).

$$\sum_{j=1}^{m_i} \overline{\ell_{ij}} = \overline{P}, i = \overline{1, n} \quad (3)$$

$$\overline{c_{ik}} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij} \cdot \overline{\ell_{ij}}, \quad (4)$$

где $b_{ii} \in \{0, \pm 1\}$.

Векторные уравнения (3) и (4) описывают совместную работу механизмов машины-автомата. Спроектируем векторные уравнения (3) и (4) на оси X и Y.

$$\left. \begin{aligned} \sum_{j=1}^{m_i} \alpha_{ij} &= 2\pi, i = \overline{1, n}, j = \overline{1, m_i} \\ \sum_{j=1}^{m_i} \delta_{ij} &= 0, \\ c_{ik}^x &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij} \alpha_{ij}, k = \overline{1, R_i} \\ c_{ik}^y &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} b_{ij} \delta_{ij}, k = \overline{1, R_i} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

На фазовые углы срабатывания механизмов α_{ij} накладываем ограничения

$$\alpha_{ij} \geq \alpha_{ij}^m \quad (6)$$

где α_{ij}^m – минимально допустимые фазовые углы срабатывания, определяемые из условия работоспособности механизмов. На ход механизмов накладываем ограничения типа

$$\delta_{ij}^a \geq \delta_{ij} \geq \delta_{ij}^u, \quad (7)$$

где $\delta_{ij}^a, \delta_{ij}^u$ – верхний и нижний пределы назначаемые конструктором.

На проекции векторов связи накладываем ограничения

$$\begin{aligned} c_{ik}^{xu} &\geq c_{ik}^x \geq c_{ik}^{xh} \\ c_{ik}^{yu} &\geq c_{ik}^y \geq c_{ik}^{yh} \end{aligned} \quad (8)$$

где $c_{ik}^{xh} = e_{ik}^x + \Delta c_{ik}^x$, $c_{ik}^{yh} = e_{ik}^y + \Delta c_{ik}^y$; e_{ik}^x, e_{ik}^y – минимально допустимые проекции векторов связи, определяемое из технологических условий, $\Delta c_{ik}^x, \Delta c_{ik}^y$ – погрешность проекции векторов связи, c_{ik}^{xu}, c_{ik}^{yu} – верхние ограничения накладываемые конструктором.

Уравнения (5) и ограничения (6-8) описывают совместную работу механизмов (циклограмму) машины-автомата.

При установившемся движении машины-автомата с централизованной системой управления распределительный вал вращается с постоянной скоростью $\omega = const$, тогда возможен пе-

реход к временам срабатывания механизмов t_{ij} по формуле $t_{ij} = \frac{\alpha_{ij}}{\omega}$, а период цикла $T = \frac{2\pi}{\omega}$.

Окончательно задача повышения надежности машины-автомата сводится к следующей оптимизационной задаче:

$$\alpha_{ij} \rightarrow \max, \quad i \in I^0; j \in J^0, \quad (9)$$

с учетом уравнения (5) и ограничений (6-8) и при условии $\delta_{ij} = const.$

Задача (9) является многокритериальной задачей линейного программирования. Для её решения используем один из известных методов решения многокритериальных задач. Построим следующую целевую функцию в виде линейной комбинации исходных функций

$$F(\bar{\alpha}) = \sum_{i \in I^0} \sum_{j \in J^0} W_{ij} \alpha_{ij} \quad (10)$$

Здесь W_{ij} – неотрицательные весовые коэффициенты, отражающие относительную важность максимизации различных целевых функций. Задача многокритериальной оптимизации приобретает вид

$$F(\bar{\alpha}) \rightarrow \max \quad (11)$$

с учетом уравнения (5) и ограничений (6-8).

Этот метод обладает тем преимуществом, что в нем рассматриваются только оптимальные конструкции, но здесь могут возникнуть трудности, связанные с определением весовых коэффициентов.

Для определения весовых коэффициентов W_{ij} , характеризующих относительную значимость расширяемого фазового угла предлагается следующий алгоритм;

1. По заданному сроку службы T_k – машины-автомата до первого капитального ремонта определяют число циклов N_0 , соответствующее T_k . Полученное N_0 будет являться базовым числом циклов для расчета кривой выносливости по контактным напряжениям. Для каждого кулачкового механизма в зависимости от материала, из которого изготовлена высшая пара, получают кривые долговечности либо экспериментальным путем, при помощи приближенных теоретических формул [2]. Из графика $N_i = N_i(\sigma_i)$, определяют базовые пределы контактной выносливости

ти σ_i^0 , i -го механизма, соответствующие базовому числу

2. Для каждого j -го положения i -го механизма зададим начальные значения α_{ij} и построим следующий итерационный процесс

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{ij}^{(r)} &= \alpha_{ij}^{(r-1)} + h, \quad r = \overline{1, R}, \quad i \in I^0, \quad j \in J^0, \\ \sigma_{ij}^{(r)} &= \max_{k \in [k_j, k_{j+1}]} \sigma(k, \alpha_{ij}^{(r)}) \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

где h – заданный шаг, k – безразмерный коэффициент, σ – функция контактных напряжений.

В результате окончания процесса (12) получаем для каждого значения i и j табличные значения $\alpha_{ij}^{(r)}$ и соответствующие им $\sigma_{ij}^{(r)}$

3. Построим кубические сплайны

$\alpha_{ij} = S_{ij}(\sigma_{ij})$ по табличным точкам.

4. Из полученных кубических сплайнов по заданному значению σ_i^0 определяем соответствующие им фазовые углы α_{ij}^d

5. Вычисляем следующую разность

$$A_{ij} = \alpha_{ij}^d - \alpha_{ij}^{\min}$$

6. Определим весовые коэффициенты W_{ij}

$$W_{ij} = \frac{A_{ij}}{\sum_{i \in I^0} \sum_{j \in J^0} A_{ij}}$$

В результате решения задачи (11) получаем оптимальную циклограмму движения механизмов машины-автомата. Здесь возникают следующие трудности: в общем случае невозможно добиться, чтобы все фазовые углы расширились до требуемого нам значения. Поэтому на этом этапе алгоритма требуется вмешательство проектировщика. Проектировщик из анализа ремонтопригодности и стоимости механизма, времени его замены при отказе назначает дополнительные поправки к весовым коэффициентам

$$W_{ij}^* = W_{ij} \pm \Delta_{ij} \quad (13)$$

где значение Δ_{ij} и его знак в выражении (13) определяет проектировщик. Затем решается задача (11) и полученные новые значения фазовых углов сравниваются с требуемыми. Если значения их не удовлетворяют требованиям проектировщика, то снова вводятся поправки (13) и решается задача (11).

Разработанная математическая модель циклограммы машины-автомата позволяет повысить надежность работы отдельных механизмов, путем варьирования их фазовых углов срабатывания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Miner M.A. Cumulative damage in fatigue. ASME. Journal of applied mechanics. Vol. 67, 1945, pp. A169-F164.
2. Srivastava A.K., Newcombe W.R. Synthesis of couple curves by multifactor optimization. ASME. Paper № 73-WA/DE-14, 1973.

Резюме

Жұдырықты және рычагты механизмдер мен циклограмма негізінде орындалатын машина-автоматтардың арасындағы байланыс зерттеледі. Машина-автоматтар-

дың сенімділігін арттыру мәселесі оның жұмыс ресурсын төмендететін механизмдерді іске косатын фазалық бұрыштың кеңеуіне әкеп соғады. Механизмдерді іске косатын фазалық бұрыштарды өзгерту мүмкіншілігі арқылы машина-автомат циклограммасының математикалық моделі жасалды.

Summary

The connection between reliability of the machine - automaton device executed on base cams and lever mechanisms and cyclogramm is investigated. The task of increase of reliability of the machine - automaton device is reduced to expansion phase angles of operation of mechanisms lowering a resource its work. The mathematical model cyclogramm of the machine - automaton device with an opportunity of a variation of phase angles of operation of mechanisms is developed.

ИММаш МОН РК им. Джолдасбекова

г. Алматы

Поступила 15.05.09 г.

УДК 521.01

Б.К. СИНЧЕВ

ОПТИМИЗАЦИОННЫЙ СИНТЕЗ МЕХАНИЗМОВ

(Представлена академиком НАН РК Г.У.Уалиевым)

В работе предложен новый точный метод кинематического синтеза механизмов.

Из обширного круга задач кинематического синтеза различных механизмов можно выделить задачи воспроизведения точного или приближенного закона движения или заданной траектории (точки) выходного звена при определенном законе движения входного звена. При исследовании динамической модели механизма возникают задача Коши и краевые задачи для дифференциальных и других уравнений, описывающих движение звеньев с учетом массо-инерционных характеристик и других факторов. Для краевых задач произвольная траектория должна пройти через заданные начальную и конечную точки, а для задачи Коши – через начальную. Эти задачи тесно связаны с вышеуказанными задачами.

В интерполяционных методах кинематического синтеза на основе обобщенного полинома поиск искомых параметров рычажного механизма зависит от числа положений входного и выходного звеньев. Н.И. Левитским в [1] установлено, что для синтеза передаточного четырехзвенного механизма необходимо задать три по-

ложения входного и выходного звеньев, а в случае задания двух положений этих звеньев задача синтеза будет иметь бесчисленное количество возможных решений. Современные методы кинематического синтеза четырехзвенных механизмов [2,3], основанные на аппроксимационном подходе и квадратическом приближении, сводятся к решению системы квадратных уравнений либо к итерационной процедуре решения нескольких систем линейных уравнений, в которых трудно выбрать начальные значения искомых параметров. В работе [4] предложен численный метод кинематического синтеза рычажных механизмов.

Ставится задача. Разработать точный метод кинематического синтеза четырехзвенных механизмов с различными кинематическими параметрами на основе методов оптимизации.

Решение задачи. Кинематическая схема четырехзвенного механизма, представленная на рисунке 1, описывается векторным уравнением

$$\bar{l}_1 + \bar{l}_2 + \bar{l}_3 - \bar{l}_0 = 0, \quad (1)$$

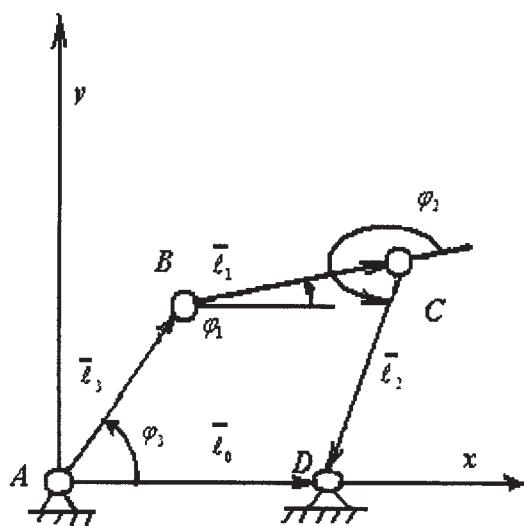


Рис. 1.Кинематическая схема четырехзвенного механизма

где \bar{l}_0 , \bar{l}_1 , \bar{l}_2 и \bar{l}_3 – вектора, связанные с основанием неподвижной системы координат, шатуном, входным и выходным звеньями механизма соответственно. Здесь вектор $\bar{l}_i = l_i \bar{e}_i$.

Тогда исходная задача формулируется следующим образом: определить длины звеньев l_i , $i=0,1,2,3$ передаточного четырехзвенного механизма по двум положениям выходного и входного звеньев:

$$\bar{e}_2 = \bar{e}_2(t), \bar{e}_3 = \bar{e}_3(t) \text{ при } t_0 \text{ и } t_1. \quad (2)$$

Здесь движения этих звеньев определены через единичные вектора по времени t , $t \in [t_0, t_1]$. Такая постановка задачи дает возможность показать связь с краевой задачей.

Вводим функционал, основанный на уравнении (1),

$$I = 1 + z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 + 2z_1z_2\bar{e}_1\bar{e}_2 + \\ + 2z_1z_3\bar{e}_1\bar{e}_3 + 2z_2z_3\bar{e}_2\bar{e}_3 - \\ - 2z_1\bar{e}_0\bar{e}_1 - 2z_2\bar{e}_0\bar{e}_2 - 2z_3\bar{e}_0\bar{e}_3, \quad (3)$$

где $z_i = l_i/l_0$.

Необходимые условия минимума функционала (3) по параметрам z_i имеют вид:

$$\frac{\partial I}{\partial z_i} = 0, \quad i = \overline{1, 3}. \quad (4)$$

Из (4) имеем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} z_1 + \bar{e}_1\bar{e}_2z_2 + \bar{e}_1\bar{e}_3z_3 - \bar{e}_0\bar{e}_1 = 0 \\ \bar{e}_1\bar{e}_2z_1 + z_2 + \bar{e}_2\bar{e}_3z_3 - \bar{e}_0\bar{e}_2 = 0 \\ \bar{e}_1\bar{e}_3z_1 + \bar{e}_2\bar{e}_3z_2 + z_3 - \bar{e}_0\bar{e}_3 = 0 \end{cases} \quad (5)$$

где $\bar{e}_i\bar{e}_j$ – скалярное произведение единичных векторов.

В первую очередь, необходимо проверить независимость уравнений системы (5) на основе определителя

$$|A| = 1 + 2\bar{e}_1\bar{e}_2 \cdot \bar{e}_2\bar{e}_3 \cdot \bar{e}_1\bar{e}_3 - (\bar{e}_1\bar{e}_3)^2 - (\bar{e}_2\bar{e}_3)^2 - (\bar{e}_1\bar{e}_2)^2. \quad (6)$$

Надо отметить, что в общем случае число базисных уравнений этой системы совпадает с числом исходных уравнений кинематики (1). В частности, число базисных уравнений для плоского четырехзвенного механизма равно двум. Тогда приравненный к нулю определитель (6) имеет вид:

$$1 + 2\bar{e}_1\bar{e}_2 \cdot \bar{e}_2\bar{e}_3 \cdot \bar{e}_1\bar{e}_3 - (\bar{e}_1\bar{e}_3)^2 - (\bar{e}_2\bar{e}_3)^2 - (\bar{e}_1\bar{e}_2)^2 = 0. \quad (7)$$

Нетрудно проверить тождественное выполнение соотношения (7). Поэтому для поиска единичного вектора $\bar{e}_1(t)$ уравнение (7) использовать нельзя. Предлагается следующий математический способ отыскания этого вектора. Для этого разобьем систему (5) на три подсистемы (8), (9) и (10):

$$\begin{aligned} z_2 + \bar{e}_2\bar{e}_3z_3 &= \bar{e}_0\bar{e}_2 - \bar{e}_1\bar{e}_2z_1, \\ \bar{e}_2\bar{e}_3z_2 + z_3 &= \bar{e}_0\bar{e}_3 - \bar{e}_1\bar{e}_3z_1, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\bar{e}_1\bar{e}_2z_2 + \bar{e}_1\bar{e}_3z_3 = \bar{e}_0\bar{e}_1 - z_1, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} z_2 + \bar{e}_2\bar{e}_3z_3 &= \bar{e}_0\bar{e}_2 - \bar{e}_1\bar{e}_2z_1, \\ \bar{e}_2\bar{e}_3z_2 + z_3 &= \bar{e}_0\bar{e}_3 - \bar{e}_1\bar{e}_3z_1, \\ \bar{e}_1\bar{e}_2z_2 + \bar{e}_1\bar{e}_3z_3 &= \bar{e}_0\bar{e}_1 - z_1. \end{aligned} \quad (10)$$

Такое разбиение на подсистемы возможно из-за указанного числа базисных уравнений (1), а для нахождения длин звеньев четырехзвенного механизма достаточно рассмотрения двух подсистем.

Тогда из подсистемы (8) определяем неизвестные z_2 , z_3

$$z_2 = \frac{\bar{e}_0\bar{e}_2 - \bar{e}_1\bar{e}_2z_1 - (\bar{e}_0\bar{e}_3 - \bar{e}_1\bar{e}_3z_1)\bar{e}_2\bar{e}_3}{1 - (\bar{e}_2\bar{e}_3)^2}, \quad (11)$$

$$z_3 = \frac{e_0 e_3 - e_1 e_3 z_1 - e_2 e_3 (e_0 e_2 - e_1 e_2 z_1)}{1 - (e_2 e_3)^2}, \quad (12)$$

а также из (9) – эти же неизвестные

$$z_2 = \frac{(e_0 e_1 - z_1) e_2 e_3 - (e_0 e_2 - e_1 e_2 z_1) e_2 e_3}{e_1 e_2 e_3 - e_1 e_3}, \quad (13)$$

$$z_3 = \frac{e_1 e_2 (e_0 e_2 - e_1 e_2 z_1) - (e_0 e_1 - z_1)}{e_1 e_2 * e_2 e_3 - e_1 e_3}. \quad (14)$$

Приравнивая (11) и (13), имеем

$$Z_1 = \frac{A(e_0 e_1 \cdot e_2 e_3 - e_0 e_2 \cdot e_1 e_3) - (e_0 e_2 - e_0 e_3 \cdot e_2 e_3)B}{(e_1 e_3 \cdot e_2 e_3 - e_1 e_2)B - (e_1 e_2 \cdot e_1 e_3 - e_2 e_3)A}, \quad (15)$$

соответственно – (12) и (14)

$$Z_1 = \frac{(e_0 e_2 \cdot e_1 e_2 - e_0 e_1)A - (e_0 e_3 - e_0 e_2 \cdot e_2 e_3)B}{(e_1 e_2 \cdot e_2 e_3 - e_1 e_3)B - (1 - (e_1 e_2)^2)A}, \quad (16)$$

где $A = 1 - (e_2 e_3)^2$, $B = e_1 e_2 \cdot e_2 e_3 - e_1 e_3$.

На основе формул (15) и (16) получим нелинейное уравнение для нахождения единичного вектора $\bar{e}_1(t)$

$$\begin{aligned} & [A(e_0 e_1 \cdot e_2 e_3 - e_0 e_2 \cdot e_1 e_3) - (e_0 e_2 - e_0 e_3 \cdot e_2 e_3)B] \times \\ & \times [(e_1 e_2 \cdot e_2 e_3 - e_1 e_3)B - (1 - (e_1 e_2)^2)A] = \\ & = [(e_1 e_3 \cdot e_2 e_3 - e_1 e_2)B - (e_1 e_2 \cdot e_1 e_3 - e_2 e_3)A] \times \\ & \times [(e_0 e_2 \cdot e_1 e_2 - e_0 e_1)A - (e_0 e_3 - e_0 e_2 \cdot e_2 e_3)B]. \end{aligned} \quad (17)$$

Подсистема (10) может быть использована для дополнительного исследования уравнения (17).

Для четырехзвенного механизма с вращательными парами достаточно представить единичные векторы \bar{e}_i в следующем виде:

$$\bar{e}_i(t) = \begin{pmatrix} \cos & \varphi_i(t) \\ \sin & \varphi_i(t) \end{pmatrix} \quad (18)$$

Из уравнения (17) находится единичный вектор (нули функции)

$$\bar{e}_1(t) = \bar{f}(\bar{e}_2(t), \bar{e}_3(t)), \quad (19)$$

где \bar{f} – известная векторная функция.

Надо отметить, что во многих случаях вектор $\bar{e}_0(t)$ имеет постоянное значение, так как он в большей степени жестко связан с основанием четырехзвенного механизма, т.е.

$$\bar{e}_0(t) = const, t \in [t_0, t_1]. \quad (20)$$

Для учета соотношения (20) достаточно повернуть неподвижную систему координат, связанную с механизмом, на этот угол.

После нахождения единичного вектора (19) определяем длины звеньев l_i на базе формул (15),(11),(12) либо (16),(13),(14).

