Международная Объединенная Академия Наук

ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ НАУКИ И ОБРАЗОВАНИЯ

Научный журнал

**В выпуске собраны материалы
XXXVI международной научной конференции
«Тенденции развития науки и образования»**

31 марта 2018 г.

НОМЕР 36

ЧАСТЬ 1

LJOURNAL.RU

Самара 2018

УДК 001.1
ББК 60

Т34

Тенденции развития науки и образования. Научный журнал. В выпуске собраны материалы XXXVI международной научной конференции «Тенденции развития науки и образования» 31 марта 2018 г. Часть 1 Изд. НИЦ «Л-Журнал», 2018. - 64с.

SPLN 001-000001-0270-LJ
DOI 10.18411/lj-31-03-2018-1
IDSP 000001:lj-31-03-2018-1

В выпуске журнала собраны материалы из различных областей научных знаний. В данном издании приведены все материалы, которые были присланы на XXXVI международную научно-практическую конференцию **Тенденции развития науки и образования**

Журнал предназначен для научных работников, преподавателей, аспирантов и студентов.

Все материалы, размещенные в журнале, опубликованы в авторском варианте. Редакция не вносила коррективы в научные статьи. Ответственность за информацию, размещенную в материалах на всеобщее обозрение, несут их авторы.

Информация об опубликованных статьях будет передана в систему ELIBRARY

Электронная версия журнала доступна на сайте научно-издательского центра «Л-Журнал». Сайт центра: ljjournal.ru

УДК 001.1
ББК 60

SPLN 001-000001-0270-LJ

<http://ljjournal.ru>

Содержание

РАЗДЕЛ I. МАТЕМАТИКА	5
Бадриев И.Б., Буянов В.Ю., Макаров М.В. Производная Фреше оператора геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины.....	5
Финогенов Н.Ю. Фрактальная графика	12
Чебакова В.Ю., Соловьев П.С., Фадеева М.С. Математическая модель тлеющего разряда.....	13
 РАЗДЕЛ II. ХИМИЯ	 21
Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Теоретическая оценка относительной стабильности конформеров дигермана	21
Максимов Ф.Ф., Захарова С.С., Павлов Н.М., Максимова Т.П. Исследование химического состава Челябинского метеорита	23
Нефедьева Т.А. Качество родниковой воды Сурского района Ульяновской области.....	27
Нурымбетов Б.Ч., Кудайбергенова А.М. Изучение процессов гидратационного структурообразования в системе известково-белитовое вяжущее – карбонат – вода.....	30
Нурымбетов Б.Ч., Кудайбергенова А.М. Изучение процессов гидратационного структурообразования в системе известково-белитовое вяжущее –растворимый ангидрит-вода	33
Перепелицына С.Е., Корчунов И.В., Потапова Е.Н. Влияние современных добавок на свойства шлакосодержащих цементов	34
Шевердов В.П., Насакин О.Е., Илларионова Е.С. Синтез, противоопухолевая активность аннелированных полицианозамещенных пентакарбо- и азотсодержащих гетероциклов	37
 РАЗДЕЛ III. ФИЗИКА.....	 40
Рахымбеков А.Ж. Уравнение материального баланса на суперионике ...	40

РАЗДЕЛ IV. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ	43
Глухова Е.В. Анализ статистических данных с использованием платформы 1С.....	43
Егоров. А.Н., Кузнецов В.А. Параллельный подход к решению задачи оптимизации оперативного управления транспортным конвейером шлюзованной системы.....	48
Иванов Е. Д., Гриценко Е.М. Разработка мобильного приложения для проведения опросов в сервисных центрах.....	51
Мельниченко В.Н. Риски и отрицательные эффекты внедрения корпоративной системы управления проектами.....	54
Панченко А.О. Анализ и исследование существующих протоколов Интернета вещей	55
Тимофеева Н.В., Тропников А.С. Оптимизация деятельности по поддержке работы пользователей в сети предприятия	57
Шивкова Е.Г. Повышение производительности тестирования программного обеспечения при управлении тестовыми данными.....	61

РАЗДЕЛ I. МАТЕМАТИКА

Бадриев И.Б., Буянов В.Ю., Макаров М.В.

Производная Фреше оператора геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины

Казанский (Приволжский) федеральный университет
(Россия, Казань)

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-01

idsp: 000001:lj-31-03-2018-01

Аннотация

Рассмотрена геометрически нелинейная задача об изгибе трехслойных пластин с трансверсально-мягким заполнителем в одномерной постановке. Математически задача сформулирована в виде интегрального тождества, порождающего операторное уравнение в пространстве Соболева. Вычислена производная Фреше оператора.

Ключевые слова. Трехслойная пластина, трансверсально-мягкий заполнитель, геометрическая нелинейность, производная Гато., производная Фреше.

Введение.

Слоистые конструкции, в частности, трехслойные пластинки и оболочки, находят применение в различных областях техники – авиастроении, судостроении, строительстве и др. [1–7]. Для описания напряженно-деформированного состояния в несущих слоях используются уравнения модели Кирхгофа-Лява, в заполнителе – уравнения теории упругости, упрощенные в рамках принятой модели трансверсально-мягкого слоя и проинтегрированных по толщине с удовлетворением условий сопряжения слоев по перемещениям.

Данная работа является продолжением [8–14] и посвящена нахождению производной Фреше [15] оператора геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем, сформулированной в виде операторного уравнения в пространстве Соболева. Ранее в [14] была найдена производная Гато оператора. В настоящей работе доказано, что она является непрерывным оператором, а значит [15], совпадает с производной Фреше. Обобщенные постановки физически нелинейных и геометрически линейных задач рассмотрены в [16–20]. Нелинейные задачи теории мягких сетчатых оболочек изучены в [21–29]. Численное решение геометрически нелинейных задач проведено в [30–36].

1. Постановка задачи.

Изучаются задачи определения напряженно-деформированного состояния (НДС) бесконечно широких трехслойных пластин с трансверсально-мягким заполнителем. Длина пластины равна a , толщина заполнителя $2t$, толщины несущих слоев есть $2t_{(k)}$, k – номер слоя. Для описания НДС в несущих слоях используются уравнения модели Кирхгофа-Лява, в заполнителе – уравнения теории упругости, упрощенные в рамках принятой модели трансверсально-мягкого слоя и проинтегрированных по толщине с удовлетворением условий сопряжения слоев по перемещениям [37, 38]. Введем следующие обозначения: $H_{(k)} = t + t_{(k)}$ (здесь и в дальнейшем полагаем, что $k=1, 2$), $X_{(k)}^1$, $X_{(k)}^3$ – компоненты поверхностной нагрузки, приведенной к срединной поверхности k -го слоя, $w^{(k)}$ и $u^{(k)}$ – прогибы и осевые перемещения точек срединной поверхности k -го слоя, $T_{(k)}^{11}$, $M_{(k)}^{11}$ – мембранные усилия и внутренние изгибающие моменты в k -м слое соответственно. Считаем, что края пластины закреплены, т.е. $u^{(k)}(x) = 0$,

$w^{(k)}(x) = 0, dw^{(k)}/dx = 0$ при $x = 0, x = a$. Рассматриваем геометрически нелинейный случай:
 $T_{(k)}^{11} = B_{(k)} (du^{(k)}/dx + 0.5(dw^{(k)}/dx)^2), \quad M_{(k)}^{11} = D_{(k)} d^2 u^{(k)}/dx^2,$ где
 $B_{(k)} = 2t_{(k)} E^{(k)} / (1 - \nu_{12}^{(k)} \nu_{21}^{(k)})$ – жесткость k -го слоя на растяжение–сжатие, $E^{(k)}$ и $\nu_{12}^{(k)}, \nu_{21}^{(k)}$ – модуль упругости 1-го рода и коэффициенты Пуассона материала k -го слоя,
 $D_{(k)} = B_{(k)} h_{(k)}^2 / 3$ – изгибная жесткость k -го слоя. Пусть $U = (w^{(1)}, w^{(2)}, u^{(1)}, u^{(2)})$ – вектор перемещений точек срединных поверхностей несущих слоев, q^1 – касательные напряжения в заполнителе. Для q^1 предполагаем выполненными граничные условия $q^1(0) = q^1(a) = 0$. Пусть G_{13}, E_3 – модули поперечного сдвига и обжатия заполнителя, $c_1 = 2t/G_{13}, c_2 = t^3/(3E_3), c_3 = E_3/(2t), M_{(k)}^1$ – поверхностный момент внешних сил, приведенный к срединной поверхности k -го слоя.

2. Обобщенная постановка задачи в виде операторного уравнения.

Пусть $V_k = \overset{o}{W}_2^{(k)}(0, a)$ – пространства Соболева [39] со скалярными произведениями $(u, \eta)_k = \int_0^a d^k u / dx^k d^k \eta / dx^k dx, k=1, 2, V = V_2 \times V_2 \times V_1 \times V_1$. Будем обозначать скалярное произведение в V через $(\cdot, \cdot)_V$. В [9, 10] установлено, что решением рассматриваемой задачи есть элемент (U, q^1) , являющийся решением вариационного уравнения

$$b((U, q^1), (Z, y)) = f(Z) \quad \forall (Z, y) \in W = V \times V_1, \quad (1)$$

где форма $b(\cdot, \cdot)$ и функционал f , заданные на $W \times W$ и V , определяются по формулам

$$\begin{aligned} b((U, q^1), (Z, y)) = & \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \left[\frac{du^{(k)}}{dx} + \frac{1}{2} \left(\frac{dw^{(k)}}{dx} \right)^2 \right] \frac{d\eta^{(k)}}{dx} dx + \\ & + c_3 \int_0^a (w^{(2)} - w^{(1)})(z^{(2)} - z^{(1)}) dx + \int_0^a \left\{ \sum_{k=1}^2 H_{(k)} \frac{dz^{(k)}}{dx} + (\eta^{(2)} - \eta^{(1)}) \right\} q^1 dx + \\ & + \int_0^a \left\{ \left[\sum_{k=1}^2 H_{(k)} \frac{dw^{(k)}}{dx} + (u^{(2)} - u^{(1)}) + c_1 q^1 \right] y + c_2 dq^1/dx dy/dx \right\} dx = 0 \\ & \forall Z = (z^{(1)}, z^{(2)}, \eta^{(1)}, \eta^{(2)}) \in V, \quad \forall y \in V \end{aligned} \quad (2)$$

$$f(Z) = \int_0^a \sum_{k=1}^2 [X_{(k)}^1 \eta^{(k)} + M_{(k)}^1 \frac{dz^{(k)}}{dx} + X_{(k)}^3 z^{(k)}] dx \quad \forall Z \in V. \quad (3)$$

В [10] установлено, что форма $b(\cdot, \cdot)$, задаваемая (2), порождает оператор $A: W \rightarrow W$, определяемый формулой

$$b((U, q^1), (Z, y)) = (A(U, q^1), (Z, y))_W \quad \forall (Z, y) \in W, \quad (4)$$

где $(\cdot, \cdot)_W$ – скалярное произведение в W , а функционал f , задаваемый (3), порождает элемент $F \in V$, определяемый формулой $(F, Z)_V = f(Z)$ для всех $Z \in V$.

Поэтому задача (1) может быть записана в виде операторного уравнения

$$A(U, q^1) = (F, 0). \quad (5)$$

3. Производная Фреше оператора уравнения.

При вычислении производной Фреше нам потребуется следующая теорема [39, стр. 68].

Теорема 1. Пусть $\Omega \subset R^n$ – ограниченная область с регулярной границей Γ и $1 \leq p < \infty$.

Тогда $W_p^{(k)}(\Omega) \subset W_r^{(j)}(\Omega)$ для $0 \leq j < k$ и каждого r , удовлетворяющего условию $1/p - (k - j)/n \leq 1/r < 1$; кроме того, для любой функции $u \in W_p^{(k)}(\Omega)$ справедливо неравенство

$$\|u\|_{j,r} \leq C_{jr}^{kp} \|u\|_{k,p}, \quad (6)$$

где $\|\cdot\|_{k,p}$ – норма в $W_p^{(k)}(\Omega)$, а постоянная C_{jr}^{kp} зависит от Ω, j, k, p, r .

В [15] найдена производная Гато оператора A определяемого (2), (4). Обозначим $U = (w^{(1)}, w^{(2)}, u^{(1)}, u^{(2)})$, $\hat{U} = (\hat{w}^{(1)}, \hat{w}^{(2)}, \hat{u}^{(1)}, \hat{u}^{(2)})$, $Z = (z^{(1)}, z^{(2)}, \eta^{(1)}, \eta^{(2)})$.

Теорема 2. [15] Пусть оператор A порождается соотношениями (2), (4). Тогда он всюду дифференцируем по Гато, его производная Гато $A'(U, q^1)$ задается соотношением

$$\begin{aligned} (A'(U, q^1)(\hat{U}, \hat{q}^1), (Z, y))_W = & \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \left(\frac{d\hat{u}^{(k)}}{dx} + \frac{dw^{(k)}}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \right) \frac{d\eta^{(k)}}{dx} dx + \\ & + \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \left\{ \left[\frac{du^{(k)}}{dx} + \frac{1}{2} \left(\frac{dw^{(k)}}{dx} \right)^2 \right] \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} + \left(\frac{d\hat{u}^{(k)}}{dx} + \frac{dw^{(k)}}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \right) \frac{dw^{(k)}}{dx} \right\} \frac{dz^{(k)}}{dx} dx + \\ & + \int_0^a \sum_{k=1}^2 D_{(k)} \frac{d^2 \hat{w}^{(k)}}{dx^2} \frac{d^2 z^{(k)}}{dx^2} dx + c_3 \int_0^a (\hat{w}^{(2)} - \hat{w}^{(1)}) \sum_{k=1}^2 (2k-3) z^{(k)} dx + \int_0^a \left[\sum_{k=1}^2 H_{(k)} \frac{dz^{(k)}}{dx} + \right. \\ & \left. + (\eta^{(2)} - \eta^{(1)}) \right] \hat{q}^1 dx + \int_0^a \left[\sum_{k=1}^2 H_{(k)} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} + (\hat{u}^{(2)} - \hat{u}^{(1)}) \right] y dx + c_1 \int_0^a \hat{q}^1 y dx + c_2 \int_0^a \frac{d\hat{q}^1}{dx} \frac{dy}{dx} dx. \end{aligned} \quad (7)$$

Докажем, что справедлива

Теорема 3. Пусть оператор A порождается соотношениями (2), (4). Тогда его производная Гато $A'(U, q^1)$ является непрерывным оператором.

Доказательство. Обозначим $Y = (s^{(1)}, s^{(2)}, v^{(1)}, v^{(2)})$. Тогда для произвольного единичного вектора (Z, y) из W имеем с учетом (7), что

$$\begin{aligned} (A'(U, q^1)(\hat{U}, \hat{q}^1) - A'(Y, r)(\hat{U}, \hat{q}^1), (Z, y))_W = & \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \left[\left(\frac{d\hat{u}^{(k)}}{dx} + \frac{dw^{(k)}}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \right) - \right. \\ & \left. - \left(\frac{d\hat{u}^{(k)}}{dx} + \frac{dw^{(k)}}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \right) \right] \frac{d\eta^{(k)}}{dx} dx + \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \left\{ \left[\frac{du^{(k)}}{dx} + \frac{1}{2} \left(\frac{dw^{(k)}}{dx} \right)^2 \right] \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} + \right. \\ & + \left(\frac{d\hat{u}^{(k)}}{dx} + \frac{dw^{(k)}}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \right) \frac{dw^{(k)}}{dx} - \left[\frac{dv^{(k)}}{dx} + \frac{1}{2} \left(\frac{ds^{(k)}}{dx} \right)^2 \right] \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} - \left(\frac{d\hat{u}^{(k)}}{dx} + \frac{ds^{(k)}}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \right) \times \\ & \times \frac{ds^{(k)}}{dx} \left. \right\} \frac{dz^{(k)}}{dx} dx = \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \frac{d(w^{(k)} - s^{(k)})}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \frac{d\eta^{(k)}}{dx} dx + \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \frac{d(u^{(k)} - v^{(k)})}{dx} \times \\ & \times \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \frac{dz^{(k)}}{dx} dx + \frac{3}{2} \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \frac{d(w^{(k)} - s^{(k)})}{dx} \frac{d(w^{(k)} + s^{(k)})}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \frac{dz^{(k)}}{dx} dx + \\ & \vdots + \int_0^a \sum_{k=1}^2 B_{(k)} \frac{d(w^{(k)} - s^{(k)})}{dx} \frac{d\hat{u}^{(k)}}{dx} \frac{dz^{(k)}}{dx} dx = \sum_{k=1}^2 B_{(k)} (I_1^k + I_2^k + I_3^k + I_4^k). \end{aligned}$$

Из (6) вытекает следующее неравенство

$$\|w^{(k)}\|_{1,4} \leq C_{14}^{22} \|w^{(k)}\|_{2,2}, \quad (8)$$

В силу обобщенного неравенства Гельдера (см., например, [39]) с показателями 4, 4, 2 и неравенства (8) получаем

$$\begin{aligned} |I_1^k| &\leq \left| \int_0^a \frac{d(w^{(k)} - s^{(k)})}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \frac{d\eta^{(k)}}{dx} dx \right| \leq \|w^{(k)} - s^{(k)}\|_{1,4} \|\hat{w}^{(k)}\|_{1,4} \|\eta^{(k)}\|_{1,2} \leq \\ &\leq (C_{14}^{22})^2 \|w^{(k)} - s^{(k)}\|_{2,2} \|\hat{w}^{(k)}\|_{2,2} \|\eta^{(k)}\|_{1,2}. \end{aligned}$$

Аналогично

$$\begin{aligned} |I_2^k| &\leq \left| \int_0^a \frac{d(u^{(k)} - v^{(k)})}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \frac{dz^{(k)}}{dx} dx \right| \leq \|u^{(k)} - v^{(k)}\|_{1,2} \|\hat{w}^{(k)}\|_{1,4} \|z^{(k)}\|_{1,4} \leq \\ &\leq (C_{14}^{22})^2 \|u^{(k)} - v^{(k)}\|_{1,2} \|\hat{w}^{(k)}\|_{2,2} \|z^{(k)}\|_{2,2} \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} |I_4^k| &\leq \left| \int_0^a \frac{d(w^{(k)} - s^{(k)})}{dx} \frac{d\hat{u}^{(k)}}{dx} \frac{dz^{(k)}}{dx} dx \right| \leq \|w^{(k)} - s^{(k)}\|_{1,4} \|\hat{u}^{(k)}\|_{1,2} \|z^{(k)}\|_{1,4} \leq \\ &\leq (C_{14}^{22})^2 \|w^{(k)} - s^{(k)}\|_{2,2} \|\hat{u}^{(k)}\|_{1,2} \|z^{(k)}\|_{2,2}. \end{aligned}$$

Из неравенства (8) и обобщенного неравенства Гельдера с показателями 4, 4, 4 и 4 вытекает, что

$$\begin{aligned} |I_3^k| &\leq \frac{3}{2} \left| \int_0^a \frac{d(w^{(k)} - s^{(k)})}{dx} \frac{d(w^{(k)} + s^{(k)})}{dx} \frac{d\hat{w}^{(k)}}{dx} \frac{dz^{(k)}}{dx} dx \right| \leq \frac{3}{2} \|w^{(k)} - s^{(k)}\|_{1,4} \times \\ &\times \|w^{(k)} + s^{(k)}\|_{1,4} \|\hat{w}^{(k)}\|_{1,4} \|z^{(k)}\|_{1,4} \leq \frac{3}{2} (C_{14}^{22})^4 \|w^{(k)} - s^{(k)}\|_{2,2} \|w^{(k)} + s^{(k)}\|_{2,2} \|\hat{w}^{(k)}\|_{2,2} \times \\ &\times \|z^{(k)}\|_{2,2} \leq \frac{3}{2} (C_{14}^{22})^4 \|w^{(k)} - s^{(k)}\|_{2,2} (\|w^{(k)}\|_{2,2} + \|s^{(k)}\|_{2,2}) \|\hat{w}^{(k)}\|_{2,2} \|z^{(k)}\|_{2,2}. \end{aligned}$$

Итак, для всех (U, q^1) , $(\hat{U}, \hat{q}^1)$, (Y, r) и любого единичного (Z, y) из W имеем

$$\begin{aligned} |(A'(U, q^1)(\hat{U}, \hat{q}^1) - A'(Y, r)(\hat{U}, \hat{q}^1), (Z, y))_W| &\leq C^* \|U - Y\|_V \|U + Y\|_V \times \\ &\times \|\hat{U}\|_V \|Z\|_V \leq C^* R \|U - Y\|_V \|\hat{U}\|_V, \quad R = \max\{\|U\|_V, \|Y\|_V\}. \end{aligned} \quad (9)$$

В силу следствия из теоремы Хана-Банаха (см. [40]. Теорема 2.7.4) можно выбрать такой единичный вектор (Z, y) из W , что

$$\begin{aligned} (A'(U, q^1)(\hat{U}, \hat{q}^1) - A'(Y, r)(\hat{U}, \hat{q}^1), (Z, y))_W &= \\ = \|A'(U, q^1)(\hat{U}, \hat{q}^1) - A'(Y, r)(\hat{U}, \hat{q}^1), (Z, y)\|_W. \end{aligned}$$

Отсюда и из соотношения (9) следует, что

$$\|A'(U, q^1)(\hat{U}, \hat{q}^1) - A'(Y, r)(\hat{U}, \hat{q}^1), (Z, y)\|_W \leq C^* R \|U - Y\|_V \|\hat{U}\|_V.$$

Таким образом, $A'(U, q^1)$ является непрерывным оператором. Теорема доказана.