В качестве примера рассмотрен четырехзвенный механизм с вращательными парами: $l_0=10.4\text{cm}$, угловые координаты коромысла и кривошипа $\varphi_2^1 = 240^\circ$, $\varphi_3^1 = 45^\circ$ соответственно, $\varphi_0^1 = 0^\circ$ для первого положения и аналогично для второго положения $\varphi_2^2 = 253^\circ$, $\varphi_3^2 = 60^\circ$, $\varphi_0^2 = 0^\circ$. Угловые координаты шатуна для первого и второго положений $\varphi_1^1 = 10^\circ$, $\varphi_1^2 = 9^\circ$ определены из уравнения (17) при вышеуказанных значениях угловых координат входного и выходного звеньев механизма. Тогда длины звеньев механизма, найденные из линейной системы (15),(11) и (12) равны $l_1=10\text{cm}$, $l_2=5\text{cm}$, $l_3=4\text{cm}$. с незначительными отклонениями соответственно. Результаты проверены путем геометрического построения четырехзвенного механизма с найденными длиными звеньями и заданными углами кривошипа и коромысла.

Кинематический синтез передаточного механизма с поступательной парой (кривошипно – ползунный механизм) осуществляется аналогично. Для этого достаточно соотношения (18) переписать следующим образом:

$$\varphi_2 = \varphi_2(t), \quad l_3 = l_3(t), \quad \varphi_3 = const$$

Процедуры синтеза кулисного передаточно-го механизма эквивалентны по сложности с синтезом кривошипно-ползунного механизма.

В заключение можно отметить, что разработан точный метод синтеза передаточных четырехзвенных механизмов с различными кинематическими парами. Предложенный подход кинематического синтеза механизмов базируется на методах оптимизации и геометрических свойствах многоугольников. Эффективность данного метода по сравнению с известными методами кинематического синтеза передаточных механизмов заключается в меньшем задании количества положений входного и выходного звеньев, а достоинством – является то, что длины звеньев механизма определяются из системы линейных

уравнений, основанной на исходных уравнениях кинематики. Предложено новое направление в кинематическом синтезе, отличное от интерполяционного, квадратического и аппроксимационного подходов, – оптимизационный синтез механизмов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Артоболевский И.И. Теория механизмов и машин.- М.:Наука,1982.-640с.
2. Артоболевский И.И., Левитский Н.И., Черкудинов С.А. Синтез плоских механизмов. –М: Гос. изд-во физ.-мат. литературы, 1959. -1084с.
3. Саркисян Ю.Л. Аппроксимационный синтез механизмов. – М.: Наука, 1982. – 304 с.

4. Синчев Б.К. , Муханова А.М., Тажибахым Г.С. Кинематический синтез механизмов. Труды Международной научно-практической конференции «Инновационные технологии в пищевой и легкой промышленности» -Алматы: АТУ, 2008. с.156-160

Резюме

Механизмнің кинематикалық синтезінің жана нақты әдістері ұсынылған.

Summary

New exact method of kinematical synthesis of mechanisms has been proposed in the paper.

Алматинский технологический университет

Поступила 04.04.09 г.

УДК:532.783:541.1:539.21:535.37

З.М.МУЛДАХМЕТОВ, М.Е.АГЕЛЬМЕНЕВ,
С.М.БРАТУХИН, В.В.ПОЛИКАРПОВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЗОГЕННЫХ СИСТЕМ В УСЛОВИЯХ ЖИДКОЙ ФАЗЫ

В работе представлены проблемы и преимущества компьютерного моделирования поведения нематических жидкых кристаллов в условиях жидкого агрегатного состояния. Показана методология использования такого подхода при предсказании температур фазовых переходов на возможном жидкокристаллическом соединении.

В работе рассматривается проблема выбора условий моделирования мезогенных систем, обладающих дальней ориентационной упорядоченностью в жидком агрегатном состоянии.

При атомистическом подходе равновесное время моделирования в молекулярной динамике лежит в пределах от 600 пс до 1÷2 нс [1]. Имеются исследования при временах и больших указанного интервала, но они посвящены исследованию небольшого количества температурных точек, что не позволяет эффективно предсказывать температуры фазовых переходов. Необходимо отметить, что при этом моделирование совершается с заданием граничных условий путем размещения каждой из молекул в отдельную ячейку.

Однако последнее противоречит реальности исследуемого объекта, находящегося в мезофазе в жидком агрегатном состоянии, когда присутствует только ориентационная упорядоченность, при этом ни о какой пространственной периодической упорядоченности говорить не приходится.

В то же время вопрос о получении практически значимых соединений является краеугольным в материаловедении электронных материалов. Результаты моделирования в таком приближении некоторых нематических жидких кристаллов на основе арилпропаргиловых эфиров фенолов (АПЭФ) показывают хорошую корреляцию с экспериментальными данными [2-4]. В этом смысле интересна предсказательная сила такого подхода, что собственно составляет основной интерес к использованию метода молекулярной динамики.

Целью настоящей работы является выяснение условий моделирования поведения кластеров

нематических жидкых кристаллов, расположенных в одной ячейке, а также определение температур фазового перехода на гипотетическом соединении АПЭФ, исследованном теоретически в [5].

Для проведения данной работы был использован известный набор программ GROMACS [6,7], версии 3.3.2 [8], предназначенный для моделирования поведения молекулярных систем при изменении температуры и давления. Термодинамические характеристики образования центральных молекул кластера рассчитывались с помощью квантовохимического метода MNDO. Распределение молекул по энергии по расстоянию от центра кластера соответствовало суммарной энергии всех молекул, находящихся в данном сегменте. Указанное расстояние соответствует большему радиусу сегмента относительно ранее определенного центра. Это потребовало создания специальной программы. Значения термодинамических параметров определялись в рамках GROMACS. Центр кластера определялся путем нахождения координат молекул, имеющих максимальные и минимальные значения.

Методики создания исходного кластера, проведение эксперимента и анализа полученных результатов описаны в [2-4].

1. Особенности моделирования в жидком агрегатном состоянии

В качестве объектов исследования были использованы нематические жидкые кристаллы с отрицательными значениями диэлектрической анизотропности – модельная молекула 4-метоксибензилиден-4'-бутиланилин (температура плавления – 294К, температура просветления – 320К) [9] (МББА) и молекула фенилпропаргилового

Таблица 1. Термодинамические характеристики молекул МББА и ФЭФ, подвергнутых отжигу при различной длительности воздействия

МББА			ФЭФ		
состояние	$\Delta_f H$, ккал/моль	d, Дебай	состояние	$\Delta_f H$, ккал/моль	d, Дебай
Исходная молекула	31,66882	2,657	Исходная молекула	0,73524	3,568
Молекула -отжиг 10 пс	138,16021	3,348	Молекула -отжиг 10 пс	40,15207	2,891
Молекула - отжиг 850 пс	122,99048	3,157	Молекула - отжиг 850 пс	34,50985	3,335

Таблица 2. Некоторые характеристики кластеров (степень упорядоченности S , информационная энтропия S_{int} , энергии связи E_{cv} , коэффициент самодиффузии молекулы k , находящейся в центре кластера), подвергнутых отжигу при 10 и 850 пс

молекула/ время	10 пс				850 пс			
	S , отн.ед.	S_{int} , отн.ед.	E_{cv} , кДж/моль	k , нм ² /с	S , отн.ед.	S_{int} , отн.ед.	E_{cv} , кДж/моль	k , нм ² /с
МББА	0,22	4,52	41329	2	0,02	4,58	44378	26
ФЭФ	0,40	4,51	34343	16	0,00	4,59	37079	2

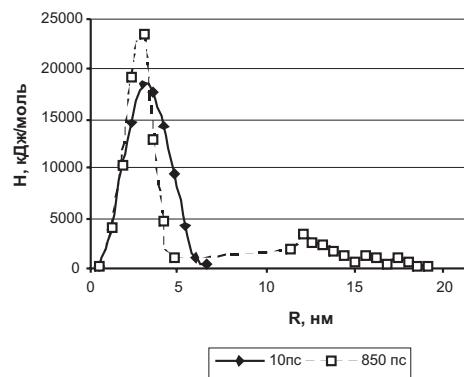
эфира п-фторфенола (температура плавления – 306К, температура просветления – 326К) (ФЭФ)[10].

Были проведены эксперименты по компьютерному моделированию поведения кластеров с молекулами, размещенными в одной ячейке при различных временах моделирования – 10 и 850 пс. Молекулы были ориентированы планарно по отношению к подложке. Направление директора соответствовало оси OY, ось OZ была перпендикулярна плоскостям XOY, в которых располагались молекулы. Общий размер кластеров составлял прямоугольник 7x7x8 молекул, при этом одна из крайних плоскостей XOY была выбрана в качестве подложки. Отжигаемые молекулы

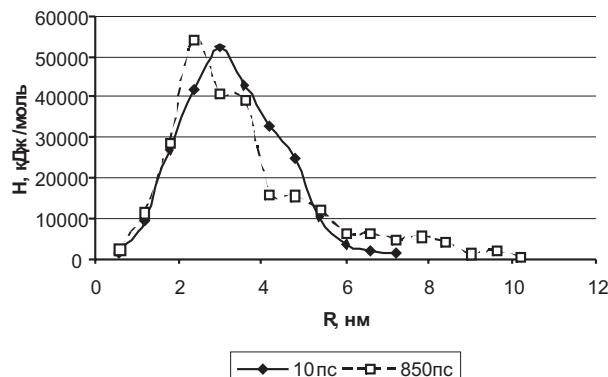
составляли куб с размерами 7x7x7 молекул относительно подложки. Отжиг кластеров с молекулами МББА проводился при температуре 250К, а с молекулами ФЭФ – при 300К.

Результаты исследований представлены в Таблицах 1-2 и Рисунках 1-2.

Как видно из таблицы 1, в результате отжига при температуре, соответствующей кристаллическому состоянию, происходит изменение геометрии исходных молекул. Это проявляется в изменении теплоты образования и дипольного момента молекул, что подтверждает важность учета межмолекулярного взаимодействия при исследовании физико-химических свойств мезогенных соединений. Увеличение времени отжига



МББА



ФЭФ

Рис. 1. Радиальное распределение молекул по теплоте образования молекул кластеров, состоящих из МББА и ФЭФ

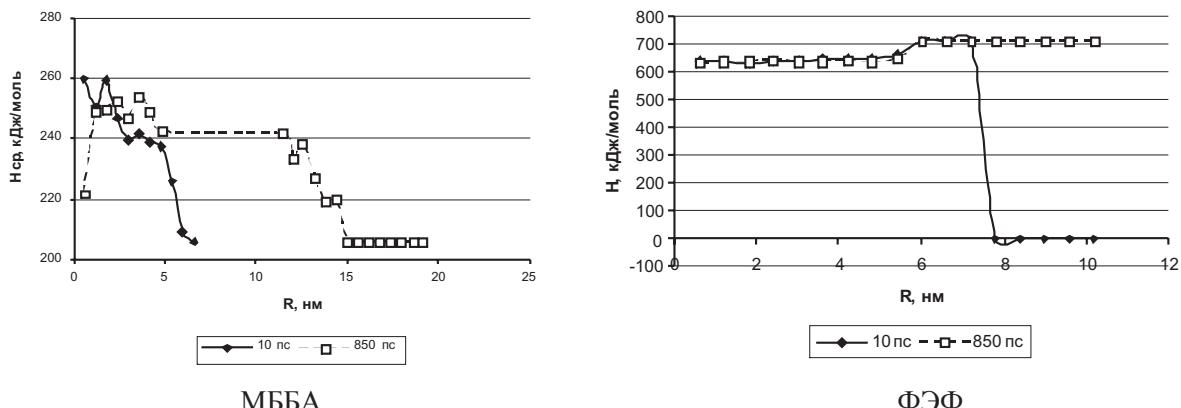


Рис. 2. Радиальное распределение молекул по теплоте образования одной молекулы в кластерах, состоящих из МББА и ФЭФ

приводит к росту значений дипольного момента, сдвигая его к значениям исходной молекулы.

Теплоты образования в случае отжигов имеют сравнимые значения, разница между ними достигает 15 – 6 ккал/моль. Полученная разница между значениями теплоты образования для 10 пс и 850 пс сравнима с различием в теплоте образований конформаций органических соединений. Можно утверждать, что точное задание внутренних характеристик, в частности торсионных углов, длин связей, зарядового состояния, является определяющим при проведении компьютерного моделирования кластера, молекулы которого располагаются в одной ячейке.

Были получены зависимости радиального распределения молекул по теплоте образования $H(R)$ (рис.1) и их усредненных значений $H_{cp}(R)$ (рис.2).

Из радиального распределения молекул $H(R)$ было установлено, что увеличение времени отжига приводит к смещению пика кривой к центру, при этом происходит появление молекул на более отдаленных расстояниях от центра. Такое поведение проявляется для кластеров, содержащих МББА и ФЭФ, что свидетельствует об общих тенденциях при таких условиях моделирования.

Было обнаружено из кривых $H_{cp}(R)$, что эти величины практически не меняются во всем кластере, за исключением края кластеров. Это позволяет говорить о том, что условия моделирования близки к равновесным условиям в основной части кластера без учета граничной области.

Что касается степени упорядоченности, то значения их катастрофически уменьшаются (см. таблица 2) для кластеров с молекулами МББА

и ФЭФ. Эти изменения согласуются с наблюдаемыми значениями информационной энтропии (таблица 2). Очевидно, моделирование подобных систем при больших временах теряет всякий смысл. При 850 пс возрастает величина энергии связи, которая определяется разницей между суммой энергий образования отдельных молекул и энергией всего кластера. Это связано, по-видимому, с расширением объема кластера, которое приводит к увеличению средней энергии для молекул находящихся на периферии кластера. Это хорошо наблюдается в случае кластера с молекулой ФЭФ. Одной из причин различия в значениях коэффициента самодиффузии молекулы, находящейся в центре кластера, может быть разница в полярности исследуемых молекул, что изменяет характер межмолекулярного взаимодействия.

При больших временах практически исчезает ориентационная упорядоченность (см. таблица 2), хотя температуры отжига, использованные в представленных экспериментах, соответствуют кристаллическим состояниям МББА [9] и ФЭФ [10]. В тоже время проведение эксперимента учитывает только известные потенциалы межмолекулярного взаимодействия и жидкое агрегатное состояние. Легко реализуется расширение объема кластера, наблюдаемое экспериментально при таких воздействиях на систему [11]. Практическое исчезновение упорядоченности при больших временах моделирования, означает, что возможный потенциал межмолекулярного взаимодействия, ответственного за существование дальней ориентационной упорядоченности в нематических жидкких кристаллах, по-видимо-

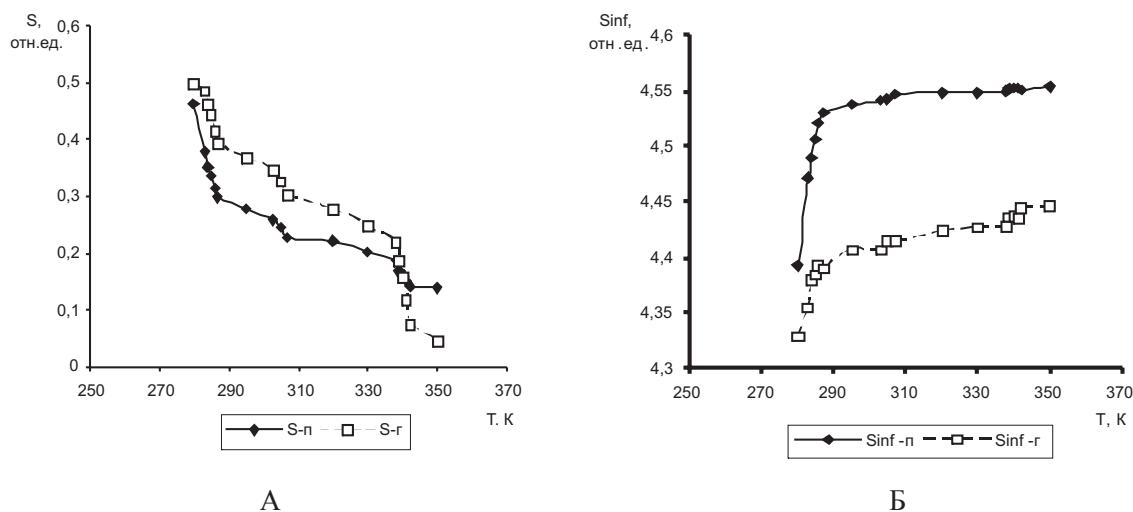


Рис. 3. Температурные зависимости степени упорядоченности (А) и информационной энтропии (Б) п-нитро-фенилпропаргилового эфира фенола при планарной и гомеотропной ориентациях подложки

му, будет потенциалом притяжения. Результаты компьютерного моделирования показывают, что кривые температурных зависимостей степени упорядоченности, информационной энтропии, объема ячейки, содержащей исследуемый кластер, функции распределения пар молекул имеют характерные точки перегиба, соответствующие областям температур фазовых переходов, определенным экспериментально [2-4]. Время моделирования при таком эксперименте должно определяться выбранной методикой нагрева системы [8]. Одним из способов уменьшения влияния граничных условий является увеличение количества исследуемых молекул. Это приводит к усилению кооперативных эффектов.

2. Определение температур фазовых переходов в мезогенных соединениях

Используя данный подход, нами были проведены исследования по определению температур фазовых переходов гипотетического соединения – п-нитро-фенилпропаргилового эфира фенола, который, как показали результаты квантовохимического расчета [5], должен обладать более высокой мезогенностью по сравнению с изученными нами арилпропаргиловыми эфирами фенолов. Основанием для такого утверждения является результат квантовохимических исследований о совпадении направлений вектора дипольного момента и продольной оси молекулы.

Кластер имел размер $13 \times 13 \times 18$ молекул. Отжиги проводились последовательные. Поиск проводился путем выбора температурных точек,

с интервалом 5° между соседними точками. Эксперименты проводились при планарной (п) и гомеотропной (г) ориентациях молекул кластера относительно подложки [2-4]. Начальная температура была выбрана в области комнатной из соображения близости структуры молекулы структурой молекул, ранее исследованных [2-4].

Результаты исследований представлены на Рисунках 3-9.

Как видно на рис.3А, кривая температурной зависимости степени упорядоченности при двух ориентациях подложки имеет характерные перегибы. Они позволяют предполагать, что возможное значение температуры плавления этого соединения может лежать в области 283K , просветления – 338K . Здесь учтена погрешность для области плавления в -2° [2-4]. Наличие четкого перегиба в области мезофазы при 303K позволяет предполагать существование смектической фазы, предшествующей нематической.

Как видно на рис.3А, гомеотропная ориентация приводит к росту упорядоченности по сравнению с планарной. Это может быть связано с отсутствием подложки в направлении OZ, что позволяет в меньшей степени нарушать исходную упорядоченность с ростом температуры.

Обнаруженные точки на кривых рис.3А хорошо согласуются с видом кривой температурной зависимости информационной энтропии (рис.3 Б).

На кривых распределения $H(R)$, $H_{cp}(R)$, $N(E)$ (рис.4-6) видно, что с ростом температуры происходит расширение объема кластера. При этом

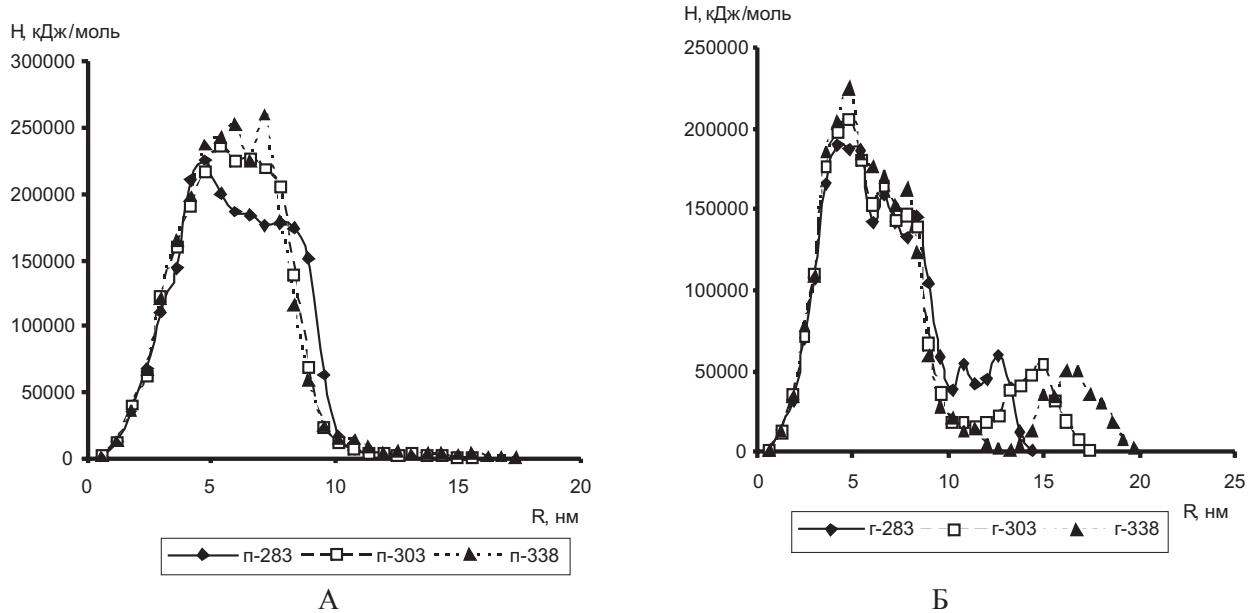


Рис. 4. Кривые зависимостей $H(R)$ при температурах 283, 303, 338К и различных ориентациях подложки

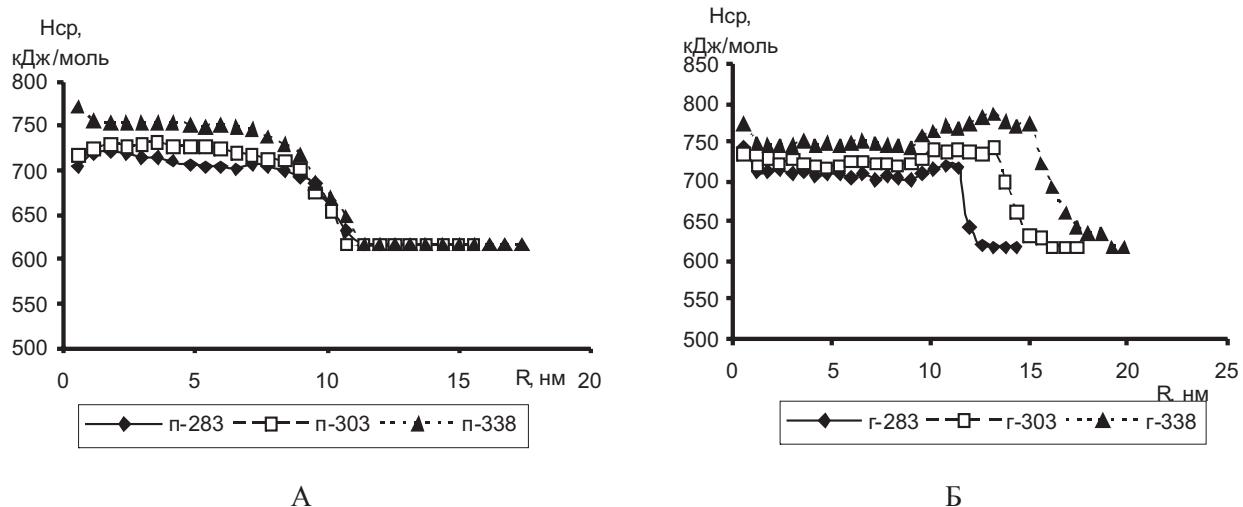


Рис. 5. Кривые зависимостей $H_{cp}(R)$ при температурах 283, 303, 338К и различных ориентациях подложки

гомеотропная ориентация приводит к его большому росту (рис.4-5), сохраняя практически неизменными положение пиков на кривой $H(R)$ (рис.4Б) при $R=5\div 6$ нм и увеличиваясь на периферии кластера (рис.4Б-5Б). Как видно на рис.6, с ростом температуры происходит переопределение молекул по энергии с некоторым уменьшением при температуре просветления (338К).

Влияние ориентации подложки на процессы, происходящие при фазовых переходах, хорошо согласуются на кривых температурных зависимостей объема ячейки V , количества молекул M ,

находящихся в телесном угле 10^0 относительно направления директора, и энергии связи E_{cv} (рис.7). При гомеотропной ориентации на кривых M - g и E_{cv} — g особенно отчетливо проявляется перегиб при 320К в области мезофазы. Можно предположить, что он связан с распадом димеров, как это наблюдалось на других АПЭФ [12].

Необходимо отметить, что присутствие электрического поля не приводит к росту упорядоченности при 320К, как наблюдалось это для ранее исследованных полярных АПЭФ [12]. Повидимому, это связано с лучшей упорядоченнос-

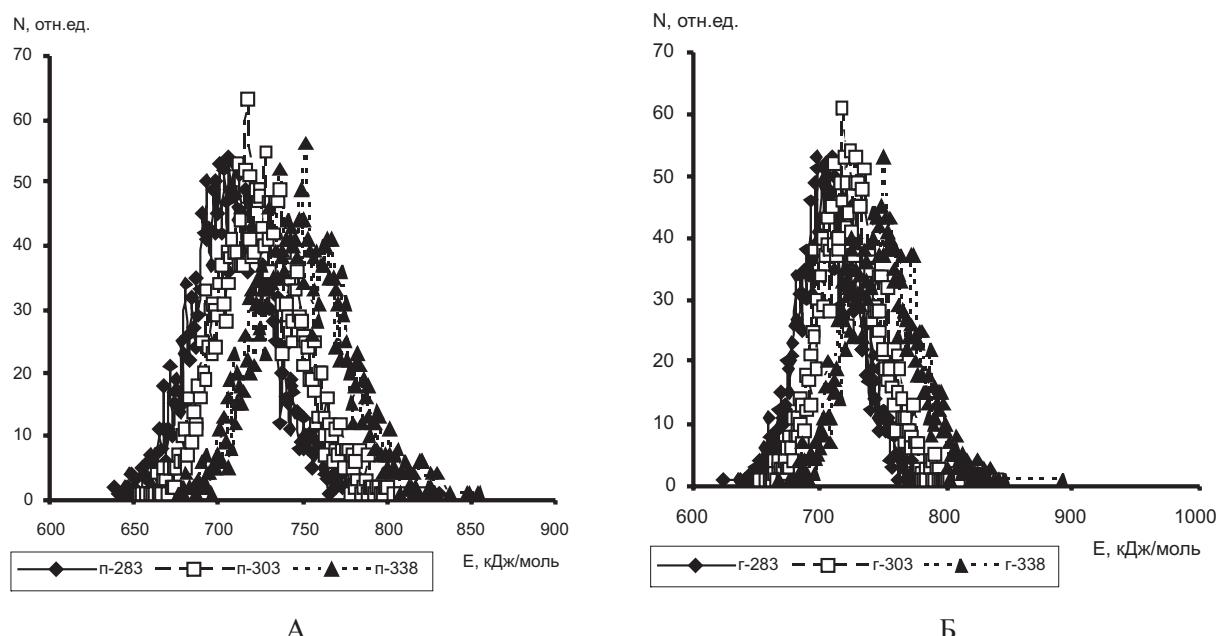


Рис. 6. Кривые зависимостей $N(E)$ при температурах 283, 303, 338К и различных ориентациях подложки

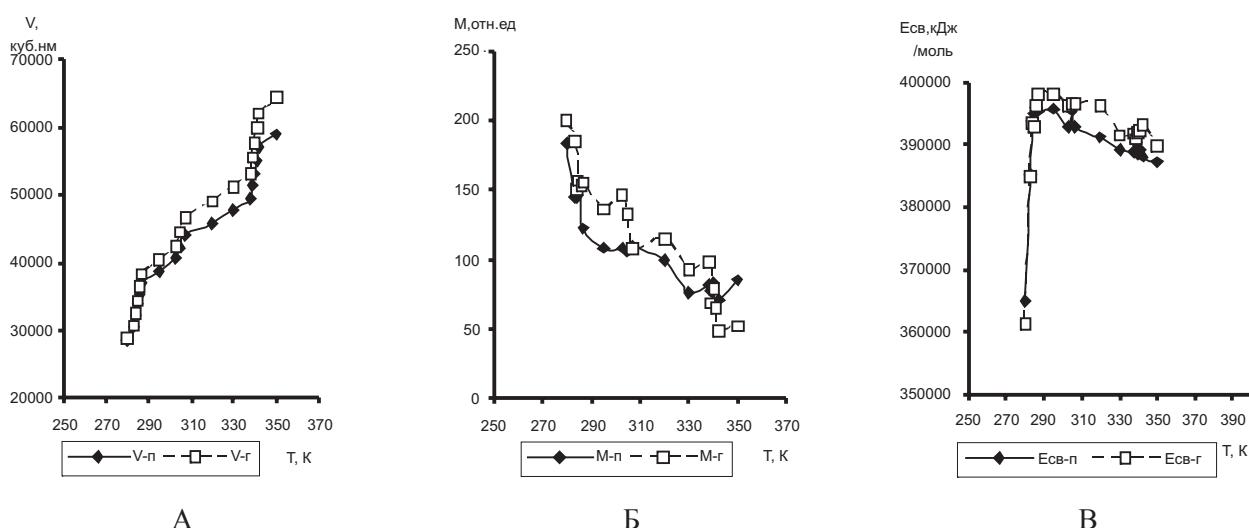


Рис.7. Температурные зависимости объема ячейки V (А), количества молекул M (Б) и энергии связи E_{cv} (В) различных ориентациях подложки

тию этого соединения за счет совпадения направлений вектора дипольного момента с продольной осью молекулы. Это находит хорошее соглашение на кривой температурной зависимости дипольного момента всего кластера, где отчетливо видны характерные перегибы (см.рис.8А).

Причиной наблюдаемой упорядоченности является небольшая подвижность (рис.8Б) как для молекулы около подложки (s-п, s-г), так и в

центре кластера (c-п, c-г). При температуре 320К в центре кластера наблюдается максимум кривой c-г и s-г, что может быть связано с распадом димерных образований при гомеотропной ориентации. При планарной ориентации в этой точке наблюдается спад (c-п и s-п). Изменение направления напряженности электрического поля, степеней свободы передвижения является основной причиной влияния ориентации подложки.

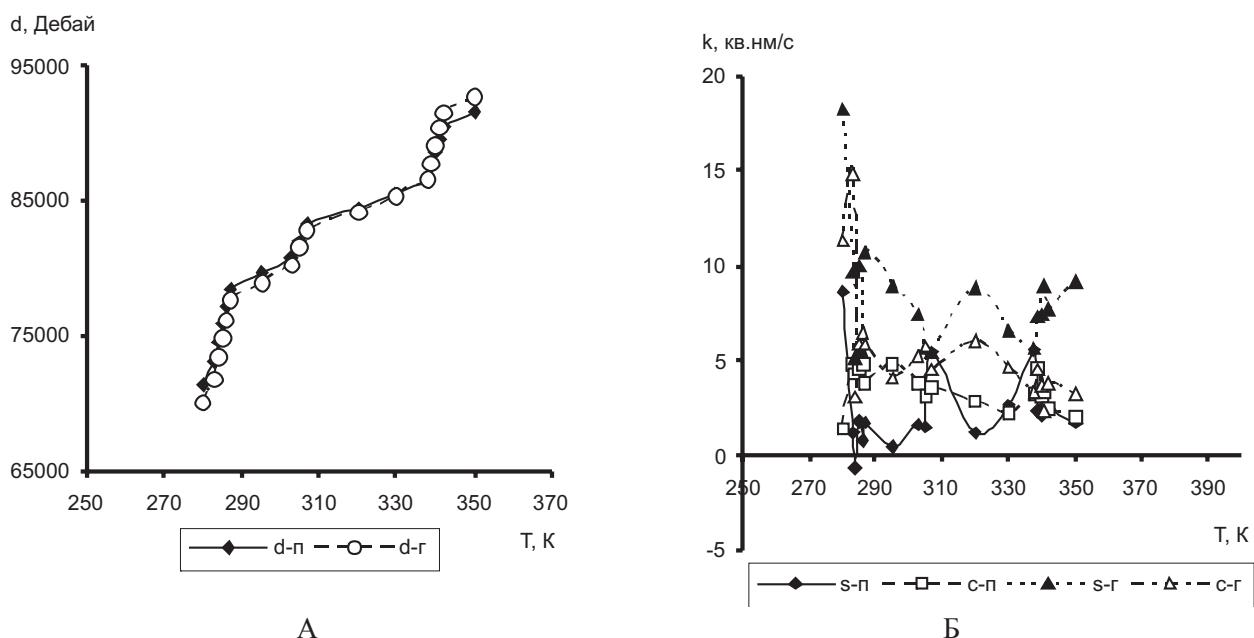


Рис.8. Температурные зависимости дипольного момента молекул кластера d (А) и коэффициента самодиффузии k (В) при различных ориентациях подложки

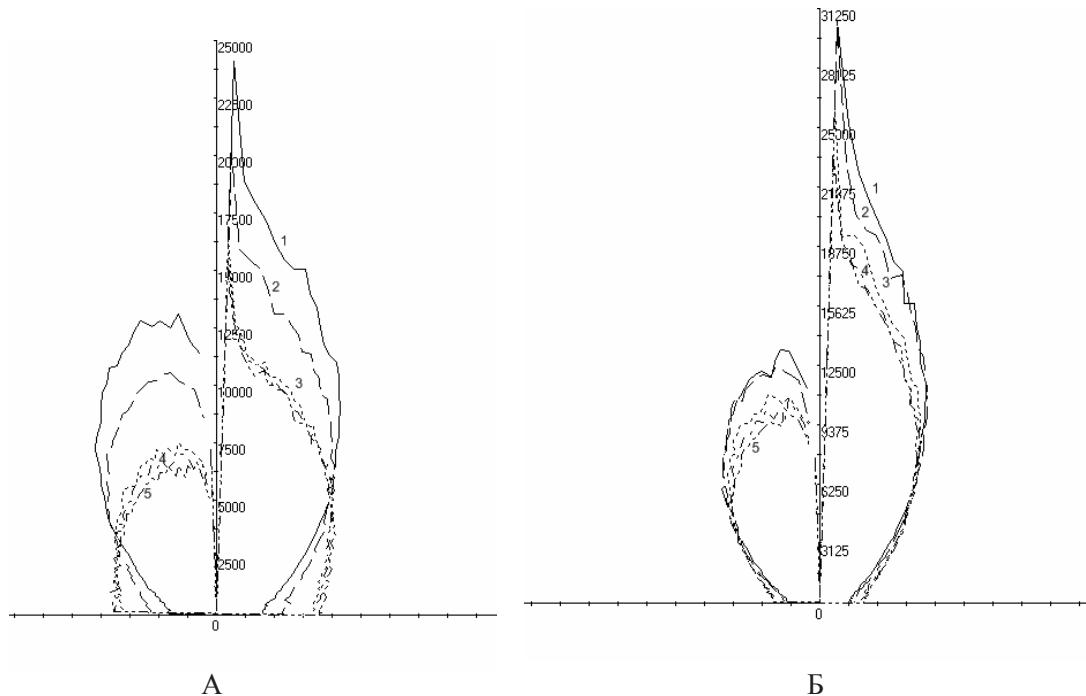


Рис. 9. Функции распределения D пар молекул в кристаллическом состоянии (1, $T=280\text{K}$), плавлении(2) (1, $T=283\text{K}$), фазовом переходе из смектического в нематическое состояние (3, $T=303\text{K}$), мезофазе (4, $T=320\text{K}$), просветлении (5, $T=338\text{K}$) при планарной (А) и гомеотропной ориентациях (Б) подложки

Как видно на рис.9, усиление упорядоченности при гомеотропной ориентации видно по характеру изменения функции распределения $D(\theta)$ количества пар молекул, находящихся под углом θ (см. рис.9Б). Здесь не происходит столь замет-

ного увеличения пар молекул при $\theta=90^\circ$, как на рис.9А. Общие точки пересечения кривых $D(\theta)$ в правой и левой части графика составляют: А – 45° и 125° и Б – 40° и 130° , соответственно. Небольшая разница между этими значениями для

двух ориентаций, по-видимому, может быть связана с общим характером возможного остава данного кластера [2-4].

Таким образом, результаты исследования особенностей моделирования мезогенных систем в приближении жидкого агрегатного состояния показывают эффективность небольших времен, значения которых определяется методикой «нагрева» [8]. Показано, что критерием правомерности использования такого подхода может быть соответствие точек перегибов на кривых температурных зависимостей степени упорядоченности, информационной энтропии, объема ячейки и других параметров с экспериментально определенными температурами фазовых переходов. На примере предполагаемого мезогенного соединения продемонстрирована общая методология поиска температур фазовых переходов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Berardi R., Muccioli L., and Zannoni C. Can Nematic // ChemPhysChem., 2004. № 5. p. 104-111.
2. Агельменев М.Е., Мулдахметов З.М., Братухин С.М., Пак В.Г., Поликарпов В.В., Яковлева О.А. //Жур. физ.хим., 2008. Т.82, №5. с.902-907.
3. Agel'menev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Pak V.G., Polikarpov V.V., Yakovleva O.A. //Mol. Cryst. . Liq. Cryst., 2008.Vol. 494. p. 339–352.
4. Мулдахметов З.М., Агельменев М.Е., Братухин С.М., Пак В.Г., Поликарпов В.В., Яковлева О.А. //Доклады НАН РК. -2007. №5. - С. 68-76.
5. Агельменев М.Е. //Известия НАН РК. сер.хим.. 2002. №5. С.35-38.
6. Berendsen H. J. C., van der Spoel D., van Drunen R. // Comp. Phys. Comm., 1995. Vol. 91. p. 43–56.
7. Lindahl E., Hess B., van der Spoel D. //J. Mol. Mod. 2001., Vol. 7. p. 306–317.
8. Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., van Buuren A. R., Apol E., Meulenhoff P. J., Tieleman D. P., Sijbers A. L. T. M., Feenstra K. A., van Drunen R. and Berendsen H. J. C. Gromacs //www.gromacs.org.
9. Сонин А.С. Введение в физику жидких кристаллов. М.: Наука, 1983,320 с.
10. Агельменев М.Е., Бажиков К.Т., Мулдахметов З.М., Сизых М.Ю. //Ж. физ. хим., 2002. Т. 76, № 10. с. 1891-1893.
11. Aoki K. M., Yoneya M., and Yokoyama H. // Mol. Cryst. Liq. Cryst., 2004.Vol.413.p. 109–116.
12. Агельменев М.Е., Мулдахметов З.М., Братухин С.М., Пак В.Г., Поликарпов В.В., Яковлева О.А. // Труды 6-го Межд.Беремжановского съезда по химии и хим.технологии, 2-3 октября, Караганда: изд-во КарГУ им. Е.А.Букетова, 2008. -С.424-429

Summary

The problems and advantages of a computer modeling of the nematic liquid crystals behaviour in the conditions of a liquid phase are presented in the work. The methodology of use of such an approach is shown at prediction of temperatures of phase transitions on a possible liquid crystal compound.

Резюме

Жұмыста сұйық агрегаттық қүйдегі нематтық сұйық кристалдардың іс-әрекетіне колданылатын компьютерлік модельдеу әдісінің проблемалары және артықшылықтары ұсынылған. Мүмкін сұйық кристалдық косылыстағы фазалық ауысуларды болжау кезіндегі осындай жолдың колдану әдісі көрсетілген.

*Институт органического синтеза
и углехимии
г. Караганда*

Поступила 22.05.09 г.

УДК 523.4

ГЛАТОЛЕНКОВ А.И.

ГЕОДИНАМИКА В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ ЗЕМНОЙ КОРЫ ТЯНЬ-ШАНЯ, КАК РЕЗУЛЬТАТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ПОЛЯРНЫХ ОСЕЙ ПЛАНЕТЫ

(Рекомендована академиком Роговым Е.И.)