Из теоремы 3 и теоремы 2.1 [14] следует, что производная Гато совпадает с производной Фреше.

4. Заключение.

Доказано, что оператор геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем дифференцируем по Фреше и производная по Фреше совпадает с производной Гато. В дальнейшем это свойство будет использовано при исследовании форм потери устойчивости пластины и нахождении критической нагрузки, при которой возникает потеря устойчивости.

Будут разработаны приближенные методы решения указанной задачи на основе разработанных в [3, 41–64] подходов.

*Публикация осуществлена при финансовой поддержке РФФИ
(проекты №№ 17-08-01279, 16-01-00301, 18-38-00595).*

1. Васильев В.В., Добряков А.А., Дудченко А. А. Основы проектирования и изготовления конструкций летательных аппаратов из композиционных материалов. – М.: МАИ, 1985. – 218 с.
2. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Численное исследование физически нелинейной задачи о продольном изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2017. – № 1. – С. 39–51.
3. Макаров М.В., Бадриев И.Б., Паймушин В.Н. Нелинейные задачи о смешанных формах потери устойчивости трехслойных пластин при продольно-поперечном изгибе // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2015. – Т. 20, № 5. – С. 1275–1278.
4. Бадриев И.Б., Желтухин В.С., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Численное решение задачи о равновесии трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем в геометрически нелинейной постановке // Вестник Казанского технологического университета. – 2014. – Т. 17, № 23. – С. 393–396.
5. Paimushin V.N. Problems of geometric non-linearity and stability in the mechanics of thin shells and rectilinear columns // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. – 2007. – V. 71, № 5. – P. 772–805.
6. Paimushin V.N., Firsov V.A., Gyunal I., Egorov A.G. Theoretical-experimental method for determining the parameters of damping based on the study of damped flexural vibrations of test specimens. 1. Experimental basis // Mechanics of Composite Materials. – 2014. – V. 50, № 2. – P. 127–136.
7. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Контактная постановка задач механики подкреплённых на контуре трехслойных оболочек с трансверсально-мягким заполнителем // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2017. – № 1. – С. 77–85.
8. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Мартынова О.П. Постановка геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем // Тенденции науки и образования в современном мире. – 2016. – № 16-1. – С. 5–11.
9. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Мартынова О.П. Операторная формулировка геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем // Тенденции науки и образования в современном мире. – 2016. – № 18-3. – С. 5–13.
10. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Смирнова Е.В. Обобщенная постановка геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины // Тенденции науки и образования в современном мире. – 2017. – № 23-1. – С. 4-10.
11. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Смирнова Е.В. О псевдомонотонности оператора геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины // Тенденции науки и образования в современном мире. – 2017. – № 24-2. – С. 5–14.
12. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Смирнова Е.В. О свойстве типа ограниченной липшиц-непрерывности оператора геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины // Тенденции науки и образования в современном мире. – 2017. – № 25-3. – С. 5–12.
13. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Смирнова Е.В. О квазипотенциальности оператора геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины // Тенденции науки и образования в современном мире. – 2017. – № 26-1. – С. 5–12.
14. Бадриев И.Б., Буянов В.Ю., Макаров М.В. Производная Гато оператора геометрически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины // Тенденции науки и образования в современном мире. – 2017. – № 30-2. – С. 5–12.
15. Вайнберг М.М. Вариационный метод и метод монотонных операторов. – М., 1972. – 416 с.
16. Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Макаров М.В. Численное исследование физически нелинейных задач об изгибе трехслойных пластин // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2016). М.: Изд-во МАИ, 2016. – С. 475–477.
17. Бадриев И.Б., Гарипова Г.З., Макаров М.В., Паймушин В.Н., Хабибуллин Р.Ф. О решении физически нелинейных задач о равновесии трехслойных пластин с трансверсально-мягким заполнителем // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2015. – Т. 157, № 1. – С. 15–24.
18. Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Гарипова Г.З., Макаров М.В. О разрешимости нелинейной задачи о равновесии трехслойной пластины // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2015. – Т. 20, № 5. – С. 1034–1037.

19. Бадриев И.Б., Гарипова Г.З., Макаров М.В. Сеточные аппроксимации физически нелинейной задачи об изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем // Воронежская зимняя математическая школа С.Г. Крейна - 2016. Материалы международной конференции. – Воронеж: Издательско-полиграфический центр «Научная книга», 2016. – С. 70–72.
20. Badriev I.B., Garipova G.Z., Makarov M.V., Paimushin V.N., Khabibullin R.F. Solving physically nonlinear equilibrium problems for sandwich plates with a transversally soft core // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2015. – V. 36, № 4. – P. 474–481.
21. Badriev I.B., Banderov V.V. Numerical solution of the equilibrium of axisymmetric soft shells // Математические методы в технике и технологиях-ММТТ. - 2014. - № 5 (64). - С. 16-20.
22. Badriev I.B., Banderov V.V., Gnedenkova V.L., Kalacheva N.V., Korablev A.I., Tagirov R.R. On the finite dimensional approximations of some mixed variational inequalities // Applied Mathematical Sciences. – 2015. – V. 9, № 113-116. – P. 5697–5705.
23. Бадриев И.Б. Решение вариационных задач нелинейных процессов механики сплошной среды // Теория управления и математическое моделирование Тезисы докладов Всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти профессора Н.В. Азбелева и профессора Е.Л. Тонкова.. – Ижевск: Изд-во "Удмуртский университет", 2015. – С. 234–235.
24. Бадриев И.Б. О решении вариационных неравенств второго рода // Сеточные методы для краевых задач и приложения Материалы Девятой Всероссийской конференции. – Казань: Отечество, 2012. – С. 32–35.
25. Бадриев И.Б., Бандеров В.В. Численное моделирование деформирования биокomпозитов // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред Материалы XXI международного симпозиума имени А.Г. Горшкова.. – Москва: ООО "ТРИП", 2015. – С. 7–9.
26. Бадриев И.Б., Задворнов О.А. Исследование разрешимости осесимметричной задачи об определении положения равновесия мягкой оболочки вращения // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2005. – № 1. – С. 25–30.
27. Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Калачева Н.В. Численное исследование вариационных и квазивариационных неравенств теории мягких сетчатых оболочек // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2015. – Т. 20, № 5. – С. 1037–1041.
28. Бадриев И.Б., Бандеров В.В. Численное решение задач о равновесии осесимметричных мягких оболочек // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2015. – Т. 21, № 1. – С. 29–35.
29. Бадриев И.Б., Бандеров В.В. Итерационные методы решения вариационных неравенств теории мягких оболочек // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2013. – Т. 155, № 2. – С. 19–33.
30. Badriev I.B., Garipova G.Z., Paimushin V.N., Makarov M.V. Numerical solution of the issue about geometrically nonlinear behavior of sandwich plate with transversal soft filler // Research Journal of Applied Sciences. – 2015. – V. 10, № 8. – P. 428–435.
31. Бадриев И.Б., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю. О решении некоторых нелинейных краевых и начально-краевых задач // Материалы XXII Международного симпозиума «Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред» им. А.Г. Горшкова. – Москва: ООО "ТРИП", 2016. – С. 31–33.
32. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Разрешимость физически и геометрически нелинейной задачи теории трехслойных пластин с трансверсально-мягким заполнителем // Известия высших учебных заведений. Математика. - 2015. - № 10. - С. 66–71.
33. Макаров М.В., Бадриев И.Б., Паймушин В.Н. Определение критических точек бифуркации для задачи о геометрически нелинейном поведении трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем // Воронежская зимняя математическая школа С.Г.Крейна-2016. Материалы международной конференции. – Воронеж: Издательско-полиграфический центр «Научная книга», 2016. – С. 292–294.
34. Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Исследование задачи об изгибе трехслойной пластины в физически нелинейной постановке // Математическое моделирование и краевые задачи Труды десятой Всероссийской научной конференции с международным участием: в 3-х томах, 2016. – С. 19–24.
35. Макаров М.В. Численное исследование геометрически нелинейной задачи о поперечном изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем // Тенденции науки и образования в современном мире. – 2016. – № 17-2. – С. 26–35.
36. Макаров М.В. О решении геометрически нелинейных и линейных задач о поперечном изгибе жестко закрепленной трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем // Тенденции науки и образования в современном мире. - 2016. - № 19-2. - С. 23-29.
37. Paimushin V.N., Bobrov S.N. Refined geometric nonlinear theory of sandwich shells with a transversely soft core of medium thickness for investigation of mixed buckling forms // Mechanics of Composite Materials. – 2000. – V. 36, № 1. – P. 59–66.

38. Паймушин В.Н. Обобщенный вариационный принцип Рейсснера в нелинейной механике пространственных составных тел с приложениями к теории многослойных оболочек // Известия РАН. Механика твердого тела. – 1987. – № 2. – С. 171.
39. Adams R.A. Sobolev Spaces. – New York, San Francisco, London: Academic Press, 1975. – 286 p.
40. Гаевский Х., Грегер К., Захариас К. Нелинейные операторные уравнения и операторные дифференциальные уравнения. – М: Мир, 1978. – 336 с.
41. Хилле Э., Филлипс Р. Функциональный анализ и полугруппы. – М.: 1962. – 830 с.
42. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Геометрически нелинейная задача о продольно-поперечном изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем // Ученые записки Казанского университета. Серия: физико-математические науки. – 2016. – Т. 158, № 4. – С. 453–468.
43. Бадриев И.Б., Фанюк Б.Я. Итерационные методы решения задач фильтрации в многослойных пластах при наличии точечного источника // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2010. – Т. 152, № 4. – С. 39–55.
44. Бадриев И.Б., Сингатуллин М.Т., Чебаков Ю.В. Численное исследование задач подземной установившейся фильтрации высоковязких жидкостей при наличии скважин // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2015. – Т. 20, № 5. – С. 1041–1043.
45. Badriev I.B., Banderov V.V., Singatullin M.T. Numerical solution of non-linear filtration issues for high viscous fluids at the presence of wells // Research Journal of Applied Sciences. – 2015. – V. 10, № 8. – P. 343–346.
46. Badriev I.B., Fanyuk B.Y. Iterative methods for solving seepage problems in multilayer beds in the presence of a point source // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2012. – V. 33, № 4. – P. 386–399.
47. Бадриев И.Б., Задворнов О.А. Итерационные методы решения вариационных неравенств второго рода с обратно сильно монотонными операторами // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2003. – № 1. – С. 20–28.
48. Бадриев И.Б., Задворнов О.А. О сходимости итерационного метода двойственного типа решения смешанных вариационных неравенств // Дифференциальные уравнения. – 2006. – Т. 42, № 8. – С. 1115–1122.
49. Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю., Шнейдер М.Н. Тематическая модель ВЧЕ-разряда в аргоне при больших межэлектродных расстояниях // Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – Т. 16, № 22. – С. 334–338.
50. Желтухин В.С., Соловьёв С.И., Соловьёв П.С., Чебакова В.Ю. Вычисление минимального собственного значения нелинейной задачи Штурма – Лиувилля // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2013. – Т. 155, № 3. – С. 91–104.
51. Бадриев И.Б., Ляшко А.Д., Панкратова О.В. Исследование сходимости итерационных методов решения нелинейных задач теории фильтрации // Известия высших учебных заведений. Математика. – 1998. – № 11. – С. 8–13.
52. Бадриев И.Б. Математическое моделирование стационарных задач подземной фильтрации с многозначным законом // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2013. – Т. 18, № 5-2. – С. 2444–2446.
53. Чебакова В.Ю. Моделирование высокочастотного емкостного разряда при атмосферном давлении в аргоне // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2016. – Т. 158, № 3. – С. 404–423.
54. Бадриев И.Б., Исмагилов И.Н. Итерационные методы решения нелинейных стационарных задач анизотропной фильтрации // Журнал Средневолжского математического общества. – 2006. – Т. 8, № 1. – С. 150–159.
55. Badriev I.B., Makarov M.V., Paimushin V.N. Numerical investigation of physically nonlinear problem of sandwich plate bending // Procedia Engineering. 2016. - V. 150. - P. 1050–1055.
56. Badriev I.B., Makarov M.V., Paimushin V.N. Mathematical simulation of nonlinear problem of three-point composite sample bending test // Procedia Engineering. 2016. – V. 150. – P. 1056–1062.
57. Бадриев И.Б., Чебакова В.Ю. Математическое моделирование низкотемпературной ВЧЕ-плазмы в аргоне // Математическое моделирование и краевые задачи Труды десятой Всероссийской научной конференции с международным участием: в 3-х томах. – Саратов, 2016. – С. 17–21.
58. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Разрешимость физически и геометрически нелинейной задачи теории трехслойных пластин с трансверсально-мягким заполнителем // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2015. – № 10. – С. 66–71.
59. Бадриев И.Б. Математическое моделирование процессов механики сплошной среды при наличии точечных источников и нагрузок // Материалы XXII Международного симпозиума «Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред» им. А.Г. Горшкова. – Москва: ООО "ТР-принт", 2016. – С. 28–31.
60. Badriev I.B., Chebakova V.Y., Zheltukhin V.S. Capacitive coupled RF discharge: modelling at the local statement of the problem // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – V. 789, № 1. – 012004.

61. Zheltuhin V.S., Solovyev P.S., Chebakova V.Y. Boundary conditions for electron balance equation in the stationary high-frequency induction discharges // Research Journal of Applied Sciences. – 2015. – V. 10, № 10. – P. 658–662.
62. Бадриев И.Б., Задворнов О.А., Исмагилов Л.Н., Скворцов Э.В. Решение плоских задач фильтрации при многозначном законе фильтрации и наличии точечного источника // Прикладная математика и механика. – 2009. – Т. 73. № 4. – С. 604–614.
63. Badriev I.B., Banderov V.V., Zadvornov O.A. On the equilibrium problem of a soft network shell in the presence of several point loads // Applied Mechanics and Materials. – 2013. – V. 392. – P. 188–190.
64. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Буянов В.Ю. Геометрически нелинейная задача о потере устойчивости трехслойной пластины // Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика. 2017. Т. 5. № 8-2 (34-2). С. 7-10.
65. Badriev I.B., Paimushin V.N. Refined models of contact interaction of a thin plate with positioned on both sides deformable foundations // Lobachevskii Journal of Mathematics. - 2017. - V. 38, № 5. - P. 779-793.

Финогенов Н.Ю.

Фрактальная графика

*Национальный исследовательский университет «МЭИ»
(Россия, Смоленск)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-02

idsp: 000001:lj-31-03-2018-02

Аннотация

Все привыкли к тому, что геометрия это сплошные числа, формулы и графики. Современной молодёжи не просто даётся это необычная наука, поэтому многие не увлекаются ей из-за сложности её освоения. Да и та евклидова геометрия, преподаваемая в школе, не столь уж много описывает. Данная статья посвящена очень необычной стороне геометрии, а именно фрактальной графике, в которой отражается красота «Царицы наук».

Ключевые слова: геометрия, фрактал, фрактальная графика, Бенуа Мандельброт, фрактальная геометрия.

Переломным моментом в сфере математики, да и изучении мира с точки зрения цифр и формул, произошёл в 60-70-х XX века. В это время французский математик Бенуа Мандельброт создал и распространил собственную теорию о фракталах. Так появилась фрактальная геометрия, чей предмет изучения заключается в тех неровностях, изломах и шершавостях. Именно в них гениальный математик обнаружил удивительный порядок.

Само понятие «фрактал» исходит из латыни от слова fractus («состоящий из фрагментов»). Сам же Мандельброт определил фрактал, как структуру, состоящую из частей, которые в каком-то смысле подобны целому.

Самыми известными фрактальными объектами являются как не странно деревья. От каждой ветки ответвляются меньшие ветки, а от тех ещё меньше, и все они похожи друг на друга. Кроме того, если обратить своё внимание на снежинку вблизи, то можно заметить, что она тоже представляет собой фрактал. Фракталы используются и в астрономии (кольца Сатурна, анализ Галактик), и в биохимии (для изображения культуры бактерий, молекулы, реакций).

Самой наглядными являются геометрические фракталы. Ярким представителем является кривая Коха (рис.1).

Рисунок 1 – кривая Коха

Самой многочисленной группой фракталов является группа алгебраических фракталов. Существуют разные методы их получения, одним из этих методов является многократный (итерационный) расчёт функции вида $Z_{n+1}=f(z_n)$, где Z – комплексное число, f – какая-то функция. Вычисление данной функции выполняется до выполнения какого-то условия. Примером такого вида фракталов является множество Мандельброта (рис.2)

Рисунок 2 – множество Мандельброта

В заключении хочется отметить, что в настоящее время фракталы только набирают популярность и огромное развитие.

1. В.Е. Васильев. Компьютерная графика. Санкт-Петербург, 2005.
2. Бенуа Мандельброт. Фрактальная геометрия природы. Москва, 2002.

Чебакова В.Ю., Соловьев П.С., Фадеева М.С.
Математическая модель тлеющего разряда

*Казанский (Приволжский) федеральный университет
(Россия, Казань)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-03
idsp: 000001:lj-31-03-2018-03

Аннотация

Построена модель тлеющего разряда постоянного тока, учитывающая наличие молекулярных ионов и димеров аргона, а также зависимость констант скоростей процессов плазмо-химических реакций от неравномерного распределения газовой температуры в межэлектродном пространстве..

Ключевые слова. математическое моделирование, низкотемпературная плазма, тлеющий разряд, молекулярный ион, димер аргона, уравнение баланса.

Введение.

Низкотемпературная плазма (НТП) применяется в качестве рабочего тела в системах преобразования тепловой энергии в электрическую; создание устройств, генераторов плазмы, в которых электрическая дуга используется для создания

плазменных струй, в качестве активной среды в плазменно-энергетических технологиях обработки топлив. НТП используется для получения дисперсных материалов, обработки порошков и получения покрытий, модификации поверхностей полимерных материалов; использование плазмы для решения различных задач прикладной химии (плазмохимии); применение низкотемпературной плазмы в экологии [1–8]. Электрические разряды, характеризующиеся сравнительно малыми токами и вкладываемой мощностью разряда, называются тлеющими. Их самые разнообразные формы, отличаются частотой питающего разряд напряжения, размером и формой электродов и разрядного сосуда, составом и давлением газа. В настоящей статье речь идет о моделях тлеющего разряда (ТР) при постоянном токе. Дан краткий обзор имеющихся работ по моделированию тлеющего разряда. Затем построена математическая модель, которая в отличие от предложенных ранее позволяет учитывать наличие молекулярных ионов и димеров аргона, а также зависимость констант скоростей процессов плазмо-химических реакций от неравномерного распределения газовой температуры в межэлектродном пространстве.