На земной поверхности выявлен геометрический характер проявления тождественности гравитационной и инертной масс на основе механизма взаимодействия двух полярных осей планеты, в результате чего между осями создается область динамического равновесия в виде асейсмической зоны

Целью данной работы является выделение в пространстве земной коры локальных однородных участков, ограниченных неоднородностью окружающего их пространства и при этом выяснить какова геометрия таких структур с позиции эквивалентности массы инертной и массы весомой ($m_j \equiv m_q$).

Надо отметить, что используемые косвенные прогнозные характеристики о строении земной коры, такие как плотность, температура, потенциал, не всегда позволяют добиться необходимого результата. Поэтому стоит проблема выбора внутренних координат на земной поверхности, позволяющих выявить механизмы деформационных процессов в поверхностных слоях Тянь-Шаня, который можно было бы использовать для решения различных физических задач.

В свое время отмечалось, что «на территории Тянь-Шаня выделяются два вида крупномасштабных движений: вертикальные и горизонтальные, и которые во времени и пространстве взаимосвязаны» [1].

Главная сущность в изучении любого пространственного процесса должна соответствовать отношению каким-то реальным значениям. Все свойства этого процесса могут быть выражены математически в виде величин, т.е. числами, показывающие отношение этих свойств к другим свойствам [2]. Устойчивые числовые значения часто проявляются в моделях разрушения, как совокупность упругой обратимой деформации, разупрочнения, основанной на минимальных энергетических затратах, кратных величинам \sqrt{e} , $\sqrt{3}$ или \sqrt{r} .

Значения потенциала или ускорение силы тяжести всегда привязываются к определенным

поверхностям. Такие образования были найдены на земной поверхности орогена Тянь-Шаня путем выделения высот с приблизительно одинаковыми гравитационными массами (в метрическом исчислении допускалась незначительная разница в четырехзначных отметках высот лишь в двух последних числах отсчета) [3].

Оконтуренные высотами поверхности в местах динамически активных зон приобретают, как правило, правильную геометрическую форму в виде трапеций, параллелограммов, треугольников и так далее. Необходимо помнить, что деформация в выделенных структурах основана на форме их поверхности. Выпуклая структура не может менять свою форму, тогда как вогнутая может изгибаться, т.е. деформироваться. Накопленная потенциальная энергия таких структур через гравитационные массы в их вершинах за счет насыщения их выпуклой (вогнутой) поверхности энтропией будут отличаться от идеализированной плоской модели.

Законы сохранения импульса и момента импульса связаны с особыми точками системы. В треугольной системе основных таких точек три: центр масс (центр тяжести); центр инерции (центр описанной окружности) и ортоцентр. Тождественность принципа эквивалентности и инертности масс в системе диполя (треугольника) обусловлена тремя массами в вершинах треугольника, связанных сбалансированными неподвижными точками – центром масс и центром инерции.

Движение энергии в плоском пространстве основано на формировании параллельных сбалансированных систем, причем точки в каждой отдельной системе объединены своим центром тяжести и инерции. Поочередность переложения

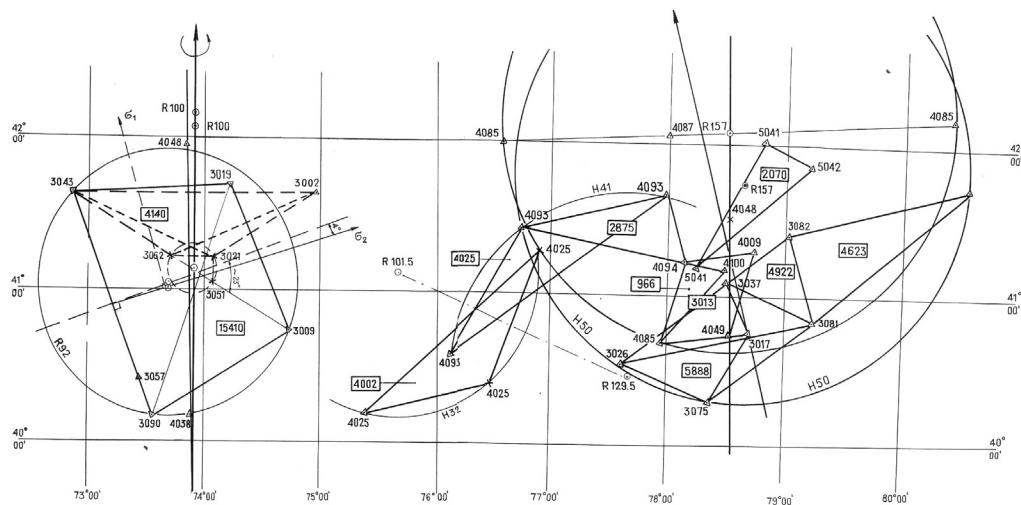


Рис. 1 Визуализация оси вращения и оси масс на земной поверхности Тянь-Шаня
(оконтуренные цифры - глубина энергетических уровней от земной поверхности, км)

силы с центров одной системы на центры другой или на их поверхности, в итоге и создается механизм колебательного движения. Для таких систем центры масс и инерции остаются постоянными во времени.

Кроме того, структура, занимая определенное пространство, своими особыми точками привязывается к широтам, что в итоге определяет скорость вращения этих точек на поверхности, которая равна $V = 0,4651 \cos \varphi$, км/с, где φ – географическая широта.

Геометрия пластической зоны в шаре, ограниченной полярной симметрией

На поверхности шара при достаточной величине внутреннего давления (внешнее давление считается фиксированным) образуется пластическая зона, ограниченная в силу полярной симметрии шаровым кольцом, и которая заполняет часть шара. При дальнейшем увеличении внутреннего давления чисто упругая зона «вырождается» во внешнюю сферу – в шаре образуется область с чисто пластическим состоянием [4].

В результате анализа метрической прочности поверхности планеты была выделена упруго-пластическая зона, которая стянута на широте $\varphi=41^\circ$ с.ш. между долготой $\lambda=73^\circ,9$ и $\lambda=78^\circ,5$ и точкой $\lambda=80^\circ,27$ в.д на широте $\varphi=45^\circ$ с.ш. При этом, векторные поля на сфере обязательно имеют выталкивающие или втягивающие точки.

Такой подход позволил обозначить (выделить) на поверхности рельефа две конструкции в

широтах $\varphi = 40^\circ \div 42^\circ$, каждая из которых симметрично ориентированы относительно полярных осей $\lambda=73,9^\circ$ и $\lambda=78,5^\circ$. Плотность силы каждой фигуры определяется отношением внешних или внутренних сил на выделенную площадь. На рис.1 показан механизм связи упругой и пластической зон в рельефе на широте $\varphi = 41^\circ$, относительно двух осей: оси вращения и оси масс с отрицательным и положительным потенциалом соответственно каждая, и находящихся на фиксированном расстоянии в 368 и 391 км друг от друга.

При расчете постоянного магнитного поля Земли на основании коэффициентов Гаусса в свое время были определены координаты выхода двух магнитных полюсов на поверхности Земли, ориентированных вдоль полярной оси: истинного и геомагнитного. В настоящее время принятые координаты выхода истинного магнитного полюса на земную поверхность: $\lambda = 73^\circ$ с.ш., $\varphi = 100^\circ$ з.д. Расчетное значение координат выхода геомагнитного полюса в северном полушарии равно $78,5$ с.ш., $69,1$ з.д., при этом, ось диполя наклонена на угол $11,5^\circ$ к оси вращения Земли [5]. Известно также, что линия тока $I = 0$ постоянного магнитного поля (магнитный экватор), пересекает географический экватор в точке 23° з.д. и отступает от него в восточном полушарии к северу [6].

Принцип взаимодействие двух масс в субпараллельных конструкциях

Каждая конструкция имеет свой потенциал и, следовательно, свое состояние среды. Суть

самоорганизации с парных структурах заключается во взаимодействии двух пар сил с двумя центрами инерции. По отдельности, в каждой системе с эквипотенциальной поверхностью, одно и то же абсолютное значение массы может относиться как к напряженности гравитационного поля, так и к инерционности. Масса подвержена двум физическим характеристикам, получается как бы «две в одном», т.е. в данной паре структур $m \sim (J/R^2)$ - представляет горизонтальную компоненту напряженности, а $m \sim (F/q)$ - вертикальную составляющую напряженности гравитационного поля.

На земной поверхности вдоль широты $\phi = 41^\circ$ с.ш. выделены две конструкции с четкой симметрией относительно оси вращения и плоскости орбиты Земли. Относительно долготы $\lambda = 73^\circ, 9$ с.ш. основное силовое поле представлено двумя трапециями из 3-х тысячников. Ось одной структуры (полярной) ориентирована в направлении север-юг, ось другой (экваториальной) в восточно-западном направлении под углом 23° к широте 41° с.ш. и отражает след плоскости эклиптики (рис.1). Судя по площади трапеций экваториальное поле в 3,72 раза интенсивнее полярного поля. Размер следа линии тока в данной конструкции представлен вектором 4038 м (юг) и 4048 м (север) равен 191,5 км.

На этой же широте 41° , но восточнее ~ 391 км выделяется конструкция, включающая серию структур правильной формы, объединенных единой осью, и рассматривалась в виде геодинамического диполя. На земной поверхности его ось ориентирована по параллели в виде следа (вектора) между высотными отметками 4049 м (юг) и 4048 м (север) длиной 87,5 км (рис.1). Географические координаты осевого следа этого вектора: между $40^\circ 45'$ и $41^\circ 31'$ з.д вдоль меридиана $\lambda = 78^\circ 32'$ с.ш., полностью соответствуют расчетному значению координат для геомагнитной оси $\lambda = 78^\circ, 5$ с.ш.[5].

Геодинамический диполь в данной конструкции содержит два крыла, сдвинутые по направлению оси вращения на 70 км и отстоящие друг от друга на 72 км. Левое крыло на плоскости имеет вид прямоугольного треугольника, в вершинах которого помешены высоты 4-х тысячников с потенциалом Δh_0 и Δh_1 м (две высоты 4093 м и одна 4094 м). Правое крыло также содержит прямоугольный треугольник с высотами в вер-

шинах 3-х тысячники (3081-3082-3045 м). Катеты этих треугольников ориентированы по направлению главных осей сжатия и растяжения. Ось сжатия отклонена на $345^\circ \div 348^\circ$ А в западном направлении относительно меридиана. Таким образом, западное крыло, состоящее из 4-х тысячников, соответствует положительному потенциальному, а восточное, 3-х тысячники, к отрицательному. По центру, между этими треугольниками и простирается след оси масс.

В широтном направлении $\phi = 41^\circ$ расстояние между следом оси масс и полярной осью вращения колеблется от 368 до 391 км. (± 23 км). Особенно необходимо подчеркнуть, что в обеих конструкциях преобладает устойчивая полярная симметрия относительно оси вращения и оси масс.

Суммарный момент инерции параллельных осей вращения и масс

В данной ситуации имеем две полярные параллельные оси - $\lambda = 73,9^\circ$ и $\lambda = 78,5^\circ$. Относительно потенциала высот полярного диполя, нулевая полярная ось с моментом инерции $J_{O(\lambda=73,9^\circ)} = 11,616 * 10^{11}$ кгм² на широте $\phi = 41^\circ$ отошла от оси масс к западу на расстоянии $l = 368$ км. Кстати, этот отрезок в радианах равен $368/6371 \approx 0,05776$ рад, т.е. в десять раз меньше коэффициента Эйлера ($10k_\phi$). Предположительно, в этом основную роль выполнили силовые структуры оси масс, сумма которых равна $(2875+3013+4623+4922) = 15443$, что на $(15443 - 15410) = 33$ км больше размера орбитальной структуры, расположенной на полярной оси вращения ($\lambda = 73,9^\circ$).

На основе теоремы Гюйгенса-Штейнера суммарный момент инерции полярных осей рассчитан по формуле $J = J_0 + l^2 * h = 23,804 * 10^{11}$ кгм², где $q(\Delta h) = 17$ м – условная величина потенциала (высота $h = 3017$ м), являющаяся центром масс основной структуры 5888 км. Значение $q(\Delta h) = 17$ м относительно потенциала оконтуренных точек структуры характеризует её вогнутость.

Функциональный скачок между параллельными осями

Чем объяснить формирование двух осей, отстоящих друг от друга на расстоянии 368 км и 391 км в широтном направлении $\lambda = 41^\circ$? В основу изменения напряжений упругого и пластичного характера заложен промежуток времени между двумя последовательными фиксированными по отношению к звездам прохождения географи-

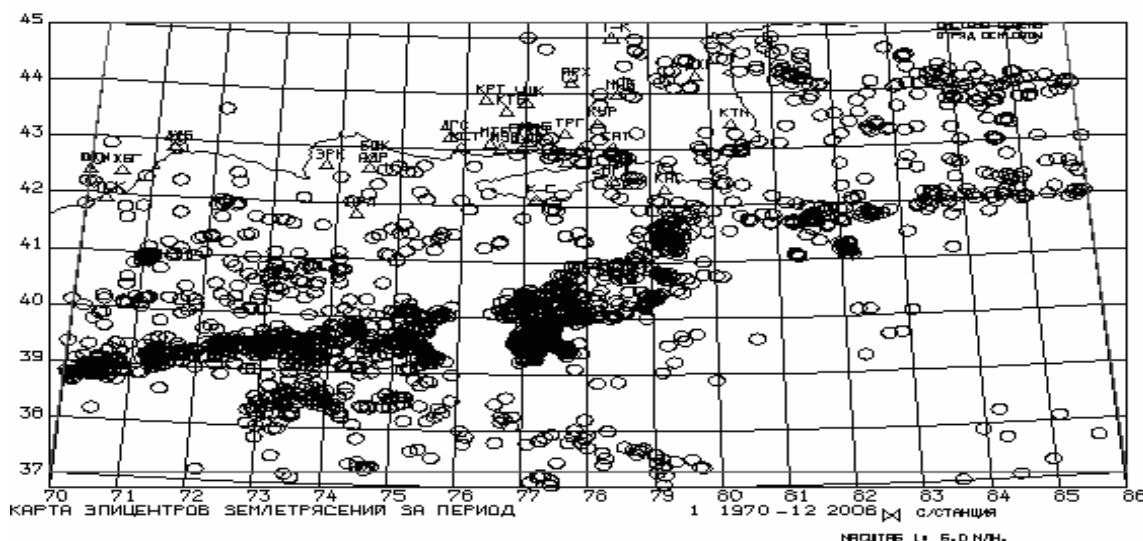


Рис.2 Карта эпицентров землетрясений энергетического класса $K \geq 11$ за период 1970-2006 годы (наблюдается область разрыва между меридианами $\lambda = 76^\circ - 77^\circ$ и широтами $\varphi = 39^\circ - 40^\circ$)

ческого звездного меридиана. Промежуток этот равен $\Delta T = 235,91$ сек, т.е. это время, за которое Земля совершают один оборот вокруг своей оси в межзвездном пространстве.

Анализ сейсмического режима с $K \geq 10$ показал, что на земной поверхности из-за разности потенциалов между осью вращения и осью масс четко выделяется ограничительная зона в контурных топографических границах примерно в один градус, т.е. единица. Условно координаты зоны можно обозначить $\varphi = 39^\circ - 40^\circ$ и $\lambda = 76^\circ - 77^\circ$ (рис.2).

Известно, что на широтах $\varphi = 39^\circ 15'$ нормальное напряжение в направление меридианов обращается в нуль [4]. Данная зона, лежащая между осями вращения и масс, представляет область соприкосновения пластичной зоны с упругой. Следовательно, при соприкосновении параллельных линий с противоположной направленностью силовых токов, происходит их отталкивание (см. рис.2). Что приводит к динамическому равновесию системы. Приблизительно это происходит на глубине порядка ~ 4000 км. В результате на широтах $\varphi = 41^\circ \div 42^\circ$ между этими двумя конструкциями появляется линия «сдвига», которая проходит приблизительно по меридиану $\lambda = 76,3^\circ \div 76,64^\circ$ и делит расстояние между осями на два участка: со стороны оси вращения – 230 км, соответственно, со стороны оси масс – 138 км.

Скорость вращения на этой широте равна $V_{41^\circ} = 0.4651 * \cos \varphi = 0.351$ км/с.

При отношении линейных размеров между линией «сдвига» и осями вдоль широты $\varphi = 41^\circ$ к промежутку времени $\Delta T = 235,91$ сек установлено, что временная цикличность оси вращения соответствует квадрату времени, необходимого для прохождения от оси масс до границы разрыва – $\Delta t_{230} = (\Delta t_{138})^2$.

На земной поверхности наблюдаются косвенные признаки следов выхода линии разрыва, как результат взаимодействия двух антагонистических осей. Это, прежде всего, резкое изменение русла р.Чу относительно западного побережья озера Иссык-Куль, граница раздела пресной и соленой воды на озере Балхаш, а также проявление разрыва берегов Оби с образованием Обской губы, как результат встречи осей вращения и масс на широтах $70^\circ \div 75^\circ$ с.ш.

Почему на плоскости следы физических полей отображаются через правильные фигуры? Объяснить это можно поверхностными волнами, которые бывают двух типов: волны Рэлея и волны Лява. В волне Рэлея смещение частиц лежит в вертикальной плоскости, а сами частицы описывают эллипс, двигаясь против часовой стрелки. В волнах Лява смещение частиц происходит в горизонтальной плоскости перпендикулярно к направлению распространения волн. В связи с

тем, что величина смещения поверхностных волн максимальна на поверхности, это и послужило основой изучения наружных слоёв Земли толщиной в сотни километров, равной примерно одной трети длины волны. В совокупности волны Рэлея, волны Лява, а также потенциал силы тяжести, и создают на сферической плоскости тот рисунок, который реально отображается на земной поверхности рельефа.

Выводы

1. На земной поверхности Тянь-Шаня по широте $\phi = 41^\circ$ выделены две конструкции, объединяющие ряд тонких структур правильной формы с потенциалом силы тяжести равной единице, при этом, процессу накопления энергии в среде ставится естественный предел – линейный размер, через ограничители напряжений – зацепления. Ориентировка выделенных структур в пространстве орогена строго привязана к субгоризонтальному направлению главных эффективных напряжений сжатия и растяжения, к оси вращения, к направлению вращения планеты.

2. В поверхностном слое коры массивные структуры разного масштабного уровня, являются, в одном случае, проводниками, в другом – источниками излучения физических полей, связанных на западе с отрицательным потенциалом оси вращения, на востоке с положительным потенциалом оси масс. В результате, между осями образуется область динамического равновесия, проецируемая на земную поверхность в виде асейсмической зоны.

3. Геометрический рисунок, отображающий геокинетику локального участка геологической среды в рельефе Тянь-Шаня, основан на объединении точечных потенциалов по нормали к по-

верхности в виде трехвершинников, особые точки в которых, такие как ортоцентр, центр тяжести, центр описанной окружности, являются точками зацепления, носящие в деформационном процессе конкретную функциональную нагрузку.

4. Предложенный метод оценки напряженного состояния в поверхностном слое коры позволит в своем развитии объяснить физико-географические черты континентов, литосферных блоков и механизмы новейшего горообразования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Курскеев А.К. Землетрясения и сейсмическая безопасность Казахстана. Алматы. – 2004. – 504 с.
2. Успенский П.Д. Ключ к загадкам мира. Санд-Петербург. 1992. – 241 с.
3. Глатоленков А.И. Принципы самоорганизации геологической среды. // Сб. трудов, посвященный XXXIII сессии Международного геологического конгресса (Осло – Норвегия, 2008). Алматы. 2008. – С. 378-383.
4. Надаи А. Пластиность и разрушение твердых тел. Том 2. М. 1969. – 863 с.
5. Жарков В.Н., Трубицын В.П. Физика планетных недр. М. 1980. – 448 с.
6. Земной магнетизм. //Большая Советская энциклопедия. Том 2.- 1950. С. 28-34.

Резюме

Жердің екі полярлық остеңдерінің өзара әрекеттіңін механизміне негізделген жердің үстіндегі гравитациялық және инертті массалардың геометриялық ұқсастық сипаты анықталды.