1. Обзор работ по моделированию тлеющего разряда.

Дадим краткий обзор существующих моделей ТР. Рассмотрим эти модели по мере их усложнения. В [9] представлена модель ТР, в которой моделирование плоского разряда в азоте проводится в рамках диффузионно-дрейфового приближения. В уравнениях баланса заряженных частиц учитывается скорость внешней ионизации. В уравнении переноса электронов учитывается диффузия к боковой стенке. При постановке граничных условий считается, что вторичные электроны на катоде возникают за счет эмиссии электронов, у анода плазма предполагается квазинейтральной. Уравнения переноса дополняются уравнением Пуассона, со следующими граничными условиями: на катоде напряжение полагалось равным нулю, а на аноде – падению напряжения на разрядном промежутке. Граничные условия на боковых поверхностях обеспечивают условия непротекания ионного и электронного токов. В [10] приведены результаты численного моделирования ТР в азоте в двумерной постановке для широкого диапазона давлений и токов. Показано существование стационарных анодных пятен с нормальной плотностью тока. Проанализировано влияние диффузионных процессов на параметры анодного слоя. Приведенные результаты соответствуют модели с осесимметричной геометрией. Для более адекватного описания пространственных неоднородностей использована нестационарная модель разряда, учитывающая как поперечные, так и продольные составляющие диффузионных процессов. В качестве граничных условий на боковых поверхностях и оси симметрии в квазинейтральной плазме ставятся условия непротекания ионного и электронного токов. На аноде ставились условия равенства нулю напряжения, ионного потока на электрод и формирования электронного потока на анод за счет вторичной эмиссии. В положительном столбе предполагается выполненными условия равенства электронного и ионного потока, непрерывность ионной концентрации. В [11, 12] исследована корректность математической постановки системы нелинейных уравнений диффузионно-дрейфового приближения, широко используемой при моделировании газового разряда. Определен класс нелинейных граничных условий, обеспечивающих существование и единственность сильных решений. Так как концентрация метастабильных атомов в аргоне сопоставима с концентрацией заряженных частиц, то сверхупругие столкновения этих атомов с электронами приводят к изменению средней энергии и коэффициентов скоростей всех процессов под действием электронного удара [13–16]. В [17] использован следующий набор реакций для трехуровневой схемы термов атома аргона $\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar}^* + e$ – возбуждение метастабильного уровня;

$\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$ – прямая ионизация с основного состояния; $\text{Ar}^* + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$ – ступенчатая ионизация с метастабильного уровня; $\text{Ar}^* + e \rightarrow \text{Ar}^{\Gamma} + e$ – перемешивание с метастабильного на резонансный уровень; $\text{Ar}^* + \text{Ar} \rightarrow 2\text{Ar}$, $\text{Ar}^* + 2\text{Ar} \rightarrow \text{Ar}_2 + \text{Ar}$, $\text{Ar}^* + e \rightarrow \text{Ar} + e$ – процессы девозбуждения метастабильного уровня. В [18] учтено также резонансное излучение с учетом самопоглощения $\text{Ar}^{\Gamma} \rightarrow \text{Ar} + \hbar\nu$. В [19] более подробно рассмотрено влияние резонансных атомов: $\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar}^{\Gamma} + e$, $\text{Ar}^{\Gamma} + e \rightarrow \text{Ar}^* + e$, $\text{Ar}^* + e \rightarrow \text{Ar}^{\Gamma} + e$, $\text{Ar}^{\Gamma} + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$, а также упругих соударений частиц, всего учтено 16 реакций. В [20] для аргона учитывались кинетические уравнения для ионов (Ar^+ , Ar^{2+}) и электронных возбужденных состояний аргона: суммарного метастабильного уровня, суммарного резонансного уровня и трех вышележащих уровней, всего учитывалось 26 реакций. В [21] определены абсолютные заселенности метастабильных состояний аргона в плазме высоко-частотного разряда (ВЧ) в атмосфере чистого аргона. В [22] приведена схема нижних электронных уровней аргона и обозначено уже 32 элементарных процесса. Программное обеспечение BOLSIG+ версия 1.2 [23] позволяет рассчитывать константы физических процессов для моделей сплошной среды с учетом их зависимости от приведенной напряженности электрического поля или электронной температуры.

2. Математическая модель тлеющего разряда.

Введем декартову систему координат $Oxyz$, направив ось абсцисс Ox перпендикулярно поверхности электродов. Обозначим через b расстояние между электродами, через a и d – ширину и длину прямоугольного электрода. Точка $x=0$ соответствует аноду, $x=b$ – катоду. Так как процессы, протекающие в плазме ТР постоянного тока, во многом схожи с плазмохимическими процессами ВЧ-емкостного (ВЧЕ) разряда и, следовательно, плазма ВЧЕ разряда во многом подобна плазме разряда постоянного тока, то в силу проведенного обзора работ для ТР и опыта по моделированию ВЧЕ-разряда, была по аналогии с [3, 24] построена модель ТР в локальном приближении, содержащая следующие уравнения.

1. Уравнение конвекции-диффузии для атомарных ионов.

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_+}{\partial t} + \frac{\partial(-D_+ \partial n_+ / \partial x + \mu_+ n_+ E)}{\partial x} + \frac{\partial(-D_+ \partial n_+ / \partial y)}{\partial y} + \frac{\partial(-D_+ \partial n_+ / \partial z)}{\partial z} = R_1 n_e N + \\ + R_2 n_m^2 + R_3 n_m n_e - R_4 n_e n_+ - R_5 n_e^2 n_+ + R_{12} n_e n_{2+} - R_{11} n_+ N^2 + R_{20} N n_{2+}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$0 \leq x \leq b, \quad 0 \leq y \leq a, \quad 0 \leq z \leq d, \quad t > 0.$$

Здесь n_e , n_+ , n_{2+} , n_m – концентрации электронов, атомарных и молекулярных положительно заряженных ионов и метастабильных атомов аргона, N – концентрация атомов аргона в основном состоянии, μ_+ – подвижность атомарных ионов, D_+ – коэффициент диффузии атомарных ионов, $E = -\partial\varphi/\partial x$ – напряженность электрического поля, φ – потенциал электрического поля. В (1) и далее R_i , $i=1 \dots 20$, – коэффициенты скоростей плазмохимических реакций, приведенные в [3, 24].

В соответствии с [25] уравнение (1) дополним следующими граничными условиями:

$$G_+(0, y, z, t) = -v_+(0+, y, z, t), \quad G_+(b, y, z, t) = (v_+ + \mu_+ n_+ E)(b-, y, z, t),$$

$$G_+(x, 0, z, t) = -v_+(x, 0+, z, t), \quad G_+(x, a, z, t) = v_+(x, a-, z, t),$$

$$G_+(x, y, 0, t) = -v_+(x, y, 0+, t), \quad G_+(x, y, d, t) = -v_+(x, y, d-, t),$$

где G_+ – плотность потока атомарных ионов, $v_+ = n_+ \sqrt{8kT_a / (\pi m_+)}/4$ – средняя тепловая скорость атомарных ионов, m_+ – масса атомарного иона. Мы предполагаем равными температуры атомов T_a , атомарных ионов и возбужденных атомов.

2. Уравнение конвекции–диффузии для молекулярных ионов Ar_2^+

$$\frac{\partial n_{2+}}{\partial t} + \frac{\partial(-D_{2+} \partial n_{2+} / \partial x + \mu_{2+} n_{2+} E)}{\partial x} + \frac{\partial(-D_{2+} \partial n_{2+} / \partial y)}{\partial y} + \frac{\partial(-D_{2+} \partial n_{2+} / \partial z)}{\partial z} =$$

$$= R_{10} n_m^2 + R_{11} n_+ N^2 - R_{12} n_e n_{2+} - R_{13} n_e n_{2+} + R_{16} n_{2*}^2 + R_{17} n_m n_{2*} - R_{20} N n_{2+},$$

где μ_{2+} – подвижность молекулярных ионов, D_{2+} – коэффициент диффузии молекулярных ионов. Как и для уравнения конвекции–диффузии для атомарных ионов, граничные условия сформулируем в следующем виде.

$$G_{2+}(0, y, z, t) = -v_{2+}(0+, y, z, t), \quad G_{2+}(b, y, z, t) = (v_{2+} + \mu_{2+} n_{2+} E)(b-, y, z, t),$$

$$G_{2+}(x, 0, z, t) = -v_{2+}(x, 0+, z, t), \quad G_{2+}(x, a, z, t) = v_{2+}(x, a-, z, t),$$

$$G_{2+}(x, y, 0, t) = -v_{2+}(x, y, 0+, t), \quad G_{2+}(x, y, d, t) = -v_{2+}(x, y, d-, t),$$

где G_{2+} – плотность потока молекулярных ионов, $v_{2+} = n_{2+} \sqrt{8kT_a / (\pi m_{2+})}/4$ – средняя тепловая скорость молекулярных ионов, m_{2+} – масса молекулярного иона.

3. Уравнение конвекции–диффузии для электронного газа

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial(-D_e \partial n_e / \partial x + \mu_e n_e E)}{\partial x} + \frac{\partial(-D_e \partial n_e / \partial y)}{\partial y} + \frac{\partial(-D_e \partial n_e / \partial z)}{\partial z} = R_1 n_e N + R_2 n_m^2 +$$

$$+ R_3 n_m n_e - R_4 n_e n_+ - R_5 n_e^2 n_+ + R_{10} n_m^2 - R_{13} n_e n_{2+} + R_{16} n_{2*}^2 + R_{17} n_m n_{2*}, \quad 0 \leq x \leq b, \quad t > 0,$$

где n_{2*} – концентрация димеров аргона, $G_e = -D_e \partial n_e / \partial x - \mu_e n_e E$ – плотность потока электронов, μ_e – подвижность электронов, D_e – коэффициент диффузии электронов. Граничные условия выбираются в виде

$$G_e(0, y, z, t) = (-v_e - \mu_e n_e E)(0+, y, z, t),$$

$$G_e(b, y, z, t) = (v_e - \gamma(\mu_+ n_+ E + \mu_{2+} n_{2+} E))(b-, y, z, t), \quad G_e(x, 0, z, t) = -v_e(x, 0+, z, t),$$

$$G_e(x, a, z, t) = v_e(x, a-, z, t), \quad G_e(x, y, 0, t) = -v_e(x, y, 0+, t),$$

$$G_e(x, y, d, t) = -v_e(x, y, d-, t),$$

где $v_e = n_e \sqrt{8kT_e / (\pi m_e)}/4$ – средняя тепловая скорость электронов, γ – коэффициент вторичный электронной эмиссии с электродов, T_e – температура электронов, m_e – масса электрона. При нормальных условиях считается, что в газе содержится $\sim 10^4 \text{ см}^{-3}$ заряженных частиц. Это значение примем за начальные условия для полной концентрации заряженных положительных частиц и электронов.

4. Уравнения Пуассона для потенциала электрического поля

$$-(\partial^2 \phi / \partial x^2 + \partial^2 \phi / \partial y^2 + \partial^2 \phi / \partial z^2) = q_e (n_+ + n_{2+} - n_e) / \varepsilon_0, \quad 0 \leq x \leq b, \quad t > 0$$

с граничными условиями

$$\varphi = -V_a \quad \text{на нагруженном электроде} (x = b),$$

$$\varphi = 0 \quad \text{на заземленном электроде} (x = 0),$$

$$\partial\varphi/\partial y(x, 0, z, t) = \partial\varphi/\partial y(x, a, z, t) = \partial\varphi/\partial z(x, y, 0, t) = \partial\varphi/\partial x(x, y, d, t).$$

Здесь q_e – заряд электрона, ε_0 – электрическая постоянная вакуума, V_a – амплитуда колебаний напряжения на нагруженном электроде.

5. Уравнение баланса концентрации метастабильных атомов

$$\frac{\partial n_m}{\partial t} - \frac{\partial(D_m \partial n_m / \partial z)}{\partial z} - \frac{\partial(D_m \partial n_m / \partial x)}{\partial x} - \frac{\partial(D_m \partial n_m / \partial y)}{\partial y} = R_6 N n_e + R_{18} n_e n_{2*} - R_2 n_m^2 - R_3 n_m n_e - R_7 n_m - R_8 N n_m - R_9 n_m n_e - R_{10} n_m^2 - R_{15} N^2 n_m - R_{17} n_m n_{2*} - R_{19} n_m N^2,$$

где D_m – коэффициент диффузии метастабильных атомов аргона. Граничные условия для данного уравнения имеют вид

$$G_m(0, y, z, t) = -v_m(0+, y, z, t), \quad G_m(b, y, z, t) = v_m(b-, y, z, t),$$

$$G_m(x, 0, z, t) = -v_m(x, 0+, z, t), \quad G_m(x, a, z, t) = v_m(x, a-, z, t),$$

$$G_m(x, y, 0, t) = -v_m(x, y, 0+, t), \quad G_m(x, y, d, t) = v_m(x, y, d-, t),$$

где G_m – плотность потока метастабильных атомов, $v_m = n_m \sqrt{8kT_a / (\pi m_a)} / 4$ – средняя тепловая скорость электронов.

6. Кинетическое уравнение для концентрации димеров аргона Ar_2^*

$$\frac{\partial n_{2*}}{\partial t} = R_{19} n_m N^2 + R_{15} N^2 n_m - R_{14} n_{2*} - R_{16} n_{2*}^2 - R_{17} n_m n_{2*} - R_{18} n_e n_{2*}.$$

Начальные условия, выберем нулевыми, как и для метастабильных атомов: $n_{2*}(x, y, z, 0) = 0$.

7. Кинетическое уравнение для нейтральных атомов.

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -R_1 n_e N + R_2 n_m^2 + R_4 n_e n_+ + R_5 n_e^2 n_+ - R_6 N n_e + R_7 n_m + R_8 N n_m + R_9 n_m n_e - R_{11} n_+ N^2 + R_{12} n_e n_{2+} + R_{13} n_e n_{2+} + R_{14} n_{2*} - R_{15} N^2 n_m + R_{16} n_{2*} + R_{17} n_m n_{2*} + R_{19} n_m N^2$$

Начальные условия – следующие: $P/kT_a(x) = N(x, 0)$.

При проведении расчетов в качестве системы единиц необходимо выбирать систему СИ. Данные для аппроксимации коэффициента диффузии D_e , подвижности электронов μ_e , коэффициентов скоростей процессов прямой ионизации R_1 и возбуждения метастабилей R_6 , вклада, вносимого упругими соударениями в нагрев газа Q_{yn} , средней энергии $\bar{\varepsilon} = 3kT_e / 2$ необходимо определять с учетом зависимости от приведенной напряженности электрического поля с учетом электрон-электронных соударений с помощью пакета BOLSIG+ версия 1.2 [23].

4. Заключение.

Построена математическая модель, которая в отличие от предложенных ранее позволяет учитывать наличие молекулярных ионов и димеров аргона, а также зависимость констант скоростей процессов плазмо-химических реакций от неравномерного распределения газовой температуры в межэлектродном пространстве. Так как расчеты будут проводиться до выхода на стационарный режим, то для нахождения начального приближения будет использована стационарная модель положительного столба, сведенная к

задаче на собственные значения. При этом будет развита техника, предложенная в [26–32]. Будут разработаны приближенные методы решения указанной задачи на основе разработанных в [33–44] подходов.

1. Бадриев И.Б., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю. О решении некоторых нелинейных краевых и начально-краевых задач // Материалы XXII Международного симпозиума «Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред» им. А.Г. Горшкова. – Москва: ООО "ТРИП", 2016. – С. 31–33.
2. Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю., Шнейдер М.Н. Тематическая модель ВЧЕ-разряда в аргоне при больших межэлектродных расстояниях // Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – Т. 16, № 22. – С. 334–338.
3. Чебакова В.Ю. Моделирование высокочастотного емкостного разряда при атмосферном давлении в аргоне // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2016. – Т. 158, № 3. – С. 404–423.
4. Badriev I.B., Chebakova V.Y., Zheltukhin V.S. Capacitive coupled RF discharge: modelling at the local statement of the problem // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – V. 789, № 1, art. 012004.
5. Zheltukhin V.S., Solov'yev P.S., Chebakova V.Y. Boundary conditions for electron balance equation in the stationary high-frequency induction discharges // Research Journal of Applied Sciences. – 2015. – V. 10, № 10. – P. 658–662.
6. Бадриев И.Б., Чебакова В.Ю. Математическое моделирование низкотемпературной ВЧЕ-плазмы в аргоне // Математическое моделирование и краевые задачи Труды десятой Всероссийской научной конференции с международным участием: в 3-х томах. – Самара, 2016. – С. 17–21.
7. Тихонова Н.В., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю., Бородаев И.А. Математическая модель высокочастотной плазменной обработки многослойных материалов заготовки верха обуви // Вестник Казанского технологического университета. – 2012. – Т. 15, № 17. – С. 36–39.
8. Бадриев И.Б., Желтухин В.С., Чебакова В.Ю. Численное исследование низкотемпературной ВЧЕ-плазмы в аргоне при повышенных давлениях // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2016). – Москва: Изд-во МАИ, 2016. – С. 477–479.
9. Швейгерт В.А. Катодный слой тлеющего несамостоятельного разряда в поднормальном режиме // Журнал технической физики. – 1993. – Т. 63, вып. 5 – С. 29–40.
10. Исламов Р.Ш. Моделирование формирования анодного пятна в самостоятельном тлеющем разряде // Журнал технической физики. – 1991 – Т. 61, Вып. 7 – С. 12–15.
11. Исламов Р.Ш. О разрешимости диффузионно-дрейфового приближения в теории газового разряда. – Троицк, 1991. – 32с. (НИЦТЛАН 91-81).
12. Исламов Р.Ш., О регулярности решения уравнений диффузионно-дрейфового приближения в теории газового разряда // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2006. – Т. 46, № 1. – С. 131–147.
13. Полак Л.С., Синярев Г.Б., Словецкий Д.И. и др. Химия плазмы / Под редакцией Л.С. Полака и Ю.А. Лебедева. – Новосибирск: Наука, 1991. – 325 с.
14. Лебедев Ю.А. Сравнение неравновесной плазмы самостоятельных электрических разрядов. Высокочастотный разряд в волновых полях. – Самара, 1990. – С. 25–62.
15. Смирнов Б.М. Процессы ионизации при медленных столкновениях атомов // Успехи физических наук. – 1981. – Т. 133, Вып. 4. – С. 569–616.
16. Karoulina E., Lebedev Yu. Computer simulation of microwave and dc plasmas: comparative characterization of plasmas // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1992. – V. 25. – P. 401–412.
17. Lymberopoulos Dimitris P., Economou Demetre J. Fluid simulations of glow discharge & Effect of metastable atoms in argon // J. Appl. Phys. – 1993. – V. 73, № 8. – P. 3668–3679.
18. Богданов Е.А., Кудрявцев А.А., Цендин Л.Д., Арсланбеков Р.Р., Колобов В.И., Кудрявцев В.В. Влияние метастабильных атомов и нелокальности электронного распределения на характеристики положительного столба разряда в аргоне // Журнал технической физики. – 2004. – Т. 74, Вып. 6. – С. 35–42.
19. Lauro-Taroni L., Turner M.M., Braithwaite N.St.J. Analysis of the excited argon atoms in the GEC RF reference cell by means of one-dimensional PIC simulations // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2004. – V. 37. – P. 2216–2222.
20. Epstein I.L., Gavrilović M., Jovircević S., Konjević N., Lebedev Yu.A., Tatarinov A.V. The study of a homogeneous column of argon plasma at a pressure of 0.5 torr, generated by means of the Beenakker's cavity // Eur. Phys. J. D. – 2014. – V. 68. – Art. 334, P. 1–9.
21. Байсова Б.Т., Струнин В.И., Струнина Н.Н., Худайбергенов Г.Ж. Абсолютные заселенности метастабильных состояний аргона в плазме высокочастотного разряда // Журнал технической физики. – 2003. – Т. 73, Вып. 8. – С. 30–33.