Summary

On terrestrial surface is revealed geometric type of the manifestation **identity engraving** and inert masses on base of the mechanism of the interaction two arctic axes of the planet with the result that area of the dynamic balances between axes in the manner of aseismatical zone.

Институт сейсмологии МОН РК Поступила 22.05.09 г.

УДК 662.02: [531.72 + 544.33]

Г.Ж. МОЛДАБАЕВА

ПАРАМЕТРЫ ОТКЛИКА ПРИ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКЕ ФЛЮИДОВ

(Представлена академиком НАН РК Е.И.Роговым)

При ультразвуковой обработке жидких компонентов горных пород интенсивность ультразвукового воздействия (УВ) неодинакова в пределах объема ультразвуковой ванны. Имеет место зависимость абсолютных значений амплитуды отклика жидкости на УВ - воздействие в области низких частот, в присутствии некоторых катализитически – активных веществ и структурированных образцов, абсолютная величина отклика и форма сигнала зависят от вида катализитически-активного вещества и особенностей его структуры.

Понятие флюида дает представление о всех формах жидкофазных композиций присутствующих в поверхностных слоях земной коры. Вода является основным компонентом всех разновидностей флюидов. Все горные породы, слагающие земную кору, включают воду в той или иной степени связанную с ними. Природные воды, располагающиеся на поверхности Земли (поверхностные воды) и воды, находящиеся в Земной коре – подземные представляют собой единую систему. В этой связи, изучение свойств флюидов позволит получить в перспективе дополнительную информацию о геологическом строении недр.

При проведении экспериментальных работ учитывались особенности поведения каждого уровня единой флюидосодержащей системы. Измерение параметров отклика компонентов горных пород и катализитически активных веществ на внешнее электростатическое или переменное электромеханическое воздействие производится на анализаторе спектра СК4-56, который позво-

ляет измерять амплитудно-частотные параметры в диапазоне частот от 50 Гц до 50 кГц. Пределы чувствительности этого прибора позволяют измерять амплитуду откликов в пределах от 0,1 до 80 мВ.

Для проведения работ с жидкими веществами изготовлены стеклянные кюветы с разной геометрией рабочего пространства: d 5 мм, d 10 мм, d 20 мм.

Для разделения фракционного состава дисперсных минералов используются сите с диаметром отверстий от 40 мкм до 1 мм.

Работы по отработке режимов согласования внешнего воздействия с внутренним откликом изучаемой среды на первом этапе исследования проводили с помощью ультразвуковой ванны ДА-ЗА с рабочей частотой 40,8 кГц. Изучение параметров отклика материалы исследования осуществляли с помощью чистых металлов, кристаллических минералов, структурированных металлов (сетки) и диспергированных минералов.

Таблица 1. Амплитудные значения отклика жидкой среды на основной частоте в разных точках замера

№ точки замера	Показания анализатора спектра СК4-56, мВ	
	вода водопроводной минерализации	нефть Кумкольского месторождения
1	42	>40
2	20-30	30-40
3	20-30	<40
4	32	35
5	40	35
6	40	32
7	40	38
8	42	32
9	40	34
10	42	36
11	42	32

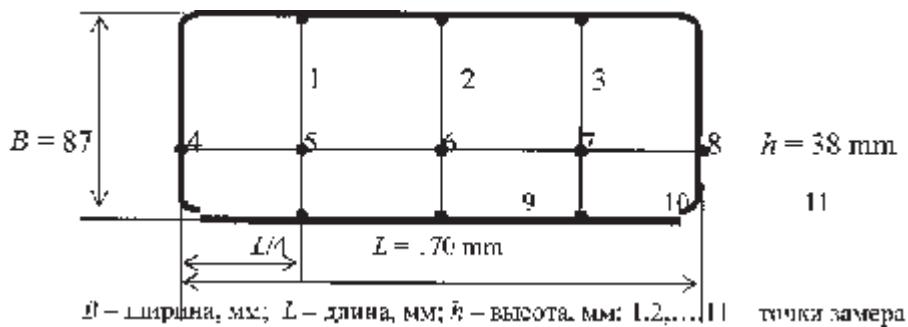


Рис. 1. Схема расположения точек замера для определения амплитуды отклика на основной частоте механического воздействия

В таблице 1 представлены результаты замеров амплитуды в различных точках ультразвуковой ванны, заполненной нефтью или водой.

Как видно из таблицы 1 интенсивность процесса ультразвуковой обработки неодинакова в пределах объема ванны. Так для воды водопроводной минерализации амплитудные значения отклика одинаковы вблизи места крепления пьезоэлемента (точки 5, 6, 7) рис. 1, а в узлах и пучностях стоячей волны существенно отличаются – максимальный разброс амплитуды составляет $\sim 50\%$.

В ванне, заполненной нефтью, картина распределения интенсивности отклика на рабочей частоте ванны имеет другой вид: значения интенсивности ультразвукового воздействия максимальны вблизи одного из бортов ванны (точки 1, 2, 3), вблизи пьезоэлемента (точки 5, 6), а в местах закругления ванны (точки 8, 11) значения отклика минимальны. Максимальный разброс показаний составляет $\sim 20\%$.

Отсюда следует вывод о зависимости интенсивности воздействия от свойств изучаемого материала и формы среды распространения действующего сигнала. Поэтому следующий этап исследования предусматривает изучение влияния чистых металлов, расположенных поперек линии действия механического воздействия, на изменение частоты отклика.

Так, медные пластины в обрабатываемой воде изменяют рабочую частоту воздействия от $40,8 \text{ кГц}$ до $36,7 \text{ кГц}$, причем амплитуда отклика максимальна по сравнению с исходными замерами и одинакова во всем этом диапазоне. Кроме того, появляется дополнительные отклики на частотах 25 и 17 кГц , амплитудные значения которых в 2-3 раза меньше, чем амплитуда рабо-

чей (основной) частоты. Здесь же выявляется ряд дополнительных гармоник, амплитуда которых в 8 – 10 раз меньше основного воздействия. Изменение формы медного образца (гребенка правильной формы со скважиностью 2 мм) приводит к появлению автоволновых колебаний в этом же диапазоне частот с периодом $\phi > 5 \text{ с}$.

При замерах в этих же условиях металлический кобальт расширяет полосу рабочей частоты от $40,8$ до 35 кГц , где амплитуда отклика однаакова для всего диапазона. На частотах 25 кГц и $17 - 18 \text{ кГц}$ возникают всплески, амплитуда которых в 3-4 раза меньше основной. Во всем спектре наблюдается ряд гармонических составляющих, величина которых в 10 - 12 раз меньше основного сигнала. Кроме того, отмечается появление низкочастотной составляющей в спектре, абсолютная величина которой $< 2,0 \text{ кГц}$.

Появление отклика в области низких частот характерно для реакций, протекающих на границе раздела фаз «жидкость-газ» при ультразвуковой обработке. Поэтому нами выполнены замеры параметров отклика в низкочастотном диапазоне для веществ в металлическом состоянии (пары Cr-Mg, Al-Al размещенные поперек линии ультразвуковые волны) и в ионизированном состоянии - 1% раствор марганцевокислого калия.

В области частот от 50 Гц до 2000 Гц величина отклика может существенно изменяться на всей исследуемой шкале частот, при этом наибольшие значения амплитуды наблюдаются вблизи самых низких частот. Совокупность полученных данных свидетельствует о том, что величина отклика и, соответственно, интенсивность внешнего воздействия существенно зависят от вида материала и формы среды распространения.

Благодаря более высоким частотам и, следовательно, малым длинам волн, имеет место ряд особенностей взаимодействия ультразвуковых волн с веществом. Ввиду малой длины волны ультразвука (в воде – $1,5 \cdot 10^{-2} \div 1,5 \cdot 10^{-4}$ см) характер его распространения определяется в первую очередь, молекулярной структурой среды, поэтому, измеряя частоту и амплитуду параметров отклика изучаемой жидкости можно судить о реакции молекул на внешнее воздействие. Жидкости и твердые тела, как известно, представляют собой хорошие проводники ультразвука, а в воздухе и в газах используют звуковые колебания низких частот. В нашем случае анализатор спектра позволяет отследить особенности поведения обеих фаз на границе раздела «вода-воздух». Другая особенность ультразвука – это возможность получения большой интенсивности даже при сравнительно небольших амплитудах колебаний, т.к. при данной амплитуде плотность потока энергии пропорциональна квадрату частоты. Известно, что ультразвуковые волны большой интенсивности сопровождаются рядом нелинейных эффектов. Так, для интенсивных плоских ультразвуковых волн при малом поглощении среды (жидкости, твердые тела) синусоидальная волна излучателя превращается по мере ее распространения в слабую периодическую ударную волну «прямоугольной формы»; поглощение таких волн значительно больше, чем волн малой амплитуды. Кроме того, распространению ультразвуковых волн в газах и жидкостях сопутствует движение среды, так называемое акустическое течение, скорость которого зависит от вязкости среды, интенсивности ультразвука и его частоты.

К числу важных нелинейных явлений, возникающих при распространении интенсивного ультразвука в жидкостях, относится акустическая кавитация. Интенсивность, соответствующая порогу кавитации, зависит от рода жидкости и степени ее чистоты, частоты звука, температуры и других факторов. В водопроводной воде, содержащей пузырьки воздуха, на частоте 20 кГц она составляет доли Bm/cm^2 . На высоких частотах в ультразвуковом поле с интенсивностью несколько Bm/cm^2 возникает фонтанирование жидкости и распыление ее с образованием тонкодисперсного тумана.

Предельная интенсивность излучения ультразвука определяется прочностными и нелиней-

ными свойствами материала излучателей, а также особенностями использования излучателей. Для достижения больших интенсивностей, которые могут быть получены с поверхности излучателя, пользуются фокусировкой ультразвука. Например, в фокусе параболоида, внутренние стенки которого выполнены из мозаики кварцевых пластинок или из пьезокерамики, на частоте 0,5 МГц удается получить в воде интенсивности ультразвука большие, чем $10^5 Bm/cm^2$. Для увеличения амплитуды колебаний часто пользуются стержневыми концентраторами.

Таким образом, приведенная информация свидетельствует о том, что для данного этапа изучения отклика на УЗ-воздействие необходимо проводить исследование поведения жидкости как в низкочастотном (информация о газовых включениях), так и высокочастотном диапазоне (информация о молекулярной реакции на воздействие).

Кроме того, необходимо знать акустическую активность материалов, имеющих различное изменение свойств в ходе УЗ-отработки т.к. акустический концентратор создает непосредственно сходящейся волновой фронт; пассивная линза или зеркало изменяет акустическую длину пути таким образом, что преобразует плоский или расходящийся фронт в сходящийся. В качестве концентраторов используется сферы, линзы, трубы, зональные диски и т.п.

Чтобы получить представление о механизме взаимодействия материалов различного химического состава и формы в ультразвуковую ванну с водой помещали выбранные вещества поперек направления УЗ-волны в области расположения излучателя. Высота водного слоя ванны – 30 мм. Измерительный щуп анализатора спектра СК4-56 помещали в центральную часть исследуемого вещества.

В таблице 2 приведены результаты замеров параметров отклика разнородных материалов на ультразвуковое воздействие в водной среде при собственной частоте излучения 40,8 кГц. Представленные в таблице результаты замеров свидетельствуют о том, что реакции отклика неодинаковы для каждого вида выбранных материалов: имеет значение не только форма концентратора, но и структурные особенности изучаемого вещества.

Так размещение мелкой сетки из железной проволоки над УЗ - потоком приводит к появлению

Таблица 2. Результаты замеров параметров отклика различных материалов на ультразвуковое воздействия (на частоте 40,8 кГц-ванна ДА-ЗА)

Изучаемый материал	Отклик на основной частоте, мВ	Отклик на других частотах, кГц/мВ	Форма сигнала
Железная сетка (0,64 мм)	200-450	25/100; 17-18/100	Автоколебания низкочастотные
Al-гофрированный	350	24,5/150; 17,6/100; 36/100; 3/60-100	
Нихром-спираль	200-460	-	Автоволновые колебания, высокочаст. области - пятно амплитудное
Концентратор сферический с железными иглами	400	25/100; 17/100	Пилообразный в пределах 36,6-40,7 кГц
Концентратор линейный	430	25/120; 17/120	По всей шкале полоса ~60 мВ
Сетка ПАН	420	25/120; 17/120	-
Асбест	420	39,5/350; 38,6/350; 25,7/120; 8,7/80	Триплет вблизи основной частоты
Дерево (поперечный срез)	420	25/120; 17,3/100; 8-9/70	Много всплесков с амплитудой 30 мВ, пила 35,6-40,8 кГц
Кварц- морион	420	25/120; 17-18/100 3,5/80	По всей шкале полоса > 80 мВ пила -35-41 кГц
Кобальт-пластинка	420	25/120; 17-18/100	Появление низко частотного звука (свист), много всплесков >50 мВ
Медь-пластинка	420	25/100; 17/60 мВ	Пила 36,7-41 кГц много гармоник до 25 кГц > 50 мВ
Висмут	450	-	Пила 35-41 кГц
Цинк гранулир.	450	При смещении гранул в сторону от центра излучателя 41,3/800 мВ	-

нию низко частотных колебаний в виде автоволновой реакции, а также появляются значительные (1/3 от амплитуды исходного сигнала) всплески на частотах 25 и 17-18 кГц. Поведение среды с никромовым кольцом из спиральной проволоки подобно предыдущему концентратору, но промежуточные гармоники отсутствуют. Наибольшее количество промежуточных откликов имеют гофрированный алюминий (36, 24,5; 17,6; 3 кГц) и асбест (39,5; 38,6; 25,7; 8,7 кГц), но для асбеста видны характерные смещения отклика в область высоких частот.

Сложная структура поперечного среза дерева (сосна) обуславливает усиление УЗ-реакции по всей шкале анализатора спектра, амплитуда которой составляет 8-10% от амплитуды исходного сигнала, кроме того, вблизи основной час-

тоты появляется пилообразное изменение формы сигнала отклика в диапазоне частот 35,6-40,8 кГц. Подобным образом действует на озвучивающую среду разновидность кварца - морион, но с большим (2,5 раза) усилением сигнала реакции по всей шкале и большим диапазоном пилообразного отклика вблизи основной частоты (35-41 кГц). Чистые металлы Co , Cu , Bi , Zn - также имеют свои особенности в распределении отклика на УЗ - воздействие на частотной шкале анализатора спектра.

Отсюда следует, что в зависимости от задач направленного изменения свойств обрабатываемой среды можно использовать каждый материал и форму концентратора по своему назначению.

Таким образом, при ультразвуковой обработке жидких компонентов горных пород интенсив-

ность УЗ - воздействия неодинакова в пределах объема ультразвуковой ванны. Для воды водопроводной минерализации амплитудные значения отклика одинаковы вблизи места крепления пьезопреобразователя, а в узлах и пучностях стоячей волны существенно отличаются - максимальный разброс амплитуды составляет ~ 50%. В ванне, заполненной нефтью, картина распределения интенсивности излучения на основной частоте имеет другой вид: УЗ - воздействие максимально вблизи одного из бортов ванны, остальные значения отклика меньше, разброс показателей ~ 20%.

Имеет место зависимость абсолютных значений амплитуды отклика жидкости на УВ - воздействие в области низких частот.

Кроме того, при УЗ - обработке воды и ее растворов в присутствии некоторых каталитически – активных веществ (*Fe, Al, Cu, Bi, Zn, никром*) и структурированных образцов (древесина, асbestos, сетки и др.), абсолютная величина отклика и форма сигнала зависят от вида каталитически-активного вещества и особенностей его

структуры. Следовательно, по поведению образцов флюидов из недр можно будет судить о наличии тех или иных полезных ископаемых.

Резюме

Ультрадыбыс ваннасының қолемінде тау жынысының сұйық компоненттерін ультрадыбыспен өндеу бағысында ультрадыбыстық әсер ету карқыны біркелкі емес. Сұйық жаңғырығының тербеліс шегінін абсолюттік мәндерінің тәуелсіздігі орын алады – ультрадыбыска. Тәменгі жиіліктің аймағындағы әсері, кейір каталитикалық белсенді заттың қатысуында белгінің формасы мен жаңғырықтың абсолюттік мөлшері каталитикалық белсенді заттың құрылым ерекшелігіне тәуелді.

Summary

At the ultrasonic treatment of liquid components of rocks, the intensity of ultrasonic impact (UI) is not the same in the limits of the volume of ultrasonic. There is a dependence of absolute values of response amplitude of liquid to UI – impact of the low frequency range in the presence of some catalytically active substances and structured samples, the absolute value of response and the form of signal depend on the kind of catalytically active substance and particularities of its structure.

*Институт Горного дела имени Д.А. Кунаева,
г. Алматы*
Поступила 26.03.09 г.

УДК 54-142+546.3

В.П. МАЛЫШЕВ, А.М. ТУРДУКОЖАЕВА, А.Ш. КАЖИКЕНОВА

РАЗРАБОТКА ОБОБЩЕННОЙ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ НА ОСНОВЕ КОНЦЕПЦИИ ХАОТИЗИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

(Представлена академиком НАН РК С.М. Адекеновым)

Впервые рассмотрена возможность создания обобщенной полуэмпирической модели вязкости расплавов на основе концепции хаотизированных частиц с учетом степени ассоциированности кластеров.

Из трех агрегатных состояний вещества жидкое является наиболее сложным для аналитического отображения. Эта сложность усугубляется при рассмотрении свойств расплавленных веществ – металлов, шлаков, магмы и т.п. В свою очередь, из различных физико-химических свойств расплавов наиболее трудным для формализации на основе фундаментальных характеристик вещества оказывается вязкость. Так, даже для простых веществ, а среди них для самых однотипных и представленных широким множеством – металлов, на основе всестороннего анализа различных моделей вязкости – квантово-химических, термодинамических и других – авторы обобщающей монографии [1] приходят к выводу, что единственно достаточно достоверным источником сведений о вязкости жидких металлов при различных температурах является эксперимент, аналитическое описание которого возможно либо статистическими аппроксимирующими моделями, либо полуэмпирическими моделями с двумя или более подгоночными параметрами.

По-видимому, возможность усиления фундаментальной части подобных моделей должна основываться на новом подходе к пониманию жидкого состояния. Ввиду достаточно широкого и глубокого исследования этого состояния выходом из существующего положения может быть более обобщенное представление о жидким состоянии как об одном из трех агрегатных в рамках объединяющей их модели. Именно на это и направлена разработка единой концепции хаотизированных частиц, определяющих по соотношению трех их разновидностей – кристаллоподвижных, жидкокомпонентных и пароподвижных – устой-

чивость каждой фазы и температурные зависимости их физико-химических свойств [2-5].

Сущность концепции состоит в использовании распределения Больцмана для разделения всех частиц на три сорта по тепловым барьерам плавления и кипения так, что подбарьерные по теплоте плавления частицы, названные кристаллоподвижными, отвечают за дальний порядок связи в пределах кристалла или в составе зародышей твердой фазы в жидкости или газе со своей долей в общем числе частиц с запасом тепловой энергии RT и в точке плавления – RT_m :

$$P_{crm} = 1 - \exp[-RT_m/(RT)] = 1 - \exp(-T_m/T); \quad (1)$$

надбарьерные по теплоте кипения частицы, названные пароподвижными, отвечают за полную хаотизацию любого состояния, т.е. за нулевой порядок связи, со своей долей, находимой по запасу тепловой энергии в точке кипения RT_b :

$$P_{vm} = \exp[-RT_b/(RT)] = \exp(-T_b/T); \quad (2)$$

надбарьерные по теплоте плавления, но подбарьерные по теплоте кипения частицы, названные жидкокомпонентными, отвечают за близкий бесструктурный порядок связи со своей долей

$$P_{lqm} = 1 - P_{crm} - P_{vm} = \exp(-T_m/T) - \exp(-T_b/T). \quad (3)$$

Необходимо иметь в виду, что фазовые барьеры должны отличаться в зависимости от того, с какой точки зрения рассматривается система. Если анализируется ее *состояние* при фазовом равновесии, то следует учитывать только запас тепловой энергии в точке фазового перехода, соответственно RT_m и RT_b , так как в этом случае энергия не поглощается и не выделяется и контактирующие фазы имеют единый критический мольный запас тепловой энергии. Если же рассматривается процесс перехода одной фазы в новую в

другую, то здесь уместно использовать соответствующую теплоту фазового перехода. Первичное описание системы следует начинать с равновесного состояния, как и предусмотрено при выводе уравнений (1)-(3).