22. Дятко Н.А., Ионих Ю.З., Мещанов А.В., Напартович А.П. Исследование темной фазы. на стадии развития положительного столба тлеющего разряда в аргоне // Физика плазмы. – 2005. – Т. 31, № 10. – С. 939–953.
23. Hagelaar G.J.M., Pitchford L.C. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models // Plasma Sources Sci. Techn. – 2005. – V. 14 – P. 722–733.
24. Чебакова В.Ю. Численное моделирование высокочастотного емкостного разряда // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2015. – Т. 157, № 2. – С. 126–140.
25. Hagelaar G.J.M., de Hoog F.J., Kroesen G.M.W. Boundary conditions in fluid models of gas discharges // Physical review E. – 2000. – V. 62, № 1. – P. 1452–1454.
26. Желтухин В.С., Соловьёв С.И., Соловьёв П.С., Чебакова В.Ю. Вычисление минимального собственного значения нелинейной задачи Штурма–Лиувилля // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2013. – Т. 155, № 3. – С. 91–104.
27. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Продольно-поперечный изгиб по цилиндрической форме трехслойной пластины, подкреплённой в торцевых сечениях абсолютно твердыми телами // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2017. – Т. 159, № 2. – С. 174–190.
28. Solov'ev S.I. Approximation of nonlinear spectral problems in a Hilbert space // Differential Equations. – 2015. – V. 51, № 7. – P. 934–947.
29. Solov'ev S.I. Superconvergence of finite element approximations to eigenspaces // Differential Equations. – 2002. – V. 38, № 5. – P. 752–753.
30. Zheltukhin V.S., Solovyev S.I., Solovyev P.S., Chebakova V.Yu. Existence of solutions for electron balance problem in the stationary radio-frequency induction discharges // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2016. – V. 158, art. 012103.
31. Zheltukhin V.S., Solov'Ev S.I., Solov'Ev P.S., Chebakova V.Yu., Sidorov A.M. Third type boundary conditions for steady state ambipolar diffusion equation // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2016. – V. 158, art. 012102.
32. Badriev I.B., Garipova G.Z., Paymushin V.N., Makarov M.V. Numerical solution of the issue about geometrically nonlinear behavior of sandwich plate with transversal soft filler // Research Journal of Applied Sciences. – 2015. – V. 10, № 8. – P. 428–435.
33. Бадриев И.Б., Буянов В.Ю., Макаров М.В. Исследование задачи о потере устойчивости трехслойной пластины с трансверсально-мягким наполнителем // Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика. – 2017. – Т. 5, № 7-2 (33-2). – С. 92–94.
34. Бадриев И.Б. О решении вариационных неравенств второго рода // В сборнике: Сеточные методы для краевых задач и приложения Материалы Девятой Всероссийской конференции. – Казань: Отечество, 2012. – С. 32–35.
35. Бадриев И.Б., Ляшко А.Д., Панкратова О.В. Исследование сходимости итерационных методов решения нелинейных задач теории фильтрации // Известия высших учебных заведений. Математика. – 1998. – № 11. – С. 8–13.
36. Бадриев И.Б., Фанюк Б.Я. Итерационные методы решения задач фильтрации в многослойных пластах при наличии точечного источника // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. – 2010. – Т. 152, № 4. – С. 39–55.
37. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Геометрически нелинейная задача о продольно-поперечном изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким наполнителем // Ученые записки Казанского университета. Серия: физико-математические науки. – 2016. – Т. 158, № 4. – С. 453–468.
38. Бадриев И.Б., Задворнов О.А. Итерационные методы решения вариационных неравенств второго рода с обратно сильно монотонными операторами // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2003. – № 1. – С. 20–28.
39. Бадриев И.Б., Задворнов О.А. О сходимости итерационного метода двойственного типа решения смешанных вариационных неравенств // Дифференциальные уравнения. – 2006. – Т. 42, № 8. – С. 1115–1122.
40. Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Исследование задачи об изгибе трехслойной пластины в физически нелинейной постановке // Математическое моделирование и краевые задачи Труды десятой Всероссийской научной конференции с международным участием: в 3-х томах. Самара, 2016. – С. 19–24.
41. Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н. Контактная постановка задач механики подкреплённых на контуре трехслойных оболочек с трансверсально-мягким наполнителем // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2017. – № 1. – С. 77–85.
42. Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Задворнов О.А. О решении задачи равновесия мягкой сетчатой оболочки при наличии нагрузки, сосредоточенной в точке // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2013. – № 3. С. 16–34.

43. Бадриев И.Б., Задворнов О.А. Исследование разрешимости осесимметричной задачи об определении положения равновесия мягкой оболочки вращения // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2005. – № 1. – С. 25–30.
44. Zheltukhin V., Chebakova V. Numerical solution of the model problem of CCRF-discharge at atmospheric pressure // MATEC Web of Conferences. – 2017. – V. 129, art. 03017.
45. Chebakova V.Y. Modeling of radio-frequency capacitive discharge under atmospheric pressure in argon // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2017. – V. 38, № 6. – P. 1165–1178.

РАЗДЕЛ II. ХИМИЯ

Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Теоретическая оценка относительной стабильности конформеров дигермана

Уфимский государственный нефтяной технический университет
Уфимский государственный авиационный технический университет
(Россия, Уфа)

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-04

idsp: 000001:lj-31-03-2018-04

Аннотация

В рамках расчетных приближений HF, DFT-метода PBE [базисы 3 ζ , 6-311++G (d,p), cc-pVDZ, pVDZ, 6-311++G(3df, 3dp)], а также метода MP2 RI-MP2/ λ 2 показано, что поверхность потенциальной энергии молекулы дигермана, Ge₂H₆, содержит минимум, соответствующий конформеру шахматной формы и переходное состояние, отвечающее заслоненной конформации. Получена оценка барьера вращения вокруг связи Ge-Ge.

Ключевые слова: дигерман, конформер, компьютерное моделирование.

Abstract

Using approximations HF, DFT-method PBE [basis sets 3 ζ , 6-311++G (dp), cc-pVDZ, pVDZ, 6-311++G(3df, 3dp)] and MP2 method RI-MP2/ λ 2 it has been shown that the potential energy surface of digermane molecule, Ge₂H₆, contains minimum, corresponds to the staggered conformer and transition state – eclipsed form. The estimation of the rotation barrier around Ge-Ge bond was obtained.

Keywords: digermane, conformer, computer simulation.

Известно, что дигерман, Ge₂H₆, применяется для получения моно- либо поликристаллических тонких пленок на подложках кремния [1] с помощью процедуры эпитаксии (ориентированный рост одного монокристалла на поверхности другого) в ходе производства полупроводниковых устройств. Являясь аналогом этана, молекула дигермана отличается более значимой длиной центральной связи. Впервые установленная в рамках метода дифракции электронов в работе [2], она составляет 2.40 Å (согласно уточненным данным 2.404±0.003 Å [3]). Отчасти вследствие этого значение барьера вращения вокруг связи Ge-Ge меньше, чем у этана (1.2 ккал/моль [4]). В этой связи целью настоящей работы является конформационный анализ молекулы дигермана с помощью метода HF (пакет HyperChem [5]), а также DFT расчетного приближения PBE (программный комплекс ПРИРОДА [6]), базисы 3 ζ , 6-311++G (d,p), cc-pVDZ, pVDZ, 6-311++G(3df, 3dp), – и метода RI-MP2/ λ 2.

Установлено, что поверхность потенциальной энергии (ППЭ) молекулы дигермана содержит минимум, отвечающий шахматной форме (А), и переходное состояние, соответствующее заслоненной конформации (В) (рис. 1).

Рис. 1. Стационарные точки на ППЭ молекулы дигермана

Графическая зависимость энергии молекулы дигермана от величины торсионного угла H-Ge-Ge-H представлена на рисунке 2, а термодинамические параметры, описывающие активационный барьер вращения вокруг связи Ge-Ge, – в таблице.

Согласно полученным результатам, различие в энергии между шахматной и заслоненной формами ($\Delta G_{298}^\ddagger$) в рамках всех использованных расчетных приближений составляет 1.1 – 1.5 ккал/моль, что хорошо согласуется с данными экспериментальных исследований (1.2 ккал/моль [7]). Следует также отметить ожидаемое понижение рассматриваемой величины по сравнению с молекулой этана, для которого в рамках метода PBE/3 ζ $\Delta G_{298}^\ddagger$ составляет 2.5 ккал/моль [8].

Рис. 2. Зависимость относительной энергии свободной молекулы дигермана от величины торсионного угла HGeGeH (метод PBE/3 ζ , 0 K, относительная энергия шахматной формы принята за нуль)

Относительные энергии молекулярных форм дигермана*

Метод расчета	$\Delta E_0^\ddagger$ ккал/моль	$\Delta H_{298}^\ddagger$ ккал/моль	$\Delta G_{298}^\ddagger$ ккал/моль	$-\Delta S_{298}^\ddagger$ кал/моль К
HF/pVDZ	0.7	0.06	1.5	3.3
PBE/3 ζ	0.5	0	1.1	3.7
PBE/6-311++G(d,p)	0.5	0.03	1.1	3.7
PBE/6-311++G(3df, 3dp)	0.6	0.1	1.2	3.8
PBE/cc-pVDZ	0.5	0.05	1.1	3.5
RI-MP2/ λ 2	0.7	0.2	1.2	3.4

*) Относительно формы А

Следует также упомянуть об отрицательных значениях энтропийной составляющей ($\Delta S_{298}^\ddagger$), которые указывают на повышенную чувствительность переходного состояния к пространственным требованиям.

1. Hart J., Hazbun R., Eldridge D., Hickey R., Femando N., Adam T. Zollner S., Kolodzey J. Tetrasilane and digermane for the ultra-high vacuum chemical vapor deposition of SiGe alloys // Thin Solid Film. 2016. V. 604. P. 23-27.
2. Pauling L., Laubengayer A.W., Hoard J.L. The electron diffraction study of digermane and trigermane // J. Am. Chem. Soc. 1938. V. 60. N 7. P. 1605-1607.

3. Molecular structure by diffraction methods / Ed. by Sim G.A. and Sutton L.E. The Chemical Society, Burlington House, Piccadilly, London, 1973. P. 125.
4. Quijano-Quiñones R.F., Quesadas-Rojas M., Cuevas G., Mena-Rejón G.J. The rotational barrier in ethane: a molecular orbital study // *Molecules*. 2012. V. 17. N 4. P. 4661-4671.
5. HyperChem 8.0. <http://www.hyper.com>.
6. Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // *Russian Chemical Bulletin*. 2005. V. 54. № 3. P. 820-826.
7. Dows D.A., Hexter R.M. Infrared spectra of gaseous and solid digermane // *J. Chem. Phys.* 1956. V. 24. N 5. P. 1029-1033.
8. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нанотрубках // *Росс. хим. журн.* 2017. Т. 61. № 1. С. 37-47.

Максимов Ф.Ф.¹, Захарова С.С.², Павлов Н.М.¹, Максимова Т.П.¹

Исследование химического состава Челябинского метеорита

¹*Средняя общеобразовательная школа
(Россия, Горный улус, с.Бердигестях)*

²*Северо-восточный государственный университет им. М.К. Аммосова
(Россия, Якутск)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-05

idsp: 000001:lj-31-03-2018-05

Аннотация

В статье дается описание внешнего вида и внутренней структуры осколка метеорита; его минеральный и элементный состав. Проведена классификация метеорита по его элементному составу. Изучение химического состава метеоритов подтверждает материальное единство вселенной, и именно то, что метеориты, и наша Земля, и вообще все небесные тела солнечной системы состоят из одних и тех же химических элементов. Это говорит об их общем происхождении, об их генетической связи.

Ключевые слова: метеорит, минеральный состав метеорита, атомно-эмиссионный спектрометр

Abstract

The article describes the appearance and internal structure of the meteorite fragment; its mineral and elemental composition. Classification of the meteorite by its elemental composition is carried out. The study of the chemical composition of meteorites confirms the material unity of the universe, and precisely that meteorites, and our Earth, and in general all the celestial bodies of the solar system consist of the same chemical elements. This indicates their common origin, their genetic connection.

Key words: meteorite, mineral composition of meteorite, atomic emission spectrometer

В Челябинске 15 февраля 2013 года в 9:20 по местному времени было отмечено вхождение в атмосферу метеорита на огромной скорости, который взорвался на высоте около 20 километров над городом, в результате чего были обнаружены в окрестностях города его осколки различных размеров. Вес самого крупного фрагмента Челябинского метеорита составил 503,3 кг. Данное небесное тело оказалось самым крупным из тех, что падали на Землю после Тунгусского метеорита (1908 г). По числу пострадавших (1613 человек) падение этого метеороида не имеет аналогов в мировой истории.

Метеориты непрерывно падают на Землю. По подсчетам ученых, ежегодно падает по крайней мере тысяча метеоритов. Однако только ничтожная часть их, всего лишь 4-5 метеоритов в течение года, бывает найдена после падения. Большинство метеоритов падает в моря и в океаны, в полярные страны и пустыни, в горные и лесистые районы, и вообще вдали от населенных мест. Разрушаясь под влиянием атмосферного воздействия,

они примешиваются к почве, из почвы попадают в растения и через растения, которые употребляются в пищу животными и человеком метеоритные частицы попадают в организм человека. И, таким образом, мы видим самую тесную связь нашей Земли, с окружающей ее вселенной. Ученые пытались подсчитать ежегодный прирост массы Земли за счет падения метеоритов, который за год достигает миллионы тонн.

Академик Вернадский В.И. считал, что никакого прироста массы Земли не происходит. Получая вещество в виде метеоритов и метеорной пыли, Земля отдает в солнечную систему другие материальные частицы, атомы, газы и тончайшую пыль. В результате существует подвижное материальное равновесие. Таким образом, академик Вернадский В.И. пришел к выводу, что мы имеем дело «не со случайным падением отдельных метеоритов, болидов, космической пыли на Землю, а это - планетарный процесс, представляющий материальный обмен нашей планеты с космическим пространством» [1]. К настоящему времени, гипотетически, большинство советских ученых считают, что метеориты представляют собой обломки одного или нескольких крупных небесных тел – планет, распавшихся в далеком прошлом. Их возраст составляет от 600 до 4 с лишним млрд лет (по аргону и калию).

Нами было проведено исследование внешнего вида, внутренней структуры и химического состава осколка метеорита «Челябинск».

Исследование внешнего вида и внутренней структуры осколка метеорита по электронному микроскопу показало схожесть с результатами исследований челябинских ученых, подтверждающее, что данный осколок является настоящим фрагментом метеорита «Челябинск».

Рис.1. Внешний вид фрагмента метеорита «Челябинск», найденного в окрестности п. Тимирязевский. А- внешний вид; В – стил фрагмента;

Рис.2. Внешний вид осколка метеорита под электронным микроскопом

Рис.3. Изображение среза фрагмента метеорита, сделанного с помощью электронного сканирующего микроскопа.

Минеральный состав челябинского метеорита был исследован в Уральском научном центре и представлен в таблице 1[2]. В основном, он представлен оливином и ортопироксеном, в меньших количествах обнаружены сульфиды железа (троилит) и никеля (хизлевурит) и самородные металлы группы железа и никеля (камасит, тенит), выявлены – хромит, плагиоклаз, а также стекло полевошпатового состава.

Таблица 1

Минеральный состав метеорита «Челябинский» [2]

№	Минерал	Формула	Примечание
1	Оливин	$(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$	Основ
2	Ортопироксен	$(\text{Mg,Fe})_2\text{Si}_2\text{O}_6$	Основ
3	Троилит	FeS	Примеси
4	Хизлевудит	$(\text{Ni,Fe})_3\text{S}_2$	Примеси
5	Камасит	альфа-(Fe,Ni)	Примеси
6	Тенит	гамма-(Fe,Ni)	Примеси
7	Хромит	$(\text{Fe,Mg})\text{Cr}_2\text{O}_4$	Примеси
8	Диопсид	$\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$	Примеси
9	Плагиоклаз	$(\text{Ca,Na})\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8$	Примеси
10	Ильменит	FeTiO_3	Примеси
11	Хлорапатит	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$	Примеси
12	Мерриллит	$\text{Ca}_9\text{NaMg}(\text{PO}_4)_7$	Примеси
13	Стекло полевошпатового состава		Примеси

Нами был исследован элементный состав Челябинского метеорита на многоканальном атомно-эмиссионном спектрометре с анализатором «МАЭС». Принцип действия комплекса «МАЭС» основан на измерении интенсивности линий в спектре эмиссионного излучения атомов анализируемых элементов, генерируемого источником возбуждения спектров. Содержание элементов в образце определяется по градуировочным зависимостям между интенсивностью атомно-эмиссионного излучения и содержанием элементов в образцах.

Как известно, метеориты по элементному составу классифицируются на железные, железо-каменные и каменные (таблица 2) [3].

Проведенный элементный анализ Челябинского метеорита позволил нам, используя таблицу 2, провести классификацию исследованного метеорита. По содержанию железа(17,10%), кремния (13,10%), магния (10,0%), никеля (1,60%), алюминия(1,10%) Челябинский метеорит может быть отнесен к каменным метеоритам. Обращает на себя внимание более высокое содержание кальция (3,60 вместо 1,80%) и низкое содержание серы (0,10 вместо 1,82%). На поверхности метеорита, кроме этого, обнаружены марганец(0,27%), хром(0,18%) и следы титана (0,07%). Последний вообще не обнаружен в изученных метеоритах. Уникальным свойством Челябинского метеорита является высокое содержание в нем серебра, достигающего значения 1,50% на его

поверхности, а во включениях-15,40%, в то время, как в других метеоритах серебро вообще не обнаружено (таблица 3).

В действительности, изучение многими учеными химического состава самых разнообразных метеоритов на протяжении более сотни лет показало, что в метеоритах нет ни одного неизвестного на Земле химического элемента. В них находятся практически все известные на Земле химические элементы, хотя большинство из них составляет ничтожно малую долю, уловимую только при очень тонких спектральных анализах.

Таким образом, изучение химического состава метеоритов подтверждает материальное единство вселенной, и именно то, что метеориты, и наша Земля, и вообще все небесные тела солнечной системы состоят из одних и тех же химических элементов. Это говорит об их общем происхождении, об их генетической связи.

Таблица 2

Элементный состав метеоритов разных классов [3]

№	Элементы	Классы метеоритов		
		Железные, % вес	Железо-каменные, % вес	Каменные, % вес
1	Железо (Fe)	90,85	55,33	15,52
2	Никель (Ni)	8,50	5,43	1,10
3	Кобальт (Co)	0,60	0,30	0,08
4	Медь (Cu)	0,02	-	0,01
5	Фосфор (P)	0,17	-	0,11
6	Сера (S)	0,04	-	1,83
7	Углерод (C)	0,03	-	0,17
8	Кислород (O)	-	18,55	41,01
9	Магний (Mg)	0,03	12,33	14,30
10	Кальций (Ca)	0,02	-	1,80
11	Кремний (Si)	0,01	8,06	21,00
12	Натрий (Na)	-	-	0,80
13	Калий (K)	-	-	0,07
14	Алюминий (Al)	-	-	1,56
15	Марганец (Mn)	0,05	-	0,16
16	Хром (Cr)	0,01	-	0,40

Таблица 3

Элементный состав Челябинского метеорита

№	Элементы	Содержание, % вес	
		На поверхности метеорита	Во внутренней структуре
1	Кремний	22,3	13,1
2	Железо	13,8	17,1
3	Магний	12,8	10,0
4	Кальций	2,1	3,8
5	Алюминий	1,9	1,1
6	Серебро	1,5	15,4
7	Натрий	1,1	
8	Марганец	0,27	
9	Никель	0,25	1,6
10	Свинец	-	4,2
11	Хром	0,18	
12	Калий		
13	Сера		0,1
14	Титан		

1. В.И.Вернадский. Труды по всеобщей истории науки.-М.: Наука, 1988. 336С.
2. Минеральный состав метеорита «Челябинский». Sanktpeterburg/ bezformata.ru/listnews/meteorit-vedut-onlinjn. http://93. 88. 180.250
3. Классификация метеоритов. <https://ru.wikipedia.org/wiki/>.

Нефедьева Т.А.**Качество родниковой воды Сурского района Ульяновской области***Ульяновский государственный университет
(Россия, Ульяновск)**doi: 10.18411/lj-31-03-2018-06**idsp: 000001:lj-31-03-2018-06***Аннотация**

В статье представлены результаты исследования родников, используемых в качестве источников питьевого водоснабжения в Сурском районе Ульяновской области. Выявлены приоритетные загрязняющие вещества в воде подземных источников, к которым относятся кремний, кальций, магний, и общая жесткость.

Ключевые слова: родник, загрязняющие вещества, качество воды.

Abstract

The article presents the results of the study of springs used as sources of drinking water supply in Sursky district of Ulyanovsk region. Identified priority pollutants in the water of underground sources, which include silicon, calcium, magnesium, and the overall rigidity.

Keywords: spring, pollutants, water quality

Введение

Сохранение источников подземных вод от истощения и загрязнения – приоритетная задача в области государственной политики по охране компонентов сред обитания. Родники – источники пресных вод, носители геологической и культурной информации о населении определенной местности, а также участники религиозно-культовых обрядов [1].

Родниковая вода является альтернативным источником питьевой воды и находится у населения в приоритете. Для жителей Сурского района Ульяновской области основным источником питьевого водоснабжения является подземная вода. Контроль качества родниковой воды позволяет своевременно устанавливать факт его изменения, выявлять и своевременно устранять причины ухудшения свойств воды, исключать неблагоприятное воздействие на здоровье человека. При оценке качества питьевой воды руководствуются СанПиН 2.1.4.1175-02 «Гигиенические требования к качеству воды нецентрализованного водоснабжения» [2].

Цель исследования – провести физико-химическое исследование родниковых вод, используемых в качестве источников питьевого водоснабжения Сурского района Ульяновской области.

Материалы и методы исследований

Объект исследования – родниковая вода, используемая в качестве питьевого водоснабжения в Сурском районе. Муниципальное образование «Сурский район» (далее – МО «Сурский район») расположен на северо-западе Ульяновской области. В состав входит 7 административных единиц: 1 городское поселение, 6 сельских поселений (Сурское городское поселение, Астрадамовское, Лавинское, Никитинское, Сарское, Хмельёвское, Чеботаевское сельские поселения). Численность населения района составляет 18,5 тыс. человек. Основными источниками водоснабжения населенных пунктов служат артезианские скважины и кооптированные родники.

Наибольшее развитие в сельской местности получили локальные системы водоснабжения. Централизованным водоснабжением обеспечены 27 населенных пунктов МО «Сурский район», в них водоснабжение осуществляется через водоразборные колонки от сетей уличного водопровода. Остальные населенные пункты пользуются водой из нецентрализованных источников (родники, колодцы,

индивидуальные скважины). Для добычи воды используется глубоководные скважины, не имеющие очистных сооружений, обеззараживающих установок, организованных и благоустроенных зон санитарной охраны. Одной из причин неудовлетворительного качества воды, подаваемой населению, является высокая изношенность водопроводных сетей [3].

В связи с вышеизложенным, принято решение провести физико-химическое исследование родниковой воды. Исследовались родники: «Сергия Радонежского» (с. Белый Ключ), «Гремячий» (пос. Элита), «Власов родник» (с. Малый Барышок), «Золотой Ключ» (с. Кивать), «Городецкий» (д. Городец), «Георгиевский родник» (серебряный источник), «Николая Чудотворца», «Щелкан», родник в р.п. Сурское (в лесу), «Студеный» (с. Большой Кувай). Отбор и анализ воды проводились в летний период. В воде определяли содержание кальция, магния, кремния, свинца, цинка, никеля, меди, хрома, железа, марганца, алюминия, а также сульфат-иона, нитрат-иона, хлорид-иона и общей жесткости.

Анализ проводился на базе аккредитованной химико-аналитической лаборатории Научно-исследовательского института Ульяновского государственного университета. Работа была проведена с помощью аттестованных методик на сертифицированном оборудовании: спектрометр эмиссионный с индуктивно-связанной плазмой iCAP-6500 Duo, спектрофотометр «ЮНИКО 2100».

Результаты и их обсуждение

Часть исследуемых родников («Сергия Радонежского», «Гремячий», «Студеный», «Золотой ключ») используется, как основной источник водоснабжения населенных пунктов, в которых они располагаются. Вода в них соответствует установленным нормативам качества по анализируемым веществам, за исключением содержания кремния (рис.1, табл.1). Практически повсеместно, за исключением родников «Щелкан» и «Николая Чудотворца» обнаружено превышение содержания кремния. Постоянное употребление воды с повышенным содержанием кремния способствует возникновению мочекаменной болезни, формированию злокачественных опухолей [4]. Результаты исследования представлены на рисунке 1.

1 – «Сергия Радонежского», 2 – «Гремячий», 3 – «Власов родник», 4 – «Золотой ключ», 5 – «Городецкий», 6 – «Георгиевский родник», 7 – «Николая Чудотворца», 8 – «Щелкан», 9 – родник в р.п. Сурское, 10 – родник в с. Лава, 11 – «Студёный».

Рисунок 1. Содержание катионов кремния в родниковой воде

Рисунок 2. Содержание катионов железа и марганца в родниковой воде (порядковый номер родников аналогичен с рисунком 1)

Таблица 1

Результаты химического исследования родниковой воды

Наименование родника	Наименование химических показателей											
	Ni ²⁺ , мг/дм ³	Mg ²⁺ , мг/дм ³	Ca ²⁺ , мг/дм ³	Cu ²⁺ , мг/дм ³	Al ³⁺ , мг/дм ³	Pb ²⁺ , мг/дм ³	Zn ²⁺ , мг/дм ³	Cr ³⁺ , мг/дм ³	Жесткость (общая), °Ж	SO ₄ ²⁻ , мг/дм ³	Cl ⁻ , мг/дм ³	NO ₃ ⁻ , мг/дм ³
	Предельно-допустимая концентрация (ПДК)											
	0,02	50	130	1	0,2	0,01	1	0,05	7-10	500	350	45
«Сергия Радонежского»	0,002	6,2	81,6	0,0003	0,008	0,0002	0,0003	0,0009	5,1	4,5	0,7	11,5
«Гремячий»	0,0016	5,9	67,3	0,0004	0,004	0,0001	0,0004	0,0004	4,8	5,4	0,6	0,5
«Власов родник»	0,0055	5,9	77,5	0,0003	0,005	0,0003	0,0007	0,0004	5,3	6,8	4,1	0,5
«Золотой ключ»	0,0013	5,2	69,8	0,0007	0,009	0,0004	0,0005	0,0012	5,2	9,3	3,7	0,5
«Городецкий»	0,0023	10,7	84,4	0,0009	0,006	0,0005	0,0002	0,0009	5,3	10,5	0,9	0,9
«Георгиевский родник»	0,0041	9,8	73,8	0,0010	0,005	0,0005	0,0008	0,0008	5,0	7,3	0,6	0,6
«Николая Чудотворца»	0,0009	20,6	85,3	0,0015	0,008	0,0004	0,0007	0,001	7,6	51,1	4,6	2,5
«Щелкан»	0,0026	55,2	296	0,0010	0,008	0,0003	0,0026	0,0005	14,2	42,9	121	0,5
Родник в р.п. Сурское	0,0081	18,1	63,3	0,0003	0,003	0,0003	0,0015	0,0011	0,1	45,3	0,4	0,5
Родник с. Лава	0,0014	3,7	67,2	0,0011	0,005	0,0002	0,0003	0,0005	4,0	0,64	0,4	11,3
«Студёный»	0,0007	8,6	71,2	0,0013	0,004	0,0002	0,0006	0,0006	4,9	0,77	0,3	0,8

Примечание: Выделенные данные обозначают превышение норматива

Обнаружено превышение норматива жесткости в роднике «Щелкан» в 1,4 раза, а также кальция в 2,3 раза и магния в 1,1 раза (табл.1).

Постоянное употребление воды с повышенной жесткостью приводит к накоплению солей в организме и в конечном итоге к заболеваниям суставов (артриты, полиартриты), образованию камней в почках, желчном и мочевом пузырях [5].

Превышение содержания железа (1,4 раза) и марганца (1,5 раза) обнаружено в роднике «Николая Чудотворца»; «Щелкан» и родник в р.п. Сурское превышают норму марганца в 1,3 и 8,5 раза соответственно (рис.2).

Железо и марганец являются обязательной составной частью природной подземной воды, поскольку входят в состав различных почв и пород, по которым протекает вода. Поэтому проблема железа и марганца в воде – одна из самых распространенных [6].

Присутствие железа в воде вредно для здоровья. Высокий уровень железа в питьевой воде повышает риск развития дефицита цинка и тяжелых форм атопического дерматита. Избыточное железо (более 0,3 мг/дм³) накапливается в организме человека и разрушает печень, иммунную систему, увеличивая риск инфаркта, вызывает аллергические реакции, негативно влияет на репродуктивную функцию организма [7].

Марганец относится к группе биотиков. Марганец усугубляет протекание физиологической желтухи. Избыток марганца опасен: его накопление в организме может

привести к тяжелейшему заболеванию – болезни Паркинсона [8]. Повышенные концентрации марганца способствуют развитию аллергических реакций, болезней кожи и подкожной клетчатки, увеличивают риск развития болезней крови. В настоящее время установлена достоверная зависимость между повышением допустимого уровня марганца и числа болезней костно-мышечной и мочеполовой систем, осложнений беременности и родов [9].

Заключение

Основной проблемой качества исследованных родниковых вод является избыток в ней катионов кремния, кальция, магния и общей жесткости. Большая часть родниковой воды соответствует установленным нормативам, за исключением родников «Щелкан», «Николая Чудотворца» и родник в р.п. Сурское (в лесу). Нужно обратить внимание на то, что часть родников («Сергия Радонежского», «Гремячий», «Студеный», «Золотой ключ») используется, как основной источник водоснабжения населенных пунктов, в которых они располагаются. Для предупреждения возможных негативных последствий от потребления родниковой воды необходимо ознакомить население с результатами исследований. Жителям рекомендуется кипятить воду перед каждым использованием, это значительно снизит риск возникновения негативных последствий.

1. Экологическое состояние родников (на примере Брянской области) / Л.С. Плевако, А.Е. Леонова, А.Ю. Зверева, Л.Н. Анищенко // Вестник Брянского государственного университета. 2014. №4. С.155-160. – [Электронный ресурс] – Режим доступа. – URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=22991505> (дата обращения 13.03.2018).
2. СанПиН 2.1.4.1175-02 «Гигиенические требования к качеству воды нецентрализованного водоснабжения». – [Электронный ресурс] – Режим доступа. – URL: [kodeks://link/d?nd=901836057](https://kodeks.ru/link/d?nd=901836057) (дата обращения 13.03.2018).
3. Муниципальное образование «Сурский район» Ульяновской области. – [Электронный ресурс] – Режим доступа. – URL: <http://surskoe.ulregion.ru/gkx/1787.html> (дата обращения 13.03.2018).
4. Современные представления о влиянии качества питьевой воды на состояние здоровья населения / А.В. Иванов, Е.А. Тафеева, Н.Х. Давлетова, В.В. Вавашкин // Вода: химия и экология. 2012. №3. С. 48-53.
5. Кузнецова Т.А. Влияние родниковой воды на состояние здоровья населения (на примере Барышского района Ульяновской области) // Ульяновский медико-биологический журнал. 2016. №1. С. 158-168.
6. Адсорбция катионов марганца и железа природными сорбентами / Е.Н. Калюкова, Н.Н. Иванская, В.Т. Письменко // Сорбционные и хроматографические процессы. 2010. Т. 10. Вып. 2. С. 194-200.
7. Качество питьевой воды и аллергические заболевания у населения Тульской области / В.М. Бержец, С.В. Хлгатын, В.А.Федорова // ИММУНОПАТОЛОГИЯ, АЛЛЕРГОЛОГИЯ, ИНФЕКТОЛОГИЯ. 2002. №3. С. 62-66. – [Электронный ресурс] – Режим доступа. – URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=21152937> (дата обращения 13.03.2018).
8. Бадюк Н.С. Стрикаленко Т.В. Вода и здоровье: к анализу материалов социологического опроса // ЭКВА-ТЭК-2000 Тез. докл. IV междунар. Конгресса «Вода: экология и технология». 2000. Москва: Сибико Инт., 2000. С. 741-742.
9. Григорьев Ю.И., Н.В. Ляпина. Оценка риска загрязнения питьевой воды для здоровья детей Тульской области // Гигиена и санитария. 2003. №3. С. 36-38.

Нурымбетов Б.Ч.¹, Кудайбергенова А.М.²

**Изучение процессов гидратационного структурообразования в системе
известково-белитовое вяжущее – карбонат – вода**

¹*Каракалпакский государственный университет*

²*Нукусский государственный педагогический институт
(Узбекистан, Нукус)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-07

idsp: 000001:lj-31-03-2018-07

Аннотация

Изучены роль карбоната кальция в качестве наполнителя в процессе структурообразования в дисперсиях известково-белитовых вяжущих. Установлено, что

карбонат не оказывая влияние на степень пересыщения раствора заполняет пустоты между зернами песка и, тем самым, уплотняет систему, вследствие чего незначительно (20-25%) возрастает ее прочность. Наполнитель взаимодействует и с трехкальциевым алюминатом в составе известково-белитового вяжущего с образованием, гидрокарбоалюминатов кальция, которые также обуславливают дополнительный рост прочности системы в нормальных условиях твердения.

Ключевые слова: известково-белитовое вяжущее, мрамор, известь, гидратационное структурообразование, гидратация, термообработка, гидросиликат, коагуляционное, кристаллизационное, конденсационное.

Получение известково – белитового вяжущего (ИБВ) и структуры, которые возникают в их дисперсиях были рассмотрены ранее [1,2,3].

Представляет особый интерес изучение роли карбонатов в качестве наполнителя в процессе структурообразования в дисперсиях ИБВ. Карбонаты в данной работе представлены отходами производства мрамора. Последний не вступает в химическое взаимодействие с гидратом окиси кальция, который содержится в составе известково-белитового вяжущего, но он взаимодействует с трехкальциевым алюминатом, образуя четырехкальциевый монокарбонатный гидроалюминат.

Гидратационное твердение ИБВ сопровождается очень высокими внутренними напряжениями, намного превышающими прочность контактов частиц и поэтому препятствующих образованию прочных структур. В присутствии микронаполнителей отмечается уменьшение размеров кристаллов $\text{Ca}(\text{OH})_2$ и соответственно увеличение числа частиц и кристаллизационных контактов, в результате чего снижаются напряжения и прочность структуры твердения должна повышаться [102].

Изученные соотношения (%) ИБВ к мрамору были 95:5, 90:10 и 85:15.

В табл.1 представлена кинетика структурообразования в системе ИБВ-мрамор-вода. Сам по себе мрамор не дает структуру твердения. В системе ИБВ-мрамор-вода с увеличением содержания мрамора в смеси водо-твердое отношение уменьшается за счет уменьшения количества ИБВ1 в системе, то есть мрамор не оказывает особого влияние на водо-твердое отношение.

Таблица 1.

Влияние мрамора на структурообразование в ИБВ

ИБВ на основе мергеля месторож- дения	Доба вка мрам ора, %	В/Т	Сроки измерения пластической прочности R_m , МПа											
			минуты			часы				сутки				
			1	15	30	1	2	4	6	1	3	7	14	28
Акбурлы	5	0,80	1,1	3,5	5,5	6,1	7,8	8,2	9,3	11,2	14,6	13, 1	17,3	20,6
Акбурлы	10	0,85	1,9	4,4	6,6	8,3	8,9	9,9	10, 2	12,4	15,1	13, 8	18,2	21,7
Акбурлы	15	0,80	1,8	4,6	5,6	7,1	8,4	8,9	10, 3	12,1	14,2	13, 7	17,7	21,4
Порлыгау	5	0,90	2,1	5,4	7,2	8,4	9,2	9,5	10, 5	11,3	14,2	13, 1	16,2	20,8
Порлыгау	10	0,85	1,9	4,1	8,3	9,9	10, 1	11, 6	12, 3	13,5	15,7	14, 6	18,1	22,7
Порлыгау	15	0,80	2,0	4,8	8,7	9,6	10, 5	12, 9	13, 1	13,2	14,9	13, 6	17,5	21,5

Как видно из таблицы 1, в присутствии наполнителя в начальные сроки, то есть в течение первых 1-2 ч. значительно увеличивается прочность, что может быть результатом увеличения количества вещества, необходимого для получения начального каркаса структуры твердения.

По истечении 7 суток наблюдается спад прочности в образцах, с последующим нарастанием ее. Это связано по видимому, с переходом коагуляционной структуры в кристаллизационной. Мрамор ускоряет этот процесс по сравнению с системой без наполнителя на 7 суток.

Исследования влияния мрамора на прочностные свойства (прочность при изгибе и сжатии) показали (табл.2) нарастания прочности во времени.

Таблица 2.

Влияние мрамора на кинетику твердения ИБВ

ИБВ на основе мергеля	Количество добавки, %	В/Т	Пределы прочности при изгибе/сжатии, МПа*					
			влажно-воздушное хранения			термовлажная обработка		
			3 сут	7 сут	28 сут	3 сут	7 сут	28 сут
Акбурлы	5	0,90	0,20 0,16	0,61 5,88	0,96 8,56	0,22 1,96	0,56 4,83	1,20 10,62
Акбурлы	10	0,85	0,36 2,25	0,87 6,96	1,21 11,30	0,40 2,52	0,95 8,43	1,45 13,20
Акбурлы	15	0,80	0,32 2,02	0,81 6,25	1,25 9,55	0,34 2,17	0,90 7,45	1,39 12,75
Порлыгау	5	0,90	0,25 1,96	0,56 5,90	1,07 10,20	0,26 2,10	0,80 5,35	1,29 12,73
Порлыгау	10	0,85	0,42 2,60	0,90 7,85	1,33 12,40	0,42 2,66	0,94 8,19	1,49 13,50
Порлыгау	15	0,80	0,40 2,40	0,85 6,36	1,27 12,23	0,45 2,86	0,91 7,90	1,45 13,15

*Данные, представленные в числителе имеют отношение к изгибу, а в знаменателе - к сжатию.

Прочность образцов ИБВ растет постепенно и к 28 суткам достигает максимального значения. Повышения прочности можно объяснить с тем, что мрамор не оказывая влияние на степень пересыщения раствора, заполняет пустоты между зернами песка и, тем самым, уплотняет систему, вследствие чего возрастает его прочность. По результатам исследований прочностных свойств ИБВ, оптимальным количеством добавки мрамора можно считать 10%, так как в при этом обнаружен максимум прочности при влажно-воздушном твердении и при термовлажной обработке.

Таким образом, исследования показывают, что введение мрамора в ИБВ значительно влияет на его прочностные характеристики, усиливает прочность системы за счет образования четырехкальциевого монокарбонатного гидроалюмината.