С помощью предложенных уравнений удалось описать пластичность и деформируемость металлов при прокатке [6, 7], испаряемость твердых и жидких веществ [8, 9], а также обосновать предельную хаотизацию термодинамической системы в газообразном состоянии с расчетом максимального значения энтропии для моля вещества $S_{\infty} = 455,251 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{К)}$ – новой физико-химической константы [10, 11].

Особо детальный подход потребовался для описания жидкого состояния, что отразилось в необходимости использования на основе концепции хаотизированных частиц трех последовательно усложняющихся моделей температурной зависимости вязкости [12, 13].

Прежде всего с новой точки зрения оказалось, что доля кристаллоподвижных частиц в жидком состоянии остается больше, чем каждая доля для других сортов хаотизированных частиц. Этим диктовалась целесообразность установления взаимосвязи вязкости именно с долей кристаллоподвижных частиц как препятствующих текучести расплава. Виду того что с повышением температуры содержание таких частиц (1), как и сама вязкость, убывают, то, постулируя подчиненность обеих зависимостей распределению Больцмана и сопоставляя их в нормированном (безразмерном) виде, получили формулу

$$\nu = \nu_r T_r / T, \quad (4)$$

где ν_r и T_r – соответственно кинематическая вязкость и абсолютная температура для некоторой реперной точки, выбираемой в принципе произвольно в качестве наиболее надежного экспериментального определения. Тем самым данная формула оказывается полуэмпирической, поскольку, с одной стороны, она основана на фундаментальном распределении Больцмана через зависимость (1), а с другой – включает хотя и единственную, но все-таки экспериментально определяемую величину. Если же удастся теоретически, например, методами квантовой химии, найти хотя бы единственное надежно определенное значение вязкости при какой-либо температуре, то можно усилить фундаментальность дан-

ной зависимости, правда, если в самих кванто-во-химических моделях не будет ни одного эмпирического параметра.

Проверка первой модели вязкости (4) на основе кристаллоподвижных частиц показала в целом ее адекватность для множества расплавов металлов. Однако в некоторых случаях фактическая зависимость оказывалась несколько сильнее, чем (4). Естественно было предположить, что эти отклонения могли быть вызваны разжигающим действием присутствующих в расплаве жидкоподвижных и пароподвижных частиц. Дополнительная нормировка базовой зависимости (4) по содержанию жидкоподвижных частиц на основе зависимости (3) приводит ко второй модели вязкости

$$\nu = \frac{\nu_r T_r [\exp(-T_m/T_r) - \exp(-T_b/T_r)]}{T [\exp(-T_m/T) - \exp(-T_b/T)]}. \quad (5)$$

Еще более сильная зависимость от температуры получается при учете суммарного содержания жидкоподвижных и пароподвижных частиц, т.е. $P_{lqm+vm} = \exp(-T_m/T)$, в результате чего выводится третья модель

$$\nu = \frac{\nu_r T_r}{T} \exp\left(\frac{T_m}{T} - \frac{T_m}{T_r}\right). \quad (6)$$

Широкая проверка этих трех моделей на всем доступном справочном материале по вязкости расплавов металлов позволила установить [11], что, во-первых, не было ни одного случая неподчинения справочных данных какой-либо из трех предложенных моделей; во-вторых, эта подчиненность оказалась в согласии с различием в конфигурациях электронных оболочек и потенциалами ионизации металлов, т.е. с периодическим законом Д.И. Менделеева.

И все-таки необходимость проверки каждой из трех моделей вязкости и выбора наиболее адекватной вносит некоторую неопределенность в метод построения подобной зависимости, к тому же усложняющую процедуру обработки данных. Это заставило более детально рассмотреть природу жидкого состояния, оставаясь в рамках концепции хаотизированных частиц.

Первая попытка направлена на более строгий учет природы вещества не по температуре плавления T_m , как это реализовано в уравнении (1), а по теплоте плавления ΔH_m , которая служит не только тепловым барьером, так как включает

энергию на ослабление притяжения частиц при плавлении и характеризует не состояние, а процесс разрушения дальнего порядка связи. В этом случае зависимость (1) преобразуется к виду

$$P_{crm} = 1 - \exp[-\Delta H_m/(RT)]. \quad (7)$$

Нормируя, как и раньше, зависимость для вязкости по реперному значению ν_r при T_r и сопоставляя с P_{crm} в общем диапазоне температур вплоть до бесконечно высокой температуры, при которой вязкость будет стремится к нулю (и где жидкость может существовать в закритической области температуры и давления в неразличимом с газом состоянии), получим следующие характеристики сравниваемых зависимостей:

$$\frac{\nu_r}{\nu} = 1 \quad T > \frac{\nu}{\nu_r} > \frac{0}{\nu_r} = 0 \quad (8)$$

$$1 - \exp[-\Delta H_m/(RT_r)] > 1 - \exp[-\Delta H_m/(RT)] > 0 \quad (9)$$

Нижнее неравенство только по правому пределу совпадает с верхним (с учетом того, что при $T \rightarrow \infty \exp[-\Delta H_m/(RT)] \rightarrow 1$), поэтому необходимо это неравенство тождественно преобразовать следующим образом:

1. Почленно вычитая единицу из всех его частей и меняя вместе со знаками частей направление неравенства:

$$\exp[-\Delta H_m/(RT_r)] < \exp[-\Delta H_m/(RT)] < 1.$$

2. Логарифмируя все части неравенства и вновь меняя знаки частей и направление неравенства

$$\frac{\Delta H_m}{RT_r} > \frac{\Delta H_m}{RT} > 0.$$

3. Сокращая все части неравенства на $\Delta H_m/(RT_r)$:

$$1 > T_r/T > 0. \quad (10)$$

В этом виде данное неравенство оказывается по пределам полностью идентичным с неравенством для нормированной вязкости (8). Как и раньше, основываясь на постулате подчинения распределению Больцмана обеих температурных зависимостей – вязкости и доли кристаллоподвижных частиц – получаем достаточные основания для отождествления внутренних частей нормированных по единой реперной точке неравенств (8) и (10):

$$\frac{\nu}{\nu_r} = \frac{T_r}{T}, \quad (11)$$

откуда приходим к выражению

$$\nu = \nu_r T_r / T,$$

полностью идентичному ранее полученному (4) без учета ΔH_m .

Этот результат можно рассматривать как свидетельство универсальности базовой зависимости (4) и вместе с тем как подтверждение фундаментального значения кристаллоподвижных частиц для отображения жидкого состояния. Роль этих частиц оказалась особенно конструктивной при расчетах размеров и долевом распределении кластеров – динамически неустойчивых зародышей твердой фазы – в расплавах металлов [14].

Следует иметь в виду, что концепция хаотизированных частиц основана на виртуальном присутствии каждого из трех частиц в твердом, жидком и газообразном состояниях вещества [15]. Виртуальность вообще является способом существования вещества. Так, в твердом состоянии, хотя кристаллоподвижные частицы в целом и обеспечивают дальний порядок связи и устойчивость кристалла, их присутствие в решетке оказывается обменным с более энергоемкими частицами – жидкоподвижными и пароподвижными – и потому кратковременным, виртуальным, с постоянно меняющейся мозаикой узлов и вакансий в каждой элементарной ячейке. Каждая отдельная частица согласно распределению Больцмана за краткий период времени, зависящий от чрезвычайно большой частоты колебаний и парных соударений, порядка 10^{12} с^{-1} , успевает побывать во всех трех своих ипостасях. Можно сказать, что в твердом состоянии постоянно виртуально содержится и жидкое и газообразное состояния, причем последнее даже фиксируется в форме равновесного давления пара над поверхностью кристалла с абсолютно одинаковым распределением частиц по кинетической (тепловой) энергии в газе и твердом веществе. Присутствие жидкоподобного (виртуального) состояния в таком веществе подтверждается предельной растворимостью его согласно уравнения Шредера, совпадающего по форме и по сути с суммарной долей жидкоподвижных и пароподвижных частиц, из которых первые являются доминирующими:

$$P_{crm+vm} = \exp[-\Delta H_m/(RT)]. \quad (12)$$

Подобная виртуальность характерна и для жидкого, и для газообразного состояний, т.е. можно говорить о виртуальном присутствии твердого и газообразного в жидком, твердого и жидкого в газообразном. Что касается собственно жидкого состояния, то оно было детально рассмотрено по присутствию в них кристаллоподвижных частиц в форме n -частичных кластеров в работе [16].

В частности, математический анализ зависимостей для общей равновесной доли кристаллоподвижных частиц (1) и (7) позволил получить долевое распределение кластеров по числу входящих в них частиц

$$P_{crm,n} = P_{crm}^n (1 - P_{crm}), \quad (13)$$

где $P_{crm,n}$ – доля кластеров из n частиц, включая мономеры ($n = 1$). При этом среднеинтегральное число частиц в кластере выразилось как

$$\bar{n} = 1 - 1/\ln P_{crm}. \quad (14)$$

Учет природы вещества через теплоту плавления и соответственно по формуле (7) раскрывает зависимости (13) и (14) как функцию температуры:

$$P_{crm,n} = \{1 - \exp[-\Delta H_m/(RT)]\}^n \exp[-\Delta H_m/(RT)], \quad (15)$$

$$\bar{n} = 1 - 1/\ln \{1 - \exp[-\Delta H_m/(RT)]\}. \quad (16)$$

Из последнего выражения следует, что среднее число частиц в виртуально существующих кластерах с повышением температуры уменьшается, в пределе при $T \rightarrow \infty$ составляя единицу, т.е. кластеры полностью распадаются на мономеры. Очевидно, этим и вызывается уменьшение вязкости жидкости, когда в ней постепенно исчезают n -частичные образования. В более унифицированной форме, с заменой ΔH_m на RT_m , т.е. с учетом теплового барьера в точке плавления, уравнение (16) сводится к виду

$$\bar{n} = 1 - 1/\ln [1 - \exp(-T_m/T)], \quad (17)$$

в котором сохраняется та же тенденция по влиянию температуры.

Возможно, уравнения (16) и (17) более непосредственно коррелируют с температурным изменением вязкости, однако отождествление их в нормированном виде по вышеописанной процедуре приводит к более сложным выражениям, соответственно

$$\nu = \nu_r \frac{\ln \{1 - \exp[-\Delta H_m/(RT_r)]\}}{\ln \{1 - \exp[-\Delta H_m/(RT)]\}}, \quad (18)$$

$$\nu = \nu_r \frac{\ln \{1 - \exp[-T_m/T_r]\}}{\ln \{1 - \exp[-T_m/T]\}}. \quad (19)$$

Проверочные расчеты показали, что они практически не отличаются от результатов по простейшей формуле (4), тем самым расходясь с другими моделями (5) и (6). Это вполне объяснимо, так как модели (4), (18) и (19) основаны на учете только кристаллоподвижных частиц. И все-таки выход на корреляцию вязкости со средним числом частиц в кластере является принципиально важным, поскольку он прямо указывает на недостаточность учета только элементарных кластеров в случае существенного расхождения с экспериментальными данными по вязкости. Вероятно, более сильная зависимость от температуры помимо ее обоснования за счет разжижающего влияния жидкоподвижных и пароподвижных частиц по моделям (5) и (6) может быть объяснена образованием ассоциированных или агрегированных элементарных кластеров, разрушение которых с повышением температуры происходит параллельно с разрушением элементарных кластеров, что и создает эффект более сильного влияния температуры на вязкость в случае формирования подобных ассоциатов или агрегатов.

Это позволяет учесть данный эффект в рамках базовой модели (4) путем усиления фрагмента (T_r/T) так, как учитывается вероятность соударений одинаковых частиц (в данном случае кластеров), т.е. путем возведения вероятности элементарного события в степень, равную числу соударяющихся частиц:

$$\nu = \nu_r (T_r/T)^a. \quad (20)$$

Здесь показатель a имеет смысл степени ассоциации \bar{n} -частичных кластеров. При $a = 1$ (20) сводится к (4), откуда следует, что зависимость с $a < 1$ лишена физического смысла. Это соответствует действительности, так как предыдущий анализ моделей (4), (5), (6) применительно ко всем расплавам металлов показал [11], что реальных зависимостей слабее (4) не обнаружено. Поэтому следует ожидать, что любая более сильная зависимость от температуры может быть выражена по (20) с $a > 1$.

Учет этого показателя хотя и потребует дополнительной обработки данных по вязкости, но зато позволит более детально отобразить структуру расплава с выходом на параметры, поддающиеся количественному выражению и физико-химическому контролю. В связи с этим параметр a может быть определен из (20) как

$$a = \frac{\ln(\nu/\nu_r)}{\ln(T_r/T)}. \quad (21)$$

Для этого целесообразно использовать все экспериментальные значения вязкости при различных температурах за исключением ν_r , T_r , приводящего к неопределенности $a = 0/0$, с последующим усреднением параметра агрегации:

$$\bar{a} = \frac{1}{m} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq r}}^m \frac{\ln(\nu_i/\nu_r)}{\ln(T_r/T_i)}. \quad (22)$$

Как обычно, среднее значение необходимо проверить на представительность по критерию однородности множества и затем использовать в уравнении (20) для получения расчетных значений и сравнения с экспериментальными по коэффициенту корреляции.

В принципе, все выкладки для кинематической вязкости могут быть пересчитаны на динамическую вязкость по связывающей их формуле $\eta = \rho\nu$ (ρ – плотность расплава) либо напрямую с заменой ν на η и соответственно реперной точки ν_r на η_r . Эта замена оправдана весьма слабой зависимостью плотности от температуры (несколько процентов во всем диапазоне жидкого состояния) в сравнении с 3-4 кратным изменением вязкости в том же диапазоне [1]. Так или иначе полученная более обобщенная форма температурной зависимости вязкости может быть использована для расчета энергии активации вязкого течения расплава в комбинации с уравнением Френкеля для динамической вязкости

$$\eta = A \exp\left(-\frac{U}{RT}\right). \quad (23)$$

Здесь A и U соответственно постоянные предэкспоненциальный множитель и энергия активации вязкого течения, смысл которых различными авторами трактуется в зависимости от предполагаемого характера межчастичного взаимодействия и квазикристаллической структуры жидкости [1]. Отмечается, что уравнение справедливо для узкого диапазона температур и не пригодно для полного описания жидкого состояния. Отсюда следует необходимость представления обобщенной зависимости (20) или эквивалентной ей для динамической вязкости

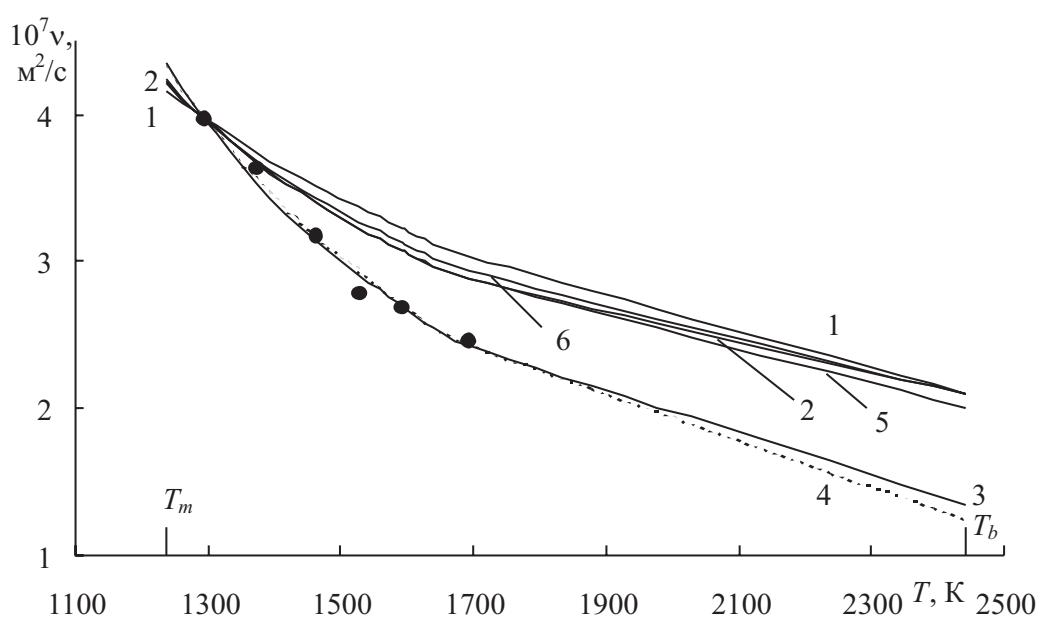
$$\eta = \eta_r(T_r/T)^a \quad (24)$$

в координатах $\ln \eta - 1/T$ для выделения псевдопрямoliniевых участков с целью обработки их по уравнению Френкеля и определением величины энергии активации вязкого течения. Возможно, это потребует пересчета исходных данных (при достаточности их объема) на этих участках с уточнением степени ассоциации кластеров на каждом из участков.

Необходимо отметить, что хотя выбор реперной точки не имеет принципиального значения, ее целесообразнее фиксировать вблизи (но не в точке) кристаллизации, так как при пониженных температурах вязкость определяется более надежно и имеет наиболее высокие значения. В самой же точке кристаллизации из-за возможного присутствия неопределенного количества равновесной твердой фазы вязкость эмульсии будет завышенной против вязкости чисто жидкого состояния.

Таблица. Сопоставление данных по кинематической вязкости серебра, рассчитанных по различным моделям

	$\nu \cdot 10^7, \text{м}^2/\text{с}, \text{при температуре, К}$						
	$T_m = 1235$	1293	1373	1463	1528	1593	$T_b = 2443$
$\nu_{\text{эксп}}[18]$	–	3,98	3,64	3,18	2,79	2,69	2,46
$\nu(4)$	4,17	3,98	3,75	3,52	3,37	3,23	3,04
$\nu(5)$	4,24	3,98	3,68	3,40	3,23	3,08	2,89
$\nu(6)$	4,36	3,98	3,55	3,15	2,91	2,70	2,43
$\nu(18)$	4,23	3,98	3,68	3,41	3,24	3,08	2,88
$\nu(19)$	4,21	3,98	3,70	3,44	3,28	3,13	2,94
a	–	–	1,49	1,82	2,13	1,88	1,79
$\nu(20)$	4,33	3,98	3,57	3,18	2,94	2,72	2,44
							1,25



n – кинематическая вязкость, T – температура. Точки – экспериментальные данные [18],
1 – по (4), 2 – по (5), 3 – по (6), 4 – по (20), 5 – по (18), 6 – по (19)

Рис. Зависимость кинематической вязкости серебра от температуры

Для примера приведем обработку данных по вязкости серебра, ранее осуществленную только по моделям (4)-(6) [17].

Для серебра в работе [1] со ссылкой на первоисточник [18] приводятся данные по кинематической вязкости при различных температурах. Температуры плавления и кипения взяты из справочника [19]: $T_m = 1235$ К и $T_b = 2443$ К, $\Delta H_m = 11283$ Дж/моль.

В качестве реперной точки выбраны наиболее близкие к температуре плавления данные по $T_r = 1293$ К и $v_r = 3,98 \cdot 10^{-7}$ м²/с.

Результаты расчетов по четырем моделям и по уравнениям (18), (19) в сопоставлении с экспериментальными данными приведены в таблице и на рисунке.

Из полученных данных следует, что температурная зависимость вязкости по (4), определяемая влиянием только доли кристаллоподвижных частиц, оказывается наиболее слабой и наиболее сильно отклоняющейся от экспериментальных данных.

Несколько сильнее зависимость по (5), учитывающая дополнительное влияние жидкокомпактных частиц, но также остающаяся вдалеке от опытных значений. По-видимому, в дан-

ном случае уменьшению вязкости с температурой способствуют не только жидкокомпактные, но и пароподвижные частицы согласно модели (6).