1. Нурымбетов Б.Ч., Туремуратов Ш.Н., Адылов Дж.К. Синтез и исследования известково-белитового вяжущего на основе мергеля Акбурлинского месторождения. Наука и образование Южного Казахстана, Шымкент. –2000. –С.223-225.
2. Б.Ч.Нурымбетов, А.Д. Жуков, М.О. Асаматдинов, Ш.Н. Туремуратов. Исследование кинетики гидратационного структурообразования и свойств известково-белитовых вяжущих на основе мергелей. Вестник Московского Государственного Строительного Университета, Россия, 2016. № 4. с.52-56.
3. Б.Ч.Нурымбетов, А.Д. Жуков, М.О. Асаматдинов, Ш.Н. Туремуратов. Влияние тонкодисперсного наполнителя на процессы образования силикатов кальция. Вестник Московского Государственного Строительного Университета, Россия, 2017., том 12. с.88-93.

Нурымбетов Б.Ч.¹, Кудайбергенова А.М.²

Изучение процессов гидратационного структурообразования в системе известково-белитовое вяжущее –растворимый ангидрит-вода

¹Каракалпакский государственный университет

²Нукусский государственный педагогический институт
(Узбекистан, Нукус)

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-08

idsp: 000001:lj-31-03-2018-08

Аннотация

Изучены роль растворимого ангидрита в качестве наполнителя в процессе структурообразования в дисперсиях известково-белитовых вяжущих. Показано, что влияние растворимого ангидрита на дополнительный рост прочности системы связано со степенью пересыщения раствора по отношению к ионам кальция и, соответственно, с усилением процесса формирования новообразований (гиллебрандит, тоберморит, C-S-H(II)).

Ключевые слова: известково-белитовое вяжущее, растворимый ангидрит, гидратационное структурообразование, гидратация, термообработка, гидросиликат, коагуляционное, кристаллизационное, конденсационное, трехкальциевый алюминат.

Получение известково – белитового вяжущего (ИБВ) и структуры, которые возникают в их дисперсиях были рассмотрены ранее [1,2,3].

В системе известково-белитовое вяжущее - растворимый ангидрит - вода в качестве гипсового наполнителя был использован продукт дегидратации двуводного гипса - растворимый ангидрит, получаемый дегидратацией двуводного гипса в интервале температур 220-3300С.

Для исследования был взят природный гипс, который подвергался термообработке в лабораторной печи при 3000С для получения растворимого ангидрита. Отношение известково-белитового вяжущего к ангидриту составляло как 90:10 и 85:15%.

Процесс гидратационного структурообразования в системе известково-белитовое вяжущее - растворимый ангидрит - вода обуславливается двумя процессами: гидратацией растворимого ангидрита и гидратацией известково-белитового вяжущего в присутствии ангидрита с образованием гидросульфалюмината кальция.

Растворимый ангидрит отличается от полугидрата более высокой водопотребностью, быстрым схватыванием и пониженной прочностью. Поэтому при получении строительного гипса следует избегать нагревания гипса до температур, при которых возможно его образование.

Сведений по изучению гидратации и структурообразования растворимого ангидрита в литературе мало, что возможно связано с неустойчивостью или технической незначительностью сырья.

Как видно из данных таблицы 1, с увеличением количества наполнителя, В/Т системы растет. Это связано с кристаллической решеткой растворимого ангидрита. Последний имеет высокую удельную поверхность и пористость, следствием чего является его повышенная водопотребность. Это и оказывает влияние на повышение В/Т системы. Введение растворимого ангидрита обуславливает повышенную прочность в начальные сроки, то есть до 7 сут.

Таблица 1.

Влияние растворимого ангидрита на кинетику структурообразования паст ИБВ

ИБВ на основе мергеля месторождения	Добавка гипса, %	В/Т	Сроки измерения пластической прочности Rm, МПа											
			минуты			часы				сутки				
			1	15	30	1	2	4	6	1	3	7	14	28
Акбурлы	10	1,00	3,9	7,1	9,5	11,4	12,2	12,9	13,9	16,5	19,7	18,2	20,9	25,5
Акбурлы	15	1,10	5,2	9,2	10,7	12,1	13,1	14,1	16,8	18,2	20,9	19,4	21,5	28,2
Порлытау	10	1,00	3,6	7,6	10,2	11,7	12,3	13,4	14,6	16,9	18,3	17,8	20,9	26,1

Порлытау	15	1,10	5,9	8,6	10,5	12,7	13,6	14,2	17,4	18,3	21,7	20,3	22,4	28,7
----------	----	------	-----	-----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

Это связано с быстрой гидратацией растворимого ангидрита с образованием $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ в течение 1 час, так как гидратация растворимого ангидрита заканчивается в это время. После образования двуводного гипса, наступает период его взаимодействия с трехкальциевым алюминатом с образованием трехсульфатного гидросульфатоалюмината кальция. Образование гидросульфатоалюмината кальция в начальный период твердения не вызывает понижения прочности из-за пластичности твердеющей системы.

Но после 7 суток, когда пластичность системы теряется, и прочность ее возрастает, образование трехсульфатной формы гидросульфатоалюмината кальция с 31 молекулами воды вызывает снижения ее прочности. Прочностные свойства системы ИБВ - растворимый ангидрит - вода приведены в табл.2.

Прочность образцов, как показывают данные таблицы, нарастает во времени. Начальная их прочность выше и это связано с быстрым схватыванием растворимого ангидрита. Но после 7 суток прочность системы несколько замедляется, однако она все же выше после 28 суток, чем у образцов известково-белитовых вяжущих без добавки ангидрита, на 45% и 41%, соответственно, для мергелей Акбурлинского и Порлытауского месторождений. Влияние растворимого ангидрита на рост прочности системы связано со степенью пересыщения раствора по отношению к ионам кальция и, соответственно, с усилением процесса формирования новообразований. При термовлажной обработке прочность образцов постепенно увеличивается во времени.

Таблица 2.

Влияние растворимого ангидрита на механическую прочность при твердении ИБВ

ИБВ на основе мергеля	Количество наполнителя, %	В/Т	Пределы прочности при сжатии, МПа					
			влажно-воздушное твердение			термовлажная обработка		
			3 сут	7 сут	28 сут	3 сут	7 сут	28 сут
Акбурлы	10	1,00	5,51	9,68	13,40	6,15	11,70	17,32
Акбурлы	15	1,10	7,25	13,56	16,19	8,47	15,73	20,50
Порлытау	10	1,00	6,18	10,26	14,65	7,47	12,70	18,43
Порлытау	15	1,10	8,05	13,76	17,43	9,15	16,10	21,86

Таким образом, на основе полученных данных можно заключить, что оптимальным количеством наполнителя растворимого ангидрита можно считать 15%. Дополнительную прочность образцу придает эттрингит, который образуется при взаимодействии гипса с СЗА.

1. Нурымбетов Б.Ч., Туремуратов Ш.Н., Адылов Дж.К. Синтез и исследования известково-белитового вяжущего на основе мергеля Акбурлинского месторождения. Наука и образование Южного Казахстана, Шымкент. –2000. –С.223-225.
2. Б.Ч.Нурымбетов, А.Д. Жуков, М.О. Асаматдинов, Ш.Н. Туремуратов. Исследование кинетики гидратационного структурообразования и свойств известково-белитовых вяжущих на основе мергелей. Вестник Московского Государственного Строительного Университета, Россия, 2016. № 4. с.52-56.
3. Б.Ч.Нурымбетов, А.Д. Жуков, М.О. Асаматдинов, Ш.Н. Туремуратов. Влияние тонкодисперсного наполнителя на процессы образования силикатов кальция. Вестник Московского Государственного Строительного Университета, Россия, 2017., том 12. с.88-93.

Перепелицына С.Е., Корчунов И.В., Потапова Е.Н.

Влияние современных добавок на свойства шлакосодержащих цементов

*Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева
(Россия, Москва)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-09

idsp: 000001:lj-31-03-2018-09

Аннотация

Замещение части цемента минеральными добавками (в том числе шлаками) активно используется в современном строительстве. Данное обстоятельство обусловлено

стремлением получить наиболее дешевый строительный материал. Для того, чтобы данный материал не уступал по свойствам рядовым и широко известным материалам, в данной работе рассматривалась возможность использования водоредуцирующих добавок - пластификаторов серии Master с целью повышения его эксплуатационно-прочностных характеристик.

Ключевые слова: шлакосодержащий цемент, водоредуцирующие добавки, прочность

В современном мире целью любого технолога является стремление получение качественного продукта с минимальными ресурсо- и энергозатратами, при одновременном решении экологической проблемы. Чтобы этого достичь, часть цемента заменяют побочным продуктом металлургических производств (шлаком) в качестве вяжущего в цементно-песчаных системах. Такой цемент имеет низкую стоимость, однако отличается замедленным нарастанием прочности в начальные сроки твердения, а также выделяет значительно меньше теплоты при твердении, поэтому его используют при строительстве массивных сооружениях [1].

Для получения стойких, высокопрочных, способных длительное время противостоять внешнему пагубному воздействию окружающей среды необходимо снизить водотвердое отношение бетонного раствора в момент затворения. Чтобы этого достичь в строительстве активно применяют добавки-пластификаторы или водоредуцирующие добавки.

Пластифицирующие добавки – вещества, которые обладают поверхностно - активными свойствами. Увеличивая подвижность смесей, они позволяют облегчить формование изделий, снизить водопотребность смеси при затворении и увеличить конечную прочность. В настоящий момент активно используются добавки поликарбоксилатной природы, относящиеся к классу гиперпластификаторов, которые снижают количество воды затворения на 35-40 %. Наибольшая эффективность этого вида пластификаторов достигается за счет специфического строения их молекул – наличие длинных боковых цепей и возникающими в результате этого стерическими, то есть пространственными эффектами, что не приводит к замедлению процессов гидратации и набору прочности вяжущего [2].

Целью данной работы является изучение особенностей гидратации шлакосодержащего цемента (далее, ШСЦ) в присутствии пластифицирующих добавок и их влияние на физико-механические свойства получаемого цементного камня. Для исследования использовали цемент с добавкой 15 % шлака в количестве ЦЕМ II/A-Ш 42,5Н производства ООО «ХайдельбергЦементРус». В качестве пластифицирующих добавок использовали Master Rheobuild 1000 (далее, СП1), Master Glenium 116 (СП2), Master ACE 430 (СП3), Master Pozzolith MR55 (СП4).

Нормальная густота ШСЦ без добавок составила 33 %. При введении пластифицирующих добавок нормальная густота уменьшается до 20 %. Сроки схватывания изменяются по-разному. За исключением составов СП2 и СП4, чья природа позволяет отнести ее к добавкам слабой эффективности, время начала и конца схватывания, по сравнению с бездобавочным увеличивается (табл. 1).

Снижение количества воды затворения положительно сказывается на прочностных характеристиках образцов цементного камня. Было испытано большое количество составов с содержанием добавок от 0,1 до 3,0 %.

Таблица 1

Свойства цементного вяжущего в присутствии добавок

Свойства		Добавки				
		- (БД)	СП1	СП2	СП3	СП4
Нормальная густота, %		33,0	28,0	28,0	29,5	31,0
Сроки схватывания, мин	Начало	30	75	45	45	40
	Конец	100	155	55	115	50

Полученные результаты позволили выявить оптимальное содержание для каждой изучаемой добавки – 0,7 мас. %. В присутствии добавок-пластификаторов существенно возрастает как прочность при изгибе (рис. 2), так и прочность при сжатии (рис. 3). Исследование показало, что наиболее эффективной является добавка СП1 - Master Rheobuild 1000 на основе нафталинсульфонатов.

Рис 2. Влияние продолжительности твердения на прочность при изгибе цементов в присутствии различных добавок при их содержании 0,7 %.

Рис 3. Влияние продолжительности твердения на прочность при сжатии цементов в присутствии различных добавок при их содержании 0,7 %.

Таким образом, проанализировав полученные данные, можно заметить, что правильно подобранная концентрация пластифицирующих добавок обеспечивает нормальную консистенцию цементного теста при снижении воды затворения без последующей потери прочностных качеств. Так как прочностные характеристики во многом даже превышали характеристики бездобавочного - использование предложенных

добавок при возведении сооружений на основе шлакосодержащих цементов является экономически и практически обоснованным.

1. Корчунов И.В., Ахметжанов А.М., Потапова Е.Н. Влияние природы водоредуцирующих добавок на свойства цемента // Успехи в химии и химической технологии, 2017. Т. XXXI, № 3 (184). С. 52-54.
2. Корчунов И.В., Торшин А.О., Курдюмова С.Е., Дмитриева Е.А., Потапова Е.Н. Влияние эффективных водоредуцирующих добавок на свойства цемента // Сухие строительные смеси. 2017. № 2. С. 31-35.

Шевурдов В.П., Насакин О.Е., Илларионова Е.С.

Синтез, противоопухолевая активность аннелированных полицианозамещенных пентакарбо- и азотсодержащих гетероциклов

*Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова
(Россия, Чебоксары)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-10

idsp: 000001:lj-31-03-2018-10

Аннотация

На основе этан-1,1,2,2-тетракарбонитрила и гидразонов α,β -непредельных альдегидов синтезированы полицианозамещенные пентакарбо- и азотсодержащие гетероциклы из которых наиболее высокую химическую и противоопухолевую активность имеют соединения содержащие в циклах этил-1,1,2,2-тетракарбонитрильный фрагмент.

Ключевые слова: этан-1,1,2,2-тетракарбонитрил, гидразоны, противоопухолевая активность.

Проблема создания новых противоопухолевых средств является одной из наиболее актуальной задачей стоящей перед человечеством, так как онкологические заболевания наносят огромный ущерб обществу. Одним из перспективных направлений является синтез новых цианосодержащих соединений [1]. По данным Национального института рака (США) наивысшую противоопухолевую активность из всех известных лекарственных средств и химических веществ имеет цианосодержащее органическое соединение - цианоморфолиноадриамицин (NSC-357704).

Карбонитрилы являются неотъемлемой и важной частью многих процессов биосинтеза органических соединений, образующихся в растениях и организмах (витамин В12, рибцинин, антибиотик тойокамицин, цианогенные глюкозиды, цианолипиды, индол-3-ацетонитрил, β -циано-L-аланин др.). Наиболее вероятно предположение о том, что карбонитрилы в растениях является промежуточным продуктом синтеза белков. Многие карбонитрилы ингибируют рост опухолевых клеток и являются лекарственными средствами [1]. Выбор темы обусловлен также взаимосвязью живых систем с карбонитрилами, цианосодержащими соединениями. Так, при взаимодействии крови животных с железными опилками и поташом образуется желтая кровяная соль. Это соединение содержит в своем составе шесть цианогрупп и является источником получения синильной кислоты. А синильная кислота и продукты на ее основе являются основой формирования важнейших органических структур – аминокислот, белков и других – при возникновении и функционировании живых систем на Земле [2].

Для реализации потенциала карбонитрилов мы нашли новый подход – это получение уникальных структур на основе этан-1,1,2,2-тетракарбонитрила и гидразонов α,β -непредельных альдегидов. При изучении этих соединений выявляются ценные и уникальные свойства, что представляет интерес использовать их для практических целей в различных отраслях промышленности, в медицине. Лекарственные препараты на основе фенилгидразина производились уже в начале 20 века. Применение соединений гидразина обеспечило выдающиеся успехи в лечении психических заболеваний и туберкулеза. Производные гидразина изучаются в связи с проблемами онкологии и генетики. Это

является стимулом для развития методов синтеза и исследований химических превращений цианозамещенных гидразиновых соединений.

С целью разработки новых методов синтеза биологически активных соединений с цитостатическим действием проведено исследование по получению аннелированных полицианозамещенных пентакарбо- и азотсодержащих гетероциклов на основе этан-1,1,2,2-тетракарбонитрила и гидразонов α,β -непредельных альдегидов. Были использованы диметилгидразон и тиосемикарбазон кротонового альдегида. При взаимодействии этан-1,1,2,2-тетракарбонитрила с диметилгидразоном кротонового альдегида образуется 3-(2,2-диметилгидразинил)-5-метилциклопентан-1,1,2,2-тетракарбонитрил 1. Его нитрозирование и затем нагревание с соляной кислотой приводит к 2,5-диметил-3,4-дигидро-2Н-циклопента[е][1,2,4]триазин-6,6,7,7-тетракарбонитрилу 2.

Бицикл 2 необычно легко, при комнатной температуре, за несколько секунд присоединяет две молекулы метанола под действием каталитических количеств основания (триэтиламин, пиперидин, морфолин и др.) с образованием 10-амино-4,8-диметил-12,12-диметокси-1,9-дициано-3,4,6,11-тетразатрицикло[7.3.0.0.2,7]до-дека-2,8,11-триена 3.

При реакции этан-1,1,2,2-тетракарбонитрила с тиосемикарбазоном кротонового альдегида происходит формирование циклопентанового фрагмента и затем, за счет CN – NH взаимодействия образуется 3а,4,4-трициано-3-имино-5-метилгексагидроциклопента[с]-пиразол-2(1Н)-карботиоамид 4. Была исследована антипролиферативная активность соединения 4. Использована модель *in vitro*, позволяющая стандартизовать условия эксперимента для повторяющихся серий по методике «NCI-60 One-Dose Screen». Результаты исследований показали, что данное соединение наиболее активно по отношению к клеточным линиям лейкемии (HL-60(TB), K-562), рака легкого (A549/ATCC, NCI-H522), рака толстой кишки (HCC-2998, HT-29), меланомы (MALME-3М, UACC-257). Значительно более высокую антипролиферативную и противоопухолевую активность имеет соединение 2 и в среднем, на 60 клеточных линиях $LC_{50}=10$ мкМ (LC_{50} – концентрация вещества вызывающая гибель 50 % опухолевых клеток).

Рисунок 1. Молекулярная структура 3а,4,4-трициано-3-имино-5-метилгексагидроциклопента[с]пиразол-2(1Н)-карботиоамида 4 (PCA)

Этот показатель превышает активность известных противоопухолевых препаратов таких как бусульфан, цисплатин и др. Соединение 3 противоопухолевую активность не проявило. Таким образом, трансформация этил-1,1,2,2-тетракарбонитрильного фрагмента у бицикла 2, связанная с уменьшением количества нитрильных групп в результате присоединения двух молекул метанола (тетразотрициклотриен 3) приводит к полной потере противоопухолевых свойств. Эти данные подтверждают выдвинутую ранее теорию о фармакофорности этил-1,1,2,2-тетракарбонитрильного фрагмента [1].

1. Шевердов В.П., Насакин О.Е., Давыдова В.В. Проблема рака и карбонитрилы: монография. Чебоксары: Издательство ЧГУ им. И.Н. Ульянова, 2017, 176 с.
2. Гудман Ф. Морхауз Ф. Органические молекулы в действии. М.: Мир, 1977. 336 с.

РАЗДЕЛ III. ФИЗИКА

Рахымбеков А.Ж.

Уравнение материального баланса на суперионике

*Жетысуский государственный университет им. И.Жансугурова
(Республика Казахстан, Талдыкорган)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-11

idsp: 000001:lj-31-03-2018-11

Аннотация

В статье анализируется скорость обмена кислорода между супериоником на основе диоксида циркония и кислородсодержащей атмосферой над электродной поверхностью. Разработан метод расчета материального баланса электродных процессов, протекающих на границе суперионика и газовой среды над электродами.

Ключевые слова: твердый электролит, суперионик, электродвижущая сила, ток, электрод, датчик, контроль, оксид.

Abstract

The article analyzes the oxygen exchange rate between a superionic on the basis of zirconium dioxide and an oxygen-containing atmosphere over an electrode surface. A method has been developed for calculating the material balance of electrode processes occurring at the boundary of the superionics and the gaseous medium above the electrodes.

Key words: solid electrolyte, superionic, electromotive force, current, electrode, sensor, control, oxide

Создание на основе твердых оксидных суперионных проводников (ТОСП) или твердоэлектролитных датчиков (первичных преобразователей) и систем контроля и автоматизации – одно из интенсивно развивающихся направлений прикладной физики твердого тела. В работах [1,2,3] проведены измерения скорости обмена кислорода ряда твердых электролитов типа $0,9ZrO_2 + 0,1Y_2O_3$, $0,906ZrO_2 + 0,094Sc_2O_3$ в атмосферах кислорода и CO-CO₂. Эти оксидные композиции представляют значительный интерес для исследования, так как являются при повышенных температурах электролитами с проводимостью по ионам кислорода. Они стали основой многих высокотемпературных электрохимических устройств, которые все более широко применяются в различных областях науки и техники.

Развитие получил кислородный насос (КН) – устройство дозирования кислорода в газовом потоке (рис.1). Пропуская через такую перегородку ток от внешнего источника, дозируют кислород в одном из объемов. В этом состоит принцип кислородного насоса. В случае дозирования кислорода в газовом потоке перегородкой служит стенка трубки, которая с одной парой электродов образует качающуюся КС, с другой – измерительную секцию (КС и ИС). По трубке со скоростью Q пропускают инертный газ с концентрацией кислорода C_1 [4].

Значение C на выходе кислородного насоса (КН) зависит от величины тока I в цепи КС:

$$I = \frac{RT}{r4F} \cdot \ln \frac{C_1}{C_2} \quad (1)$$

где r – сопротивление перегородки или стенки трубки кислородного насоса.

Рис.1. Принципиальная схема кислородного насоса на основе твердого оксидного суперионного проводника.

Определяют C_2 по величине E , измеряемой на электродах измерительной секции ИС:

$$C_2 = C_1 \cdot \exp\left(\frac{-4FE}{RT}\right) \quad (2)$$

(здесь C_1 – концентрация, или парциальное давление кислорода вне трубки равно $0.21 \cdot 10^5$ Па).

Все процессы, протекающие в ТОСП, разделяются на массоперенос кислорода из потока к поверхности электрода; адсорбцию на электроде; массоперенос через пористый электрод к границе раздела электрод – электролит и ионизацию атомов; перенос через электролит. Надо учесть, что скорости процессов внешнего массообмена, адсорбции и ионизации атомов в условиях рабочей температуры ТОСП велики, примем, что основные кинетические затруднения обусловлены процессами диффузии кислорода через электрод и его переноса через электролит[5].

Для вывода уравнения материального баланса рассмотрим элементарный участок ТОСП, приняв, что C_0 – концентрация кислорода в окружающей атмосфере.

В объеме, ограниченном сечениями X_1 и X_2 за время Δt остается кислорода:

$$\Delta A_1 = [C(x_1) - C(x_2)]Q\Delta t = -Q \frac{\partial C_x}{\partial x} \Delta x \Delta t \quad (3)$$

через электрод к поверхности раздела за время Δt диффундирует кислорода

$$\Delta A_2 = P \frac{\pi d}{\delta} [C_x - C_3] \Delta x \Delta t \quad (4)$$

где P – коэффициент проницаемости электрода; C_3 – концентрация кислорода на границе раздела фаз электрод-электролит; δ – толщина электрода; d – внутренний диаметр ТОСП. Под действием приложенного напряжения через электролит за время Δt током переносится кислорода

$$A_3 = \frac{ME\Delta t}{nF} = \frac{ME\sigma_3\pi d}{bnF} \Delta x \Delta t \quad (5)$$

где σ_3 – эффективная удельная проводимость электролита, равная $K \cdot \sigma$; σ – удельная проводимость электролита; K – коэффициент, определяемый экспериментально и равный отношению эффективной поверхности рабочей зоны ТОСП к общей ее поверхности; b – толщина стенки ТОСП; E – действующее напряжение. Приравнявая (2) и (3), получим уравнение материального баланса:

$$\frac{\partial C_x}{\partial x} = -\frac{P\pi d}{Q\delta} (C_x - C_3) \quad (6)$$

На электродах перегородки из такого материала, разделяющий объемы с $C_1 > C_2$, существует электродвижущая сила (ЭДС) E :

$$E = \frac{RT}{4F} \cdot \ln \frac{C_1}{C_2} \quad (7)$$

(здесь R - универсальная газовая постоянная, F – число Фарадея, T -температура окружающей среды, C_1 - парциальное давление кислорода в окружающей атмосфере равное $0.21 \cdot 10^5$ Па, C_2 – искомое давление кислорода). Это явление используют в топливных элементах, термодинамических исследованиях, газовом анализе.

В установившемся режиме (расход газа через ТОСП постоянный и отсутствуют иные механизмы проводимости, кроме кислородноионной) зависимость между током переноса и концентрацией в соответствии с законом Фарадея выражается соотношением:

$$C = 0,7 \cdot 10^9 \frac{IM}{QnF} \quad (8)$$

где C -концентрация кислорода, ppm; I - ток, мка; Q - расход газа (при н.у.), см³/с; M -молекулярный вес кислорода; F - число Фарадея; n - число зарядов, необходимых для переноса одной молекулы кислорода. Напряжение питания должно быть достаточным лишь для практически полного переноса кислорода без превышения величины потенциала разложения электролита.

Все процессы, протекающие в ТОСП, разделяются на массоперенос кислорода из потока к поверхности электрода; адсорбцию на электроде; массоперенос через пористый электрод к границе раздела электрод – электролит и ионизацию атомов; перенос через электролит.

Надо учесть, что скорости процессов внешнего массообмена, адсорбции и ионизации атомов в условиях рабочей температуры ТОСП велики, примем, что основные кинетические затруднения обусловлены процессами диффузии кислорода через электрод и его переноса через электролит.

1. Курумчин Э.Х. и др., Изотопный обмен кислорода электролита с молекулярным кислородом. – Кинетика и катализ, 1976, т.17, №6, с.1519
2. Ишук В.П., и др.; Гетерообмен кислорода твердого окисного электролита в атмосфере CO-CO₂. – Кинетика и катализ, 1980, т.21, №3, с.74
3. Курумчин Э.Х. и др., Изотопный обмен кислорода твердого электролита с газообразным кислородом. – Кинетика и катализ, 1982, т.23, №4, с.1005
4. Рахымбеков А.Ж., Уразалиев У.И., Электролитическая очистка супериоником расплава полупроводника. Издательство «Проблемы науки», журнал Достижения науки и образования, №2, 02.02.2017г, Москва.
5. Рахымбеков А.Ж., Курманбаев А.А., Алмухамбетов С.С., Мухашева М.Б., Алимбекова К.Ж. Электрохимическое определение кислороде в расплаве. Издательство «Проблемы науки», журнал «Научные исследования», XIII Международная научно – практическая конференция «Научные исследования: ключевые проблемы III тысячелетия» №2(13), Стр.6-9, 2017г, Москва.

РАЗДЕЛ IV. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Глухова Е.В.

Анализ статистических данных с использованием платформы 1С

*Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.
(Россия, Саратов)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-12

idsp: 000001:lj-31-03-2018-12

Аннотация

В системе 1С: Предприятие 8 представлен механизм позволяющий проводить визуализацию и анализ данных одновременно, посредством механизма анализа данных и прогнозирования. В статье рассматривается использование данного механизма для анализа статистических данных по демографии в Саратовской области

Ключевые слова: 1С: Предприятие 8, механизм анализа данных, общая статистика, кластерный анализ.

Annotation

In the system 1С: enterprise 8 is a mechanism that enables the visualisation and analysis of forecast data simultaneously through a mechanism of data analysis and forecasting. This article describes the use of this mechanism for the analysis of statistical data on demography in the Saratov region

Key words: 1С: Enterprise 8, the mechanism of data analysis, statistics, cluster analysis

Повсеместное применение автоматизированных систем приводит к значительному росту накопленных статистических данных, поэтому все актуальней становится проблема представления и обработки этих данных. Например, анализ данных о обучающихся в автоматизированной системе [6]. Механизм анализа данных и прогнозирования позволяет реализовать в прикладных решениях различные средства для определения закономерностей, которые чаще всего можно обнаружить при исследовании больших объемов информации, которые были приведены в работах [3]. Исследование данной проблемы было нами рассмотрено на примере структуры здравоохранения Саратовской области.

На российском рынке наибольшее представление имеют разработки учетно-управленческих систем – в этих системах накоплены большие объемы данных, поэтому возникает потребность на применение средств аналитической обработки данных [4, 5], аналитические данные позволяют принять наиболее обоснованные решения в менеджменте. Именно поэтому одним из стратегических направлений развития системы платформы "1С:Предприятие" является постоянное расширение возможностей экономической и аналитической отчетности.

В системе 1С: Предприятие 8 представлен механизм позволяющий проводить визуализацию и анализ данных одновременно, посредством механизма анализа данных и прогнозирования [2].

Этот механизм аналитической обработки позволяет работать как с данными из информационной базы, так и с данными, которые были получены из другого источника, и были предварительно загружены в таблицу значений или табличный документ.

Если применить к исследуемым данным один из видов анализа, то в результате получим некую модель поведения данных и далее результат исследования отражается в итоговом документе или сохраняется во внешних файлах для последующего использования.

В механизме анализа данных и прогнозирования существует несколько видов анализа данных:

- общая статистика,
- поиск ассоциаций,
- поиск последовательностей,
- кластерный анализ,
- дерево решений.

Данные по демографии были представлены в виде таблиц. Для загрузки было необходимо привести таблицы к единому виду.

Данные разделены по районам, а также деление происходит по следующим показателям: всего, из всего - мужчин, из всего - женщин, группируем детей от 0 до 14 лет, группировка подростков от 15 до 17 лет, в том числе юноши, группировка взрослые 18 и старше, группировка дети до 17 л, включая подростки, женщины фертильного возраста, в том числе 15 лет, трудоспособный возраст, из них (мужчины/женщины), сельское население.

По результатам проведенной работы была составлена таблица, представленная на рисунке 1.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1	Население Саратовской области на 01.01.2002 г														
2	Название района	Всего	Из всего-мужчин	Из всего-женщины	Дети 0-14 лет	Подростки 15-17 лет	В том числе юноши	Взрослые 18 и старше	Дети до 17 лет (подростки)	Женщ. ферт. возр.	В т.ч. 15 лет	Трудоспособный возраст	Из них		Сельское насел.
3													муж.	жен.	
4															
5	АЛТАЙСКИЙ	17913	8690	9223	4790	1149	557	11974	5939	5199	243	10289	5268	5021	17913
6	АРКАЛАКСКИЙ	31347	14213	17134	5259	1467	755	24621	6726	8641	243	17175	8740	8435	17128
7	Б.КАРАБУЛАКСКИЙ	37107	17228	19879	6166	1973	1001	28968	8139	9371	320	21203	10969	10234	21259
8	БАЛТАЙСКИЙ	13722	6446	7276	2319	648	312	10755	2967	3180	123	7418	3931	3487	13722
9	ВОСКРЕСЕНСКИЙ	12733	5924	6809	2128	674	331	9931	2802	3148	122	7120	3700	3420	12733
10	ДЕРГАЧЕВСКИЙ	28150	13304	14846	5538	1636	731	20976	7174	7081	260	16305	8310	7995	17799
11	ДУХОВНИЦКИЙ	16938	7954	8984	2837	877	454	13224	3714	4211	151	9634	5011	4623	10210
12	ЕКАТЕРИНОВСКИЙ	22699	10650	12049	4093	1222	606	17384	5315	5641	194	12732	6515	6217	15607
13	ЕРШОВСКИЙ	53490	25420	28070	9762	2802	1424	40926	12564	13841	483	31021	16033	14988	28422
14	ИВАНТОВСКИЙ	16876	8090	8786	3233	1004	509	12639	4237	4214	167	9289	4817	4472	16876
15	КАЛИНИНСКИЙ	41225	19179	22046	7418	1999	997	31808	9417	10461	368	23408	11879	11529	21417
16	КРАСНОКУТСКИЙ	38397	18406	19991	6915	2112	1098	29370	9027	10089	336	22676	11770	10906	21441
17	КРАСНОПАРТИЗАНСКИЙ	17817	8466	9351	3273	948	485	13596	4221	4518	153	10244	5323	4921	10914
18	ЛЫСОГОРСКИЙ	21916	10223	11693	3901	1227	648	16788	5128	5443	205	12264	6293	5971	13911
19	НОВОБУРАСКИЙ	18980	8954	10026	3430	1096	576	14454	4526	4904	166	11030	5705	5325	12080
20	НОВОУЗЕНСКИЙ	35710	17012	18698	7923	2090	991	25697	10013	9552	401	20462	10355	10107	18054
21	ОЗИНКИНСКИЙ	26818	13148	13670	5848	1636	877	19334	7484	7085	280	15538	8124	7414	15900
22	ПЕРЕЛЮБОВСКИЙ	19425	9595	9830	4307	1090	556	14028	5397	5047	192	11216	5917	5299	19425
23	ПЕТРОВСКИЙ	49787	23001	26786	8086	2573	1361	39128	10659	13008	400	29084	14827	14257	16645
24	ПИТЕРСКИЙ	19801	9458	10343	4094	1170	602	14537	5264	4923	227	10920	5678	5242	19801
25	ПУГАЧЕВСКИЙ	66425	32730	33695	10684	3426	1696	52315	14110	17580	581	40421	21870	18551	23699
26	РОВЕНСКИЙ	19306	9414	9892	4035	1127	538	14144	5162	5111	190	11314	5884	5430	13461
27	РОМАНОВСКИЙ	19058	8733	10325	2991	892	410	15175	3883	4405	160	10092	5258	4834	11004
28	РТИЩЕВСКИЙ	63261	28552	34709	9801	2761	1418	50699	12562	16563	477	36761	18416	18343	20446
29	САМОИЛОВСКИЙ	26235	12215	14020	4667	1411	757	20157	6078	6204	224	14147	7339	6808	17734
30	САРАТОВСКИЙ	46061	21518	24543	7531	2407	1254	36123	9938	12312	553	27774	14105	13669	32947
31	СОВЕТСКИЙ	30003	14502	15501	5843	1688	913	22472	7531	7947	275	17753	9180	8573	10239
32	ТАТТИЩЕВСКИЙ-п.Светлый	41973	20137	21836	7322	2241	1148	32410	9563	11755	394	26003	13457	12546	21714
33	ТУРКОВСКИЙ	16738	7688	9050	2706	762	351	13270	3468	3966	147	8848	4612	4236	9544
34	ФЕДОРОВСКИЙ	23742	11302	12440	4728	1420	700	17594	6148	5804	266	13616	6934	6682	16326
35	АТКАРСКИЙ	45643	20753	24890	7674	2281	1138	35688	9955	12134	394	26286	13143	13143	18417
36	БАЛАКОВСКИЙ-район	228613	107404	121209	36779	11789	6191	180045	48568	65696	1898	143348	71901	71447	21815
37	БАЛАШОВ-район	127448	59718	67730	18410	5928	3045	103110	24338	33456	978	76863	40069	36794	30750
38	ВОЛЬСКИЙ-район-Шеняны	107299	50683	56616	17726	5428	2814	84145	23154	28466	857	63704	33161	30543	19148
39	КРАСНОАРМЯНСКИЙ	47168	22145	25023	8477	2753	1396	35938	11230	12987	446	28088	14328	13760	19776

Рисунок 1 – Файл загрузки данных по демографии

Был создан справочник районов, у которого реквизиты по умолчанию «Код» и «Наименование». При этом районы были забиты в базу в режиме пользователя в том же порядке, в котором они указаны в исходном excel-файле.

Внешний вид формы списка справочников «Районы» представлен на рисунке 2.

Рисунок 2 – Форма списка «Районы»

Для того, чтобы данные могли быть загружены в систему был создан документ «Статистика за год». В данных табличной части указан перечень районов и всех показателей из исходного xsel-файла.

В форме элемента «Статистика за год» есть возможность подгрузки данных из xsel-файлов.

Общий вид формы элемента «Статистика за год» с уже загруженными данными из файла представлен на рисунке 3.

N	Район	Всего	Из всего - мужчин	Из всего - женщ...	Дети	Подростки (15-1...	В том числе юн...	Взрослые
1	Ал.гайский	17 913	8 690	9 223	4 790	1 149	557	11
2	Аркадакский	31 347	14 213	17 134	5 259	1 467	725	24
3	Б.Карабулакский	37 107	17 228	19 879	6 166	1 973	1 001	28
4	Балтайский	13 722	6 446	7 276	2 319	648	312	10
5	Воскресенский	12 733	5 924	6 809	2 128	674	331	9
6	Дергачевский	28 150	13 304	14 846	5 538	1 636	731	20
7	Духовницкий	16 938	7 954	8 984	2 837	877	454	13
8	Екатериновский	22 699	10 650	12 049	4 093	1 222	606	17
9	Ершовский	53 490	25 420	28 070	9 762	2 802	1 424	40
10	Ивантеевский	16 876	8 090	8 786	3 233	1 004	509	12
11	Капнинский	41 225	19 179	22 046	7 418	1 999	997	31
12	Краснокутский	38 397	18 406	19 991	6 915	2 112	1 098	25

Рисунок 3 – Форма элемента «Статистика за год»

Еще одним разделом системы является «Отчет по демографии». Данный отчет позволяет наглядно представить данные по демографии за несколько лет. При этом можно сформировать как общий отчет по всем районам Саратовской области, так и по отдельному выбранному району.

Пример уже сформированного отчета по демографии представлен на рисунке 4.

Период	Район	Всего	Из всего - мужчин	Из всего - женщин	Дети	Подростки (15-17 лет)	В том числе юноши	Взрослые	Дети до 17 лет	Женщины ферт. возраста	В том числе 15 лет	Трудоспособного возраста	Трудоспс мужчины
2004 г.	Аткарск	45 569	20 921	24 648	7 200	2 668	1 353	35 701	9 868	11 734	397	26 792	
2006 г.	Аткарск	44 972	20 637	24 335	6 543	2 253	1 170	36 176	8 796	11 676	356	26 767	
2007 г.	Аткарск	44 755	20 336	24 419	6 413	2 086	1 095	36 256	8 499	11 712	300	26 853	
2008 г.	Аткарск	44 447	20 211	24 236	6 300	1 869	943	36 278	8 169	11 621	272	26 675	

Рисунок 4 – Форма «Отчет по демографии»

Самым основным и обширным разделом разработанной системы является подсистема анализа данных. Он представлен документом «Анализ данных».

Форма списка подсистемы «Анализ данных» представлен на рисунке 4.

Дата	Номер	Всего	Из всего - мужчин	Из всего - женщин	Дети	Подростки (15-17 лет)	В том числе юноши	Взрослые	Дети до 17 лет
06.12.2016 15:44:33	000000001	✓	✓	✓	✓				
07.12.2016 11:25:42	000000002	✓	✓	✓					
07.12.2016 11:34:49	000000003	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
07.12.2016 11:36:14	000000004	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓

Рисунок 4 – Форма списка документа «Анализ данных»

В данной форме списка галочками отмечены только те параметры, по которым проводится анализ данных.

Форма элемента документа «Анализ данных» представлена на рисунке 5.

N	Район	Активность
1	МЗ РФ (млн)	✓
2	Ал.гайский	✓
3	Аркадакский	✓
4	Аткарск	✓
5	Б.Карабулакский	✓

Рисунок 5 – Форма элемента документа «Анализ данных»

Как видно из рисунка, для формирования документа необходимым условием является выбор периода и района.

Цифрой 1 обозначена область выбора параметров для проведения общей описательной статистики. Цифрой 2, в свою очередь, обозначена область выбора параметров, необходимых для кластеризации.

Над табличной частью находится кнопка «Заполнить таблицу районов», которая позволяет быстро заполнить таблицу данными из справочника «Районы». По умолчанию все районы являются выбранными.

Представим фрагменты расчетов нашего приложения отчеты Рисунок 6 «Общая статистика» и Рисунок 7 «Кластерный анализ»

Рисунок 6 – Фрагмент отчета «Общая статистика»

Рисунок 7 – Фрагмент отчета «Кластерный анализ»

По результатам проведения анализа статистических данных построили отчеты с графиками и диаграммами, которые являются основными средствами визуализации статистических данных.

1. Анализ данных и прогнозирование, механизм [Электронный ресурс]: URL: http://v8.1c.ru/overview/Term_0000000271.htm (Дата обращения: 15.03.18)

2. Морозова Е.А. Демографическая ситуация и ее влияние на социально-экономическое развитие региона / Е.А. Морозова, А.Н. Челомбитко, Л.М.Андреева. Вестник Кемеровского государственного университета, - 2012. 219 с.
3. Плотникова В.В. Концептуальные подходы к анализу эффективности деятельности холдинговых структур ОАО "ИТКОР", М.: 2012.
4. Струбагин П.В. Учет и анализ движения и использования программных продуктов Автореф. дис. канд. экон. наук. – Саратов, 2003. – 18 с.
5. Струбагин П.В. Учет и анализ движения и использования программных продуктов дис. канд. Экон., наук. – М.: 2002. – . – Саратов, 2003. 80-85 с.
6. Струбагин П.В., Фролова Н.Б. Информационные технологии, обеспечивающие работу и безопасность систем электронного дистанционного обучения Информационная безопасность регионов. 2015. № 4 (21). С. 12-18.

Егоров. А.Н., Кузнецов В.А.

Параллельный подход к решению задачи оптимизации оперативного управления транспортным конвейером шлюзованной системы

*Государственный университет морского и речного флота
имени адмирала С.О. Макарова
(Россия, Санкт-Петербург)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-13

idsp: 000001:lj-31-03-2018-13

Аннотация

В статье рассматривается задача оптимизации оперативного управления транспортным конвейером шлюзованного судоходного канала. Предлагается параллельный алгоритм её решения.

Ключевые слова: оптимизация оперативного управления, метод ветвей и границ, параллельные алгоритмы.

В статье [1] рассматриваются вопросы оптимизации оперативного управления транспортным конвейером шлюзованного судоходного канала (ШСК). Обосновывается возможность реализации автоматизированной диспетчеризации судопропуска на основе взаимодействия имитационной модели и алгоритма управления в реальном масштабе времени, конечной целью которой является расписание проводки судов. До настоящего времени подобных систем, работающих в рамках шлюзованного судоходного канала в целом, не создано. Делается вывод, что для этого необходимо использовать системы, обеспечивающие автоматический обмен информацией между судами и береговыми службами, а также параллельные алгоритмы обработки данных.

Дадим обобщённое описание задачи оптимизации оперативного управления транспортным ШСК, формализация которой представлена в [2].

Пусть задан период планирования $[t_0, t_0+T]$, где t_0 – начало периода планирования, а T – горизонт планирования. Пусть N – количество объектов ШСК, выполняющих обслуживание судов при прохождении канала, а M – количество судов находящихся на ШСК в период планирования. Тогда расписанием R функционирования ШСК на период планирования $[t_0, t_0+T]$ назовём таблицу размерности $M \times N$, в которой каждый элемент (i, j) – совокупность $(\tau_{ij}^H, \tau_{ij}^K)$, где, τ_{ij}^H – время начала, а τ_{ij}^K – время окончания выполнения технологической операции на объекте j над i -й группой судов.

Требуется на период планирования $[t_0, t_0+T]$ сформировать такое расписание R , которое обеспечивает наилучшее значение выбранного критерия оптимизации и удовлетворят множеству естественных и технологических ограничений.

Для решения задачи в [2] предлагается алгоритм основанный на методе ветвей и границ, принцип работы которого заключается в имитации работы системы в период планирования $[t_0, t_0+T]$, построении дерева всех возможных вариантов управления на

заданном интервале и выборе наилучшего управляющего воздействия по заданным критериям. Для этого используется имитационно-управляющая система (ИУС) ШСК, которая содержит в своем составе имитационную модель функционирования ШСК, осуществляющую генерацию допустимых вариантов управления и имитационное моделирование поведения системы при принятии этих вариантов.

Для сокращения числа перебираемых вариантов используется метод «отсечения» неперспективных решений, приводящих к недопустимой ситуации в системе, или не обеспечивающих заданный уровень устойчивости. Следует отметить, что «отсечение» недопустимых ситуаций выполняет имитационная модель.

Формирование дерева вариантов управления является многошаговым рекурсивным процессом. Каждый узел дерева рассматривается как некоторое состояние системы S в момент времени t . Генерация дерева начинается с его корня, который представляет собой начальное состояние системы в момент $t = t_0$. При продвижении по дереву для каждого узла выполняются следующие действия:

1. Имитация работы системы из исходного состояния S до состояния S' момента времени $t' > t$ при котором необходимо принять управляющее решение.

2. Оценка устойчивости расписания для состояния S' , если значение не удовлетворяет требуемому уровню то данная ветвь в дальнейшем не рассматривается и происходит возврат к последней точки ветвления.

3. Для состояния S' строится множество возможных вариантов управления $\{U_i\} = \{U_1, U_2, \dots, U_N\}$, если вариантов больше 1 то на дереве образуется точка ветвления.

4. Далее рассматривается только один вариант управления, который применяется в текущему состоянию S' , после чего алгоритм выполняется заново для состояния $S'(U_i)$ в момент времени t' . Остальные варианты управления запоминаются до возвращения алгоритма к этой точке ветвления.

5. При достижении конца периода планирования $t' \geq t_0 + T$, выполняется оценка критерия оптимизации сформированного управляющего воздействия, которое представляет собой совокупность решений принятых при продвижении от начального состояния системы в момент t_0 до текущего состояние S' момента t' . Если оно лучше текущего оптимального управления, то становится им. При этом сохраняется и достигнутое состояние S' . После чего алгоритм возвращается к предыдущей точки ветвления, где рассматривается следующее по очереди управляющее воздействия данной точки. При отсутствии нерассмотренных альтернатив в данной точки алгоритм переходит к более ранней точке ветвления и т.д. до достижения корневого узла.

После проверки всех возможных вариантов управления из сохранённого состояния S' формируется расписание R , которое является оптимальным на заданном периоде планирования.

Основной задачей при переходе от последовательного алгоритма к параллельному является разбиение исходной задачи на независимые подзадач.

Формально дерево вариантов управления представляет собой конечное множество L , состоящей из одного или более узлов, таких что имеется один специально обозначенный узел, называемый корнем дерева, а остальные узлы, исключая корень, содержатся в $m \geq 1$ попарно непересекающихся множеств $L_1, L_2, \dots, L_m$, каждое из которых, является деревом. Следовательно, в качестве подзадачи можно рассматривать поиск оптимального управления в одном из попарно не пересекающихся множеств – поддеревьев.

Согласно закону Амдаля – время выполнения параллельного алгоритма не может быть меньше выполнения самого длинного его фрагмента, т.е. для достижения максимальной эффективности при распараллеливании необходимо сформировать подзадачи так, чтобы для каждого потока время вычисления было примерно одинаково.

Время проверки дерева вариантов определяется количеством узлов в нём. Пусть G это среднее количество ветвлений для каждого узла дерева, тогда максимальное количество узлов в дереве определяется как $\sum Gd$, где $d = 0 \dots D$ – уровень глубины дерева, а D – количество уровней глубина дерева. Следовательно, для того чтобы два поддерева из одного дерева имели равное количество узлов, необходимо, чтобы их корни располагались на одном уровне глубины.

Согласно описанному алгоритму работы ИУС ШСК после обработки одного узла дерева вариантов управлений на следующем этапе рассматривается узел располагающийся на следующем уровне глубины дерева. В результате такого продвижения, конечные узлы дерева располагаются на различных уровнях глубины. Назовём такой характер перемещения по дереву вертикальным (рис. 1,а). При горизонтальном движении (рис. 1,б) выполняется последовательное прохождение каждого узла текущего уровня глубины, после чего осуществляется переход на следующий уровень, при этом в любой момент времени все конечные узлы дерева располагаются на одном или соседних уровнях глубины.

Алгоритм работы ИУС ШСК в режиме горизонтального прохождения узлов отличается от вертикального лишь тем, что после формирования множества возможных вариантов управления $\{U_i\}$ для состояния S' , варианты не рассматриваются сразу, а сохраняются на следующем уровне дерева управления для дальнейшей обработки. Затем алгоритм переходит к следующему узлу, находящемуся на том же уровне глубины или первому узлу следующего уровня. При этом движение к предыдущей точки ветвления не осуществляется, т.к. все не рассмотренные варианты управления могут находиться только на следующих узлах. Учитывая, что все основные этапы работы алгоритма сохранены то скорость работы ИУС ШСК при вертикальном и горизонтальном характере движения в общем случае можно считать равной.

Рис. 1. Структура дерева после обработки трёх узлов при различном характере движении по дереву: а) – вертикальный; б) – горизонтальный

Проверка управляющего воздействия осуществляется при достижении конца планирования на некотором уровне d . При увеличении уровня глубины дерева количество его узлов увеличивается для вертикального характера движения линейно $G \cdot d$, а для горизонтального экспоненциально G^d . Из чего следует, что алгоритм работы ИУС ШСК в режиме вертикального прохождения узлов, при прочих равных условиях, расходует значительно меньше памяти, по сравнению с горизонтальным.

После сравнения эффективности алгоритмов можно сделать вывод, что для формирования подзадач, при параллельной обработке, необходимо использовать алгоритм работы ИУС ШСК в режиме горизонтального прохождения узлов, а для поиска оптимума в каждой из подзадач на отдельном потоке более предпочтительным является вертикальный режим работы ИУС.

Пусть многопоточная система имеет K параллельно работающих потоков, тогда алгоритм параллельной работы ИУС ШСК можно описать следующим образом.

Этап 1. Выполнение алгоритма работа ИУС в режиме горизонтального прохождения узлов до тех пор, пока количество конечных узлов дерева вариантов управления не будет максимально близким к числу K , но не превысит его.

Этап 2. Каждый конечный узел, сформированного дерева, отправляется на отдельный поток для дальнейшей обработки.

Этап 3. На каждом потоке выполняется поиск оптимума для поддеревя вариантов управления переданной подзадачи. Для этого используется алгоритм работы ИУС в режиме вертикального прохождения узлов.

Этап 4. После завершения расчётов каждый поток возвращает оптимум соответствующей подзадачи из совокупности, которых выбирается наиболее оптимальный вариант.

При распараллеливании последовательного алгоритма работы ИУС ШСК размерность задачи, обрабатываемой на одном из множества параллельно работающих потоков, была снижена не менее чем в K раз, что, если не учитывать временные затраты на синхронизацию потоков, обеспечивает прирост производительности в порядка K раз по сравнению с последовательной реализацией.

1. Егоров А.Н., Кузнецов В.А. Распараллеливание вычислений для автоматизированной диспетчеризации судопропуска шлюзованной системы // Вестник Государственного университета морского и речного флота имени адмирала С. О. Макарова. — 2016. — № 2 (36). — С. 214–224.
2. Бутов А.С., Гаскаров Д.В., Егоров А.Н., Крупенина А.Н. / под общ. ред. проф. Бутова А.С. — СПб.: Судостроение, 2001. — 552 с.

Иванов Е. Д., Гриценко Е.М.

Разработка мобильного приложения для проведения опросов в сервисных центрах

(Россия, Красноярск)

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-14

idsp: 000001:lj-31-03-2018-14

Аннотация

В статье описаны этапы разработки мобильного приложения на платформе Android и технические характеристики системы.

Ключевые слова: мобильное приложение, программное обеспечение, система, сервер, платформа, качество услуг.

За прошедшие два десятилетия мобильные технологии изменили мир и оказали влияние на информационное общество, улучшив производство, хранение и обработку информации. Владелец мобильного устройства способен воспользоваться услугами банка, заказом такси или доставки еды, электронной почтой, личным кабинетом и др. С каждым годом появляются новые модели, улучшаются стандарты обмена данными и версии мобильных операционных систем. Лидеры мобильного рынка, к которым относятся Samsung и Apple, производят смартфоны, планшеты и smart-часы, оснащенные производительными аппаратными характеристиками и современными операционными системами, ОС Android и iOS соответственно. На рисунке 1 приведена статистика популярности.

Преимущество мобильных приложений – в их использовании на личном устройстве пользователей. Пользуясь мобильными приложениями, потребители заинтересованы в использовании услуг компаний, совершении покупок, а также в

получении информации о новостях, товарах и услугах, о специальных предложениях и состоянии лицевого счета.

Рисунок 1 - Статистика популярности мобильных операционных систем в мире за осень 2016

Другим не менее важным преимуществом является использование приложений для удовлетворения потребностей бизнеса. Программным обеспечением могут быть как публичные приложения, нацеленные на широкую аудиторию, так и внутренние: корпоративные сервисы и порталы. Именно поэтому компании «ДНС», которая занимается продажей и ремонтом цифровой техники, потребовался инструмент для выявления показателей качества обслуживания в сервисных центрах. Для идентификации проекта следует выделить цели и ожидаемые результаты в рамках текущей предметной области:

Цели проекта:

- 1) Оценка качества обслуживания в сервисных центрах;
- 2) Мотивация персонала вести себя корректно по отношению к клиентам;
- 3) Маркетинговый инструмент «Нам важно ваше мнение»;
- 4) Изучение ожиданий и предпочтений клиентов (маркетинговые исследования).

Результаты:

- 1) Мобильное и веб-приложение, позволяющие проводить опросы и выводить результаты в административную панель. Электронная книга жалоб и предложений;
- 2) Опросы, на основе которых менеджеры могут отчитываться о качестве предоставляемых услуг;
- 3) Детальная картина о каждом из сервисных центров крупной сети компании;
- 4) Персонал мотивирован лучше работать и не нарушать устав компании;
- 5) Клиенты могут выражать свое видение со стороны при помощи оценок;
- 6) Изменение экономических показателей компании;
- 7) Масштабируемость на других городах или сервисных центрах

Представителями компании были выдвинуты требования, представленные таблице «1».

Таблица 1

Этапы разработки проекта

Этап	Краткое описание
Проектирование серверной части	Принимает запросы от мобильного приложения и хранит в базе данных. Регистрирует сервисные центры.
Разработка мобильного приложения для планшетов - диагональ 10 дюймов	Интерфейс, построенный на последовательности опросов. Предусмотреть регистрацию приемного пункта СЦ в базе. Размещается на приемных пунктах.

Разработка серверной части и организация серверной логики	Облачный сервис Firebase - для аналитики, платформа Node.js для взаимодействия с базой и построения отчетов
---	---

Таким образом, для работы над проектом была выбрана платформа Android, которая поддерживается корпорацией Google и предоставляет бесплатный инструмент Android Studio для создания мобильных приложений.

Заказчиком был выдвинуто требования разработать проект за 3 месяца, было составлено ТЗ. Переговоры велись через Мессенджер Telegram, обсуждались промежуточные этапы и текущие проблемы в разработке. Для отражения процесса работы была создана страница в сервисе Trello, чтобы заинтересованная сторона могла оставлять свои пожелания и видеть процесс завершенности каждого из этапов или задач, в виде стикеров на виртуальной доске. Приложение связано с отдельно созданным сервером, на котором регистрируются результаты опросов, запросы передаются через библиотеку Retrofit 2. Каждый планшет размещается на стойке приемного пункта. Схема проекта приведена на рисунке 2.

Рисунок 2 - Схема последовательности опросов в приложении

Таким образом, была разработана система проведения опросов в сервисных центрах «ДНС». В рамках текущей статьи рассмотрен опыт разработки мобильного приложения (клиентской части). География проекта на январь 2018 года - Абакан, Красноярск, Ачинск, Норильск, Канск и Улан-Удэ, что демонстрирует её масштабируемость. С течением времени она стала показывать, как изменяются показатели качества, а также на что следует обратить внимание, чтобы в будущем улучшить предоставление услуг. Получен опыт взаимодействия с заказчиком, поддержки приложения и использования современных технологий: языков программирования Java, Node.js; базы данных MySQL и MongoDB, а также использования виртуального сервера VDS на операционной системе Ubuntu.

1. Аквино, К. Front-end. Клиентская разработка для профессионалов. Node.js, ES6, REST [Текст] / К. Аквино, Т. Ганди – СПб. : Питер, 2017. – 512с.
2. Бен-ган, И. Microsoft SQL Server 2012. Основы T-SQL [Текст] : пер. с англ. М.А. Райтмана / И. Бен-ган – М. : Эксмо, 2013. – 400с.
3. Бэйнкл, К. MongoDB в действии [Текст] / Пер. с англ. Слинкина А.А. – М. : ДМК Пресс, 2012. – 394с.: ил.
4. Васильев, А. Программирование на Java для начинающих [Текст] / А. Васильев – М. : Эксмо, 2017. – 704с.

5. Гриценко Е. М. Использование современных BACK-END технологий разработки клиент-серверных приложений [Текст] / Е. М. Гриценко, Е. Д. Иванов, П. С. Шаталов // Научные исследования: теория, методика и практика : материалы IV Междунар. науч.-практ. конф. (Чебоксары, 29 янв. 2018 г.) / редкол.: О. Н. Широков [и др.]. — Чебоксары: ЦНС «Интерактив плюс», 2018.

Мельниченко В.Н.

Риски и отрицательные эффекты внедрения корпоративной системы управления проектами

*Российский университет транспорта (РУТ (МИИТ))
(Россия, Москва)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-15

idsp: 000001:lj-31-03-2018-15

Аннотация

В данной статье рассмотрены основные проблемы внедрения корпоративной системы управления проектами (КСУП), а так же риски и отрицательные эффекты.

Ключевые слова: управление проектами, КСУП, риски КСУП.

Abstract

In this article, we will review the main problems of implementing a corporate project management system, as well as risks and negative effects.

Keywords: project management, project management system.

Корпоративная система управления проектами при правильном подходе внедрения на предприятиях, зарекомендовала себя с лучшей стороны, но как любое нововведение она несет в себе различные риски.

Корпоративная система управления проектами (КСУП) – комплекс организационных, методических и информационных средств, поддерживающих процессы управления проектами в организации.

Внедрение КСУП далеко не всегда влечёт за собой положительные эффекты, чаще всего её пытаются внедрить на предприятиях которые не готовы к данной операции, в результате чего затраты превышают прибыль от улучшения процессов.

Есть разные способы, как вводить корпоративную систему управления проектами на предприятии, основных два, а именно:

Первым способом является внедрение КСУП своими силами, то есть руководство привлекает к процессу штатного сотрудника, в этом случае риск заключается в том, что данный сотрудник может быть неопытен в вопросе внедрения и не понимать, зачем это делается, в таком случае данный процесс не принесёт никакого результата. Так как ошибки, допущенные при внедрении, только усложнят процесс управления проектами и увеличат расходы.

Второй способ это привлечение консалтинговой компании, которая непосредственно занимается внедрением, но это тоже большой риск, по причине, что данные компании очень быстро разрабатывают методологию КСУП и так же быстро её внедряют, после чего оставляют заказчика без какой либо поддержки. Результатом является то, что данная система просто разваливается, и не даёт никакого эффекта, в чём и заинтересованы консалтинговые компании[3].

Одной из главных ошибок является непонимание, что такое КСУП. Чаще всего её видят как информационную систему управления проектами (ИСУП) и пытаются внедрить её, но это в корне не верно, так как основой корпоративной системы управления проектами является методология и проектный офис. ИСУП является вспомогательным элементом, который помогает сформировать портфель проектов, реализовывать их и улучшать методологию, а без чёткой методологии и отдела который занимается данной

деятельностью, информационная система управления проектами не несёт в себе никакого положительного эффекта, а только затраты на её внедрение.

Также немаловажным риском является непонимание директором фирмы или её менеджером для чего необходима КСУП, вследствие чего, происходит неправильное формирование задач внедрения, и оценки ожидаемого эффекта. В результате появляются неадекватные ожидания участников внедрения и снижение их мотивации на успешный ввод в эксплуатацию КСУП, что приводит к снижению эффективности её работы или же отказу