Температурные модели вязкости с учетом n -частичных кластеров в зависимости от природы вещества через ΔH_m по (18) и через тепловую энергию RT_m по (19) также сильно отклоняются от экспериментальных данных.

Модели вязкости по (6) и по (20) (с учетом ассоциации кластеров) оказываются более точными по описанию температурной зависимости. Среднее значение $n = 1,82$. Коэффициент корреляции для модели (6) составляет $R = 0,991$, для обобщенной (20) – 0,990, что указывает на их идентичность и достаточность применения модели более общего вида.

Таким образом, с учетом степени ассоциированности кластеров в качестве обобщенной модели вязкости расплавов в полном диапазоне температур можно использовать модель (20) с реперной точкой вблизи температуры плавления $T_r = 1293$ К и $n_r = 3,98 \cdot 10^{-7}$ м²/с по кинематической вязкости серебра с нахождением доверительного интервала и с округлением

$$n = (0,183/T^{1,82}) \pm 1,57 \cdot 10^{-9}, \text{ м}^2/\text{с}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Шпильрайн Э.Э., Фомин В.А., Сковородько С.Н., Сокол Г.Ф. Исследование вязкости жидкых металлов. – Москва: Изд. «Наука», 1983. – 243 с.
2. Малышев В.П., Нурмагамбетова А.М. Концепция хаотизированных частиц как основа единого отображения твердого, жидкого и газообразного состояний вещества // Вестник КазНУ, сер. хим. – 2004. – № 3(35). – С. 53-67.
3. Malyshev V.P., Nurmagambetova A.M. United interpretation of aggregate substance conditions by degree of its chaotization // Eurasian Physical technical journal. – 2004. – Vol. 1. – № 2. – P. 10-14.
4. Малышев В.П., Нурмагамбетова А.М. Единая трактовка агрегатных состояний вещества по степени их хаотизации // Тяжелое машиностроение. – 2005. – № 9. – С. 38-40.
5. Малышев В.П. Конструктивная роль неопределенности в химии и жизни // Тезисы докл. XVIII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии, посвященного 100-летию Менделеевских съездов: В 5 т.; т. 1. – Москва, 2007. – С. 324 (Полная публикация в журнале «Энциклопедия инженера-химика»). – 2008. – № 7, с. 2-8; – № 8, с. 9-17; – № 9, с. 2-14).
6. Малышев В.П., Абдрахманов Б.Т., Нурмагамбетова А.М. Плавкость и пластичность металлов. – М.: Научный мир, 2004. – 148 с.
7. Malyshev V.P., Nurmagambetova A.M. Predisposition of metals to deformation // Deformation & Fracture of Materials and Nanomaterials – DFMN 2007 / Book of articles, ed. by O.A. Bannykh et. al. – Moscow: Interkontakt Nauka, 2007. – Р. 91-93.
8. Нурмагамбетова А.М., Малышев В.П. Расчетная зависимость давления пара от температуры на основе нормированного распределения Больцмана // Вестник КазНУ, сер. хим. – 2005. – № 4(40). – С. 123-129.
9. Малышев В.П., Нурмагамбетова А.М. Согласование данных по давлению пара, температуре и теплоте кипения на основе концепции хаотизированных частиц // Комплексное использование минерального сырья. – 2005. – № 3. – С. 37-43.
10. Vitalii P. Malyshev, Sholpan A. Kuspekova, Astra M. Nurmagambetova. Thermodynamics of matter at infinite high temperature // 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists "WATOC'99", London, 1999. Р. 222.
11. Турдукуожаева А.М. Применение распределения Больцмана и информационной энтропии Шеннона к анализу твердого, жидкого и газообразного состояний вещества (на примере металлов): автореф. дисс. ... докт. техн. наук: 05.16.08. – Караганда: ХМИ, 2008. – 32 с.
12. Малышев В.П., Нурмагамбетова А.М. Вязкость жидких металлов в отображении концепцией хаотизированных частиц // Комплексное использование минерального сырья. – 2004. – № 6. – С. 81-90.
13. Малышев В.П., Нурмагамбетова А.М. Зависимость вязкости расплавов от температуры на основе концепции хаотизированных частиц // Тез. докл. XV межд. конф. по хим. термодинамике в России. Москва, 2005. Т. 1. С. 197.
14. Малышев В.П., Нурмагамбетова А.М., Бектурганов Н.С., Сулейменов Т., Абдрахманов Б.Т. Вероятность образования кластеров в жидких металлах по концепции хаотизированных частиц // Комплексное использование минерального сырья. – 2004. – № 6. – С. 38-47.
15. Малышев В.П., Бектурганов Н.С., Турдукуожаева А.М., Сулейменов Т. Основные понятия и зависимости в концепции хаотизированных частиц // Вестник инженерной академии. – 2009. – № 1. – С.
16. Малышев В.П., Турдукуожаева А.М. Равновесная самоорганизация наноразмерных кластеров твердой фазы в жидкости // Энциклопедия инженера-химика. – 2008. – № 4: – С. ; № 5: – С.; № 6: – С.
17. Малышев В.П., Турдукуожаева А.М., Оспанов Е.А. Вязкость расплавов серебра и золота с точки зрения концепции хаотизированных частиц // Матер. межд. научно-практик. конф., посв. 50-летию ХМИ им. Ж. Абшева «Комплексная переработка минерального сырья». – Караганда, 2008. – С. 376-379.
18. Вертман А.А., Самарин А.М. Вязкость жидких сплавов меди и серебра // Изв. АН СССР. Металлургия и топливо. – 1960. – № 4. – С. 95-98.
19. Свойства элементов: Справ, изд. – В 2-х кн. Кн. 1 / / Под ред. Дрица М.Е. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд. дом «Руда и Металлы», 2003. – 448 с.

Резюме

Алғашқы рет кластерлердің байланыстар дәрежесін ескере отырып бейберекет бөлшектер тұжырымдамасы негізінде балқымалардың тұтқырлығының жалпылама жартылай әмпиризмдік үлгісін жасаудың мүмкіншілігі қарастырылды.

Summary

For the first time the opportunity of creation of the generalized semiempirical model viscosity of melts on the basis of the concept chaotic particles in view of a degree associativity clusters is considered.

Химико-металлургический
институт им. Ж. Абшева

Поступила 22.05.09 г.

МЕДИЦИНА

О ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ОСНОВАХ НЕКОТОРЫХ КЛИНИЧЕСКИХ ПРОЯВЛЕНИЙ

Б. А. АТЧАБАРОВ

О СИМПТОМАХ СКРЫТОЙ СИНКИНЕЗИИ

Великий физиолог И. П. Павлов [9] в своих трудах не раз подчеркивал то, что дифференцировочное или иначе внутреннее торможение – самая лабильная, т. е. неустойчивая форма среди различных процессов мозговой коры. Он считал, что нарушение дифференцировочного торможения в нервных центрах является самым ранним проявлением поражения функциональной деятельности центральной нервной системы при различных патологиях.

А. Н. А. Бернштейн [3] считал, что в физиологии движения самым главным

действующим процессом является процесс координации движения.

Ослабление внутреннего торможения в корковом отделе двигательного анализатора как проявление нарушения процесса координации движения было описано мною более чем 50 лет тому назад под названием «симптом скрытой синкинезии».

Симптом проявляется тем, что при волевом двигательном акте сокращение одних групп мышц сопровождается возникновением непроизвольной скрытой активности, т. е. скрытой синкинезии других групп мышц, определяемое проявлением электрической импульсации в мышцах, не участвующих в двигательном акте и возникновением сопротивления к пассивному движению в суставах покоящейся конечности.

Исследования показали, что симптом скрытой синкинезии является ранним проявлением как очагового поражения двигательной зоны коры головного мозга, так и ранним симптомом возникновения энцефалопатии различного происхождения [1, 2, 4].

Наблюдения свидетельствуют, что разный уровень совершенствования дифференцировочного торможения в двигательном анализаторе обуславливает различную степень полноты движения у человека в его онтогенетическом развитии. Так, например, хаотичность движения у младенцев, неуверенность и медлительность, а также скованность, т. е. отсутствие свободы движения у стариков, обусловлено недоразвитием внутреннего торможения у первых и слабостью,

т. е. нарушением его функционирования у вторых.

У стариков из-за ослабления процесса внутреннего торможения в двигательном анализаторе, мышцы, которые не должны участвовать в совершающемся акте движения, фактически не бездействуют, а наоборот мешают в работе мышц, совершающих волевой двигательный акт.

В противоположность указанному выше, у молодых людей, особенно, например, у гимнастов или танцовщиц, из-за высокой степени совершенства внутреннего торможения в двигательном анализаторе, волевое сокращение какой-либо отдельной группы мышц, становится свободным в результате одновременно возникающего торможения других групп мышц непосредственно не участвующих в данном акте движения.

Метод исследования симптома скрытой синкинезии заключается в том, что у больного в спокойно лежачем положении исследователем (врачом) определяется степень свободы пассивной подвижности кисти в лучезапястном суставе правой или левой руки его. Затем исследователь, не переставая двигать кисть больного, предлагает ему медленно поднимать и опускать соответствующую нижнюю конечность. Если при этом исследователь будет ощущать сопротивление пассивному движению кисти, симптом считается положительным.

Когда симптом скрытой синкинезии является резко выраженным, он проявляется и тогда, когда больной поднимает и опускает нижнюю конечность противоположной стороны. В отдельных случаях симптом проявляется даже, когда больной, получив указание поднять нижнюю конечность, еще не поднял ее. При резко выраженному симптоме скрытой синкинезии, когда пассивное движение в лучезапястном суставе сильно затруднено, у больных отмечаются и другие патологические проявления: ослабление памяти, общая скованность, гипокинезия, ухудшение почерка.

Кроме того, при наличии выраженного симптома скрытой синкинезии, наблюдается еще и другой феномен. Если предложить больному, что-

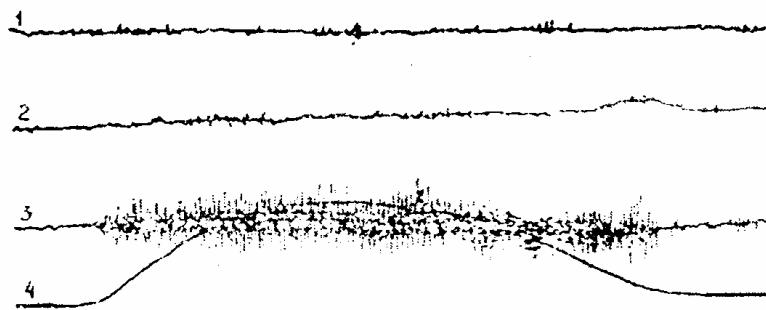


Рис. 1. Электрическая активность мышц при вызывании симптома скрытой синкинезии (симптом отрицательный)

Условные обозначения: 1. Электромиограмма разгибателей лучезапястного сустава
2. Электромиограмма сгибателей лучезапястного сустава
3. Электромиограмма прямой мышцы бедра во время активного поднимания ноги
4. Механограмма активного поднимания ноги

бы он одной рукой совершил движение кисти другой руки, то больной этого сделать или не может, или объем пассивного движения руки будет незначительным, толчкообразным.

Наличие симптома скрытой синкинезии можно фиксировать записью биотоков мышц предплечья спокойно лежащей руки в ответ на поднимание и опускание одной ноги (рис. 1 и 2).

Симптом скрытой синкинезии по характеру его проявления и происхождения имеет много общего с так называемыми «симптомом противодержания» и «симптомом узды» [8].

1. «Симптом прогиводержания» заключается в том, что при попытке произвести пассивное движение в какой-либо конечности у больного непроизвольно возникает значительное сопротивление вследствие напряжения мышц-антагонистов, действующих в противоположном направлении. А при «симптоме узды» больной, выполняя какое-либо движение, не заканчивает его, как бы сдерживаемый уздой. Например, выполняя пальценосовую пробу, останавливает палец, не доводя его до конца.

Симптом скрытой синкинезии в одних случаях является явным признаком патологии, а в других – может наблюдаться при некоторых функциональных нейродинамических сдвигах в норме.

Так, по наблюдению одного автора [5], у малотренированных людей или же у тренированных, но в момент усталости, в периоды перетренировок одновременно с работающей мышцей процесс возбуждения распространяется и на мыш-

цы антагонисты, а также даже на симметричные мышцы другой конечности.

Таким образом, симптом скрытой синкинезии или подобные ему проявления несовершенства координационных взаимоотношений в двигательном акте могут наблюдаться на различных трапах онтогенетического развития вследствие неполного формирования функции двигательного анализатора или они могут быть результатом патологических изменений полноценно сформировавшегося двигательного анализатора.

Мы полагаем, что возникновение симптома скрытой синкинезии связано с нарушением корковой нейродинамики.

Так, сигнал к действию, поступающий в двигательный анализатор, который предназначен на сокращение какой-либо одной группы мышц, например, сгибателей правого бедра, не только направляется в корковые центры этой группы мышц, но «разливается» по другим корковым центрам мышечных групп как правой, так и левой половины коры головного мозга. У здоровых людей в это время возникает процесс торможения в нервных центрах коры головного мозга остальных мышечных групп, кроме центра сгибателей бедра. В результате происходит расслабление всех других групп мышц и изолированное сокращение только сгибателей правого бедра.

Такой тормозной процесс И.П. Павлов называл дифференцировочным торможением и считал, что оно появляется в том же нервном центре (анализаторе), где возникает процесс возбужде-

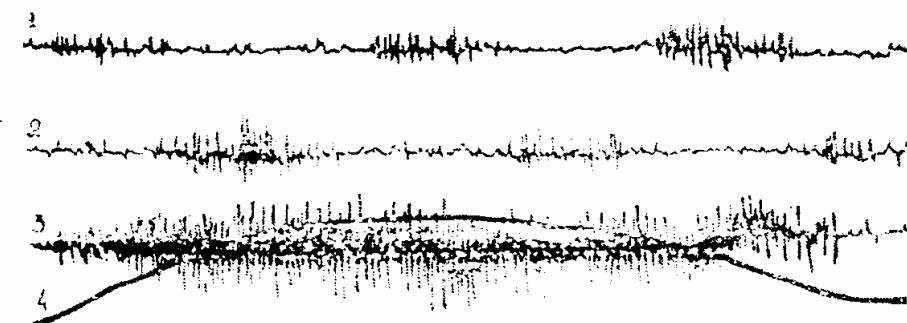


Рис. 2. Электрическая активность мышц при вызывании симптома скрытой синкинезии (симптом положительный)

1. Электромиограмма разгибателей лучезапястного сустава
2. Электромиограмма сгибателей лучезапястного сустава
3. Электромиограмма прямой мышцы бедра во время активного поднимания ноги
4. Механограмма активного поднимания ноги

дения, который должен подвергнуться дифференцировочному торможению [9].

Еще в 1950 г., изучая наличие симптома скрытой синкинезии у больных с гипертонической болезнью, мы пришли к выводу о том, что этот симптом обусловлен поражением лобных долей головного мозга [1]. Это соответствует данным исследований других авторов.

Так, М.Б. Кроль считал [6], что «лобные доли головного мозга играют роль тормозящего или денервационного центра». И.Л. Бернштейн в своей книге [3], посвященной физиологии движения, пишет, что при поверхностном взгляде на больного с поражением премоторной зоны можно увидеть, что его движения неловки. Психологические пассивные элементы, чередующиеся во всяком движении с активными (опускание руки после ее поднятия, отпускание кнопки после нажатия на нее), у него одинаково активно, требует особого акта внимания и особого усилия воли. У премоторного больного не выпадают никакие движения из нижележащих уровней центральной системы, в частности возможность произвольных движений. Они становятся только скандированными и напряженными, больной лишается способности бессознательно регулировать движения.

Следует отметить, что описываемый нами симптом скрытой синкинезии некоторые авторы [7, 10, 11], называя его по-другому, трактуют как изменения тонуса мышц, возникающего вследствие нарушения функции подкорковых образований. По нашему убеждению такое понимание

указанной научной реальности является ошибочным.

Симптом скрытой синкинезии является клиническим проявлением дефекта функционирования премоторной зоны коры головного мозга, обусловленного ослаблением внутреннего, т. е. дифференцировочного торможения в двигательном анализаторе.

Практическое значение симптома скрытой синкинезии заключается в том, что он может служить ранним диагностическим показателем энцефалопатии различного происхождения или локального поражения промоторной зоны коры головного мозга, обусловленных особенностями природы внутреннего торможения как физиологического феномена.

ЛИТЕРАТУРА

1. Атчабаров Б.А. Клиническая невропатология при артериальной гипертонии. Алма-Ата. 1953 г., 116 стр.
2. Атчабаров Б.А. Поражения нервной системы при свинцовой интоксикации. Из-во «Наука». Алма-Ата. 1966.. 487 стр.
3. Берштейн Н.А. О построении движения. М., 1954 г.
4. Бокебаев Т.Т. Церебральные проявления сахарного диабета. Автореферат диссертации, Алматы, 2001 г.
5. Кесарева Е.П. Тonus скелетных мышц и его регуляция у здорового человека. Минск, 1960 г.
6. Кроль М.Б. Невропатологические синдромы. М.-Л.. 1936 г.
7. Лещенко Г.Д. «Врачебное дело». 1946 г., № 11-12.
8. Охрименко Н.Н. Бродовский В.К., 8. Корнев И.М. Справочник основных неврологических синдромов и симптомов. Чита, 1960 г.
9. Павлов И.П. Двадцатилетний опыт объективного изучения нервной деятельности животных. М., 1951 г.
10. Светник З.Ю.. Сафонова Г.А. Врачебное дело. 1946. № 11-12.
11. Noica D., Draganesco S. Revue neurobiologique, 1935, 67, 75-79 р.

B. A. АТЧАБАРОВ

СПОСОБ ДИАГНОСТИКИ УТОМЛЕНИЯ ПО ОЦЕНКЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ ДВИГАТЕЛЬНОГО АНАЛИЗАТОРА

Как известно краеугольным вопросом физиологии труда является проблема утомления и, в частности, установление наличия и степени выраженности его у работающего человека.

В предложенных в литературе методиках диагностики утомления имеются существенные недостатки.

Во-первых, в тестах, предназначенных для определения наличия утомления, не проводится дифференциация степени нагрузки для отдельных людей, в соответствии с их индивидуальным физическим развитием.

По литературным данным, утомляемость обычно определяется эргографом путем записи сокращения мышц при определенной физической нагрузке одинаковой для всех исследуемых. Однако, такой подход может извратить истинную картину, т. к. одна и та же нагрузка не является адекватным, т. е. одинаковым, физическим усилием для разных людей с различным физическим развитием.

Во-вторых, при определении наличия утомления не учитывается значение продолжительности интервалов между отдельными мышечными сокращениями, ибо при относительно малой мышечной нагрузке небольшие промежутки времени между отдельными сокращениями мышц могут дать показания на наличие утомления у испытуемого при действительном его отсутствии, а излишне большие промежутки времени между сокращениями мышц могут дать показания на отсутствие утомления при его наличии. Это связано с тем что, по данным некоторых ученых [4], при нарастании утомления мышц соответственно возрастает и время отдыха необходимое для восстановления исходного состояния.

Учитывая недостатки имеющихся в литературе методик определения мышечного утомления, нами был предложен новый метод, сущность которого сводится к тому, что проводится испытание функционального состояния нервно-мышечной системы с подачей нагрузки испытуемым

в соответствии с особенностями физического развития каждого из них и временными параметрами испытательного периода одинаковыми для всех, но не приводящих к возникновению признаков утомления при его фактическом отсутствии [1,2].

По нашим данным, у здоровых людей в состоянии нормы при максимальной мышечной нагрузке с ритмом сокращения мышц через каждые 10 сек. в течение 2 мин., со стороны функционирующих групп мышц не наблюдается признаков утомления, а при наличии у испытуемого легкой формы утомления, признаки его появляются только к концу этого срока испытания. Эти данные согласуются с наблюдением Б.Н. Дедова [3]. По его утверждению, у человека при отсутствии утомления и сокращении мышц с интервалом времени 10 сек., мышца может функционировать долго, не приходя в состояние утомления.

Предлагаемый нами метод диагностики утомления сводится к следующему.

1. Испытуемый сжимает динамометр кистью руки с максимальным усилием и с интервалом времени между каждым сжатием 10 сек. в течение 2 мин. При этом производится 12 циклов сжатия по 10 сек. каждый, из которых 2,5 сек. является временем активного мышечного усилия и 7,5 сек. временем отдыха (расслабления мышц).

2. Регистрация величины развиваемых усилий циклов сжатия динамометра в течение двух минут производится на фоне имеющегося сведения о величине силы мышц испытуемого в норме и фактически будет представлять из себя его эргограмму.

Таким образом, предлагаемый нами метод определения утомляемости мышц, основанный на выполнении испытуемым максимального волевого мышечного усилия при минимальном времени между сокращениями мышц, восстановливающее в норме исходное состояние двигательного анализатора, позволяет функционировать

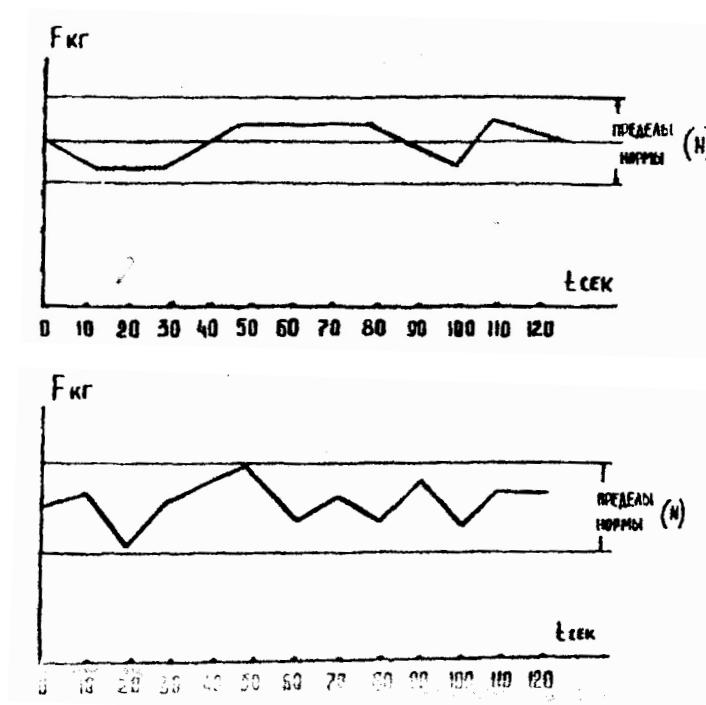


Рис. 1. Первый тип эргограмм.

Условные обозначения: F кг. - сила мышц кисти руки; t сек. - время в секундах; N - пределы силы мышц кисти в норме

нервно-мышечному аппарату на границе предела физиологической возможности.

Исследования, проведенные с использованием предлагаемой методики, показали наличие у обследованных пяти различных типов эргограмм, что свидетельствует о стольких же разных функциональных состояниях двигательной зоны коры головного мозга (двигательного анализатора). Эти различия иллюстрируются показом ниже эргограмм обследованных (рис. 1, 2, 3, 4, 5).

Первое. Нормальное функциональное состояние двигательного анализатора (рис. 1, первый тип эргограмм).

При максимальном, но кратковременном мышечном напряжении, повторяющемся через каждые 10 сек. в течение 2 мин., нервная система функционирует с полным эффектом, показывая отсутствие истощения нервно-мышечной системы. А если при этом и проявляется некоторое ее ослабление, то и оно выражено незначительно. Первый тип эргограмм свидетельствует о хорошем высоком уровне силы основных нервных процессов, достаточной степени уравновешенности их, обусловленной, по всей вероятности, обеспеченностью процесса возбуждения энергетическим потенциалом.

Второе. Нахождение двигательного анализатора в состоянии превентивного торможения (рис. 2, второй тип эргограмм). По мнению некоторых авторов, такое состояние также называется «оперативным покойем» или «адаптацией».

В состоянии превентивного торможения нервные клетки на слабые раздражители отвечают слабым эффектом, а на сильные - нарастающим эффектом.

В этом состоянии функциональная нагрузка на нервную систему, особенно в начальных ее этапах, не приводит к истощению энергетического потенциала возбуждения. Истощение энергетического потенциала возбуждения, как правило, возникает в конечных этапах серии физических нагрузок и тем самым нервная система, подвергающаяся функциональной нагрузке, вступает в положение запредельного торможения только на этих последних этапах нагрузок.

Анализ имеющегося научного материала показывает, что состояние превентивного торможения ближе всего примыкает к норме, т. е. оно как бы является промежуточной формой между нормой и патологией функционального состояния двигательного анализатора.

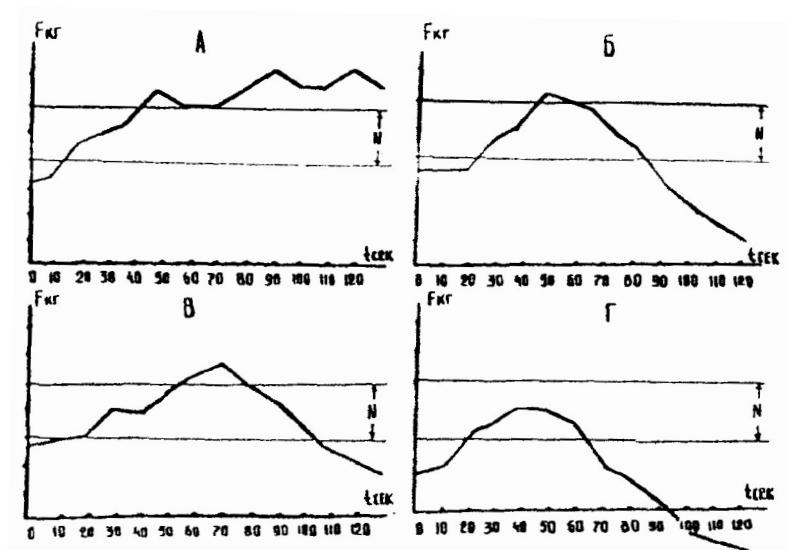


Рис. 2. Второй тип эргограмм.
Условные обозначения: F кг. - сила мышц кисти руки;
t сек. - время в секундах; N - пределы силы мышц кисти в норме

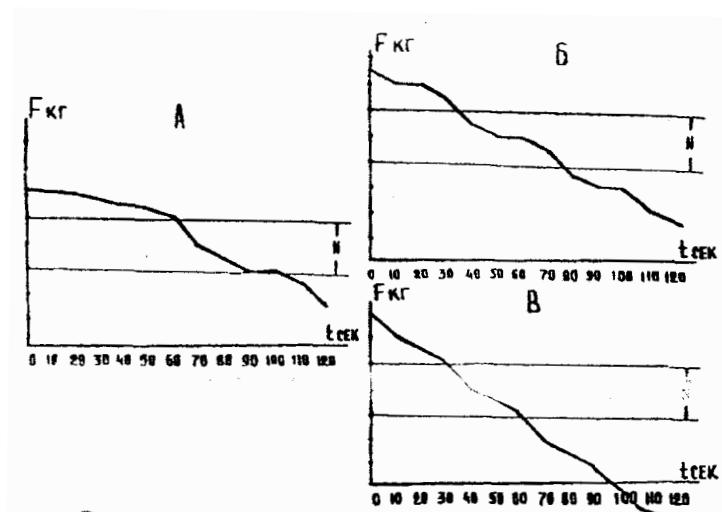


Рис. 3. Третий тип эргограмм. Условные обозначения: F кг. – сила мышц кисти руки;
t сек. – время в секундах; N – пределы силы мышц кисти в норме

Третье. Состояние уравнительной стадии торможения (рис. 3, третий тип эргограмм).

И. П. Павлов [1] считал снижение эффекта от сильного раздражения, возникающего при повышенной возбудимости корковых клеток, уравнительной стадией торможения.

При этом состоянии на эргограмме мышечная сила в начале испытания на утомление выявляется в пределах нормы или выше нормы, но затем становится видным возникновение признака прогрессирующего утомления. В этом состоянии условия испытания по нашей

методике исследований для двигательного анализатора оказываются сверхсильной нагрузкой, приводящей к угнетению процесса возбуждения в результате превалирующего влияния возникающего запредельного торможения. По всей вероятности истощение процесса возбуждения наступает в результате недостаточности восстановления израсходованных энергоресурсов.

Четвертое. Состояние ультрапарадоксальной стадии запредельного торможения (рис. 4, четвертый тип эргограмм).

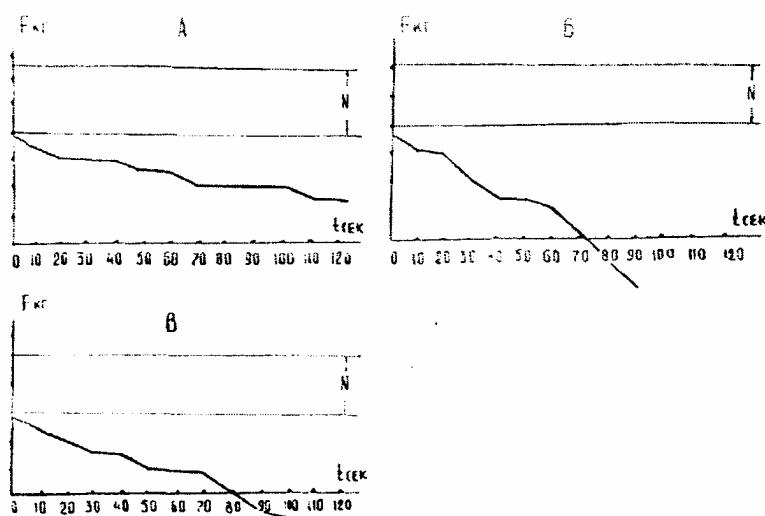


Рис. 4. Четвертый тип эргограмм.

Условные обозначения: F кг - сила мышц кисти руки; t сек. - время в секундах;
N - пределы силы мышц кисти в норме

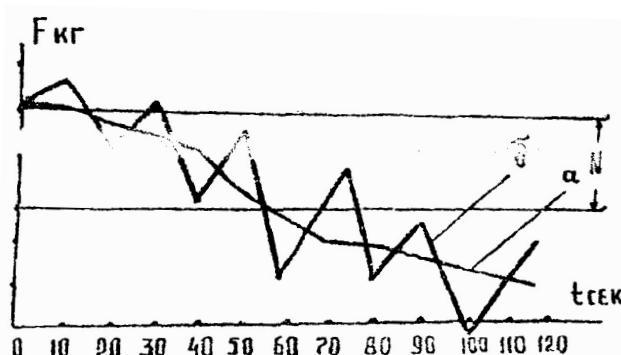


Рис. 5. Пятый тип эргограмм. Условные обозначения F кг – сила мышц кисти руки;
t сек. – время в секундах; N - пределы силы мышц кисти в норме

Снижение эффекта от сильного раздражения при первоначальной слабости процесса возбуждения, И.П. Павлов называл парадоксальной стадией запредельного торможения [5].

Для этого состояния характерно снижение силы мышц до проведения диагностической пробы на утомление. А во время же проведения испытания на наличие утомления происходит прогрессирующее снижение силы мышц, свидетельствуя об имевшем место истощении нервно-мышечной системы. Такое состояние должно быть обусловлено слабостью процесса возбуждения из-за повышенной истощаемости энергетического потенциала клеток.

Пятое. Состояние неуравновешенности нервных процессов (рис. 5, пятый тип эргограмм).

Волнообразные эргограммы характеризуют неуравновешенность возбудительного и тормозного процессов. По всей вероятности такое состояние является следствием нарушения расходования и восстановления энергии процесса возбуждения.

Следует отметить, что это состояние выделено нами как самостоятельное сугубо условно, ибо слабая степень волнообразности кривых в эргограммах может иметь место и при других формах функционального состояния нервной системы.

В заключение отметим, что в согласии с литературными данными и на основании имеющегося у нас фактического материала, мы склонны объяснить механизм утомления мышц развитием запредельного торможения в двигательной зоне коры головного мозга.

Физиологический механизм произвольных движений расшифрован в науке в достаточной степени.

Считается, что всякое волевое движение у человека представляет из себя двигательный стереотип, определяющийся сменой очагов возбуждения и торможения в коре головного мозга. При других равных условиях сила сокращения скелетных мышц зависит от интенсивности возбудительного процесса в двигательном анализаторе.

В настоящее время получило общее признание мнение, что утомление – это снижение работоспособности прежде всего корковых клеток, главным образом в результате развития в них охранительного торможения или по причине первичного ослабления процесса возбуждения вследствие истощения (расходования) энергетического потенциала клеток или же из-за запаздывания своевременного восстановления израсходованного функционального потенциала их. При этом считается, что уровень работоспособности корковых центров движения в каждый отдельный момент определяется алгебраической суммой этих процессов.

По мнению исследователей, нарушение корковой нейродинамики, обусловленное возникновением охранительного торможения, протекает обычно проявлением его различных фаз - парадоксальная, уравнительная и ультрапарадоксальная, что свидетельствует о парабиотической при-

роде торможения в центральной нервной системе во время мышечной работы [5].

Состояние утомления возникает тогда, когда нервный центр регуляции движения находится в состоянии уравнительной, ультрапарадоксальной или конечной стадии запредельного торможения.

При нормальном функциональном состоянии нервного центра регуляции движения или когда этот центр находится в фазе превентивного торможения, нагрузка на нервную систему, подаваемой при нашем методе исследования не сопровождается возникновением признаков утомления.

Следует отметить и то, что рекомендуемый нами метод исследования не только имеет непосредственное отношение к диагностике утомления, но он также представляет определенную ценность для оценки функционального состояния двигательного анализатора при различных патологиях центральной нервной системы, в частности при энцефалопатиях различного происхождения.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Атчабаров Б.А. Поражение нервной системы при свинцовой интоксикации. Из-во «Наука», Алма-Ата, 1966, 487 стр.
2. Атчабаров Б.А., Мансуров В.Ш., Герасименко В.Г. Способ диагностики утомления. Предварительный патент № 5440, Республика Казахстан, 15.12.97.
3. Делов В.Е. Физиология мышц и нервов. В кн.: К.М. Быков и др. «Учебник физиологии». М. 1955 г.
4. Лейник М.В. В кн.: Вопросы физиологии труда. М., 1957 г.
5. Павлов И.П. Двадцатилетний опыт объективного изучения высшей нервной деятельности животных. М., 1951 г.

НАШИ АВТОРЫ

Атчабаров Б.А. – академик Национальной академии наук Республики Казахстан
Агельменов М.Е. – д.х.н., Институт органического синтеза и углехимии, г. Караганда
Азмаганбетова Ж.Р. – соискатель, Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева
Байманкулов А.Т. – к.э.н., Костанайский государственный университет им. А. Байтурсынова
Боранбаев А.С. – PhD, Казахский университет технологий и бизнеса, г. Астана
Братухин С.М. – магистр, Институт органического синтеза и углехимии, г. Караганда
Глатоленков А.И. – к.т.н., ведущий научный сотрудник Института сейсмологии
Джазаиров-Кахраманов А.В. – научный сотрудник Астрофизического института им. В.Г.Фесенкова
Джомартов А.А. – д.т.н., Институт механики и машиноведения им. У. А. Джолдасбекова Министерства образования и науки Республики Казахстан
Дубовиченко С.Б. – д.ф.-м. н., проф., главный научный сотрудник Астрофизического института им. В.Г. Фесенкова
Кажикенова А.Ш. – старший преподаватель Карагандинского государственного университета им. Е. А. Букетова
Лущик А.Ч. – д.ф.-м.н., профессор, заведующий лабораторией Института физики Тартуского университета (Эстония)
Маароос А. – к.х.н., старший научный сотрудник Института физики Тартуского университета (Эстония)
Малышев В.П. – д.т.н., заведующий лабораторией энтропийно-информационного анализа Химико-металлургического института им. Ж. Абишева, г. Караганда
Молдабаева Г.Ж. – к.т.н., доцент, старший научный сотрудник лаборатории «Физико-технических проблем разработки месторождений» Института горного дела имени Д. А. Кунаева
Мулдахметов З.М. – академик Национальной академии наук Республики Казахстан, Институт органического синтеза и углехимии, г. Караганда
Мурзабеков З.Н. – д.т.н., доцент, декан факультета инженеринга и информационных технологий Алматинского технологического университета
Нурахметов Т.Н. – д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой Евразийского национального университета им. Л.Н.Гумилева
Поликарпов В.В. – инженер, Институт органического синтеза и углехимии, г. Караганда
Рысбайулы Б. – д.ф-м..н., Казахстанско-Британский Технический университет
Синчев Б.К. – д.т.н., профессор, Алматинский технологический университет
Токсанбаев Б.Ж. – соискатель, Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева
Турдукожаева А.М. – к.х.н., ведущий научный сотрудник, докторант Химико-металлургического института им. Ж. Абишева, г. Караганда
Уалиев Г.У. – академик Национальной академии наук Республики Казахстан, Институт механики и машиностроения им. У. А. Джолдасбекова Министерства образования и науки Республики Казахстан
Цай К.В. – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института ядерной физики, Национальный ядерный центр Республики Казахстан

ПРАВИЛА для авторов журналов НАН РК

В журналах публикуются научные статьи и заметки, экспресс-сообщения о результатах исследований в различных областях естественно-технических и общественных наук.

Журналы публикуют сообщения академиков НАН РК, а также статьи других ученых, **представленные действительными членами НАН РК** (академиками НАН РК), несущими ответственность за достоверность и значимость научных результатов и актуальность научного содержания рекомендуемых работ.

Представленные для опубликования материалы должны удовлетворять следующим требованиям:

1. Содержать результаты оригинальных научных исследований по актуальным проблемам в области физики, математики, механики, информатики, биологии, медицины, геологии, химии, экологии, общественных и гуманитарных наук, ранее не опубликованные и не предназначенные к публикации в других изданиях. Статья сопровождается разрешением на опубликование от учреждения, в котором выполнено исследование и представлением от академика НАН РК.

2. Статья представляется в одном экземпляре. Размер статьи не должен превышать 10 машинописных страниц (статьи обзорного характера – до 20 стр.), включая таблицы, рисунки, аннотацию в начале статьи перед основным текстом (аннотация до 1/3 стр. через 1 компьютерный интервал, 12 пт), список литературы, напечатанных в редакторе Word, шрифтом Times New Roman 14 пт, с пробелом между строк 1,5 компьютерных интервала, поля – верхнее и нижнее 2 см, левое 3 см, правое 1,5 см. Количество рисунков – не более пяти (для серий биологическая, геологическая, физико-математическая, химическая – не более 10). В начале статьи вверху слева следует указать индекс УДК. Далее посередине страницы прописными буквами (курсивом) – инициалы и фамилии авторов, ниже также посередине заглавными буквами (полужирным шрифтом) – название статьи; затем посередине строчными буквами в круглых скобках – название организации(ий), в которой выполнена работа, и город. Последняя страница подписывается всеми авторами. Прилагается электронный вариант на новом CD-диске.

3. Статьи публикуются на русском, казахском, английском языках. К статье необходимо приложить аннотацию (не менее 1/3 стр.) и название статьи на двух языках (на казахском и английском или на русском и английском) на отдельной странице и сведения об авторах (Ф.И.О., ученая степень, ученое звание, адрес, место работы, телефон, факс, e-mail) также на отдельной странице.

Редакторы: *Ж. М. Нургожина*
Верстка на компьютере *А.М. Кульгинбаевой*

Подписано в печать 10.06.2009.
Формат 60x88¹/₈. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
5 п.л. Тираж 300. Заказ 3.

Национальная академия наук Республики Казахстан
050021, Алматы, ул. Шевченко, 28. Тел. 293-95-07, 272-13-19, 272-13-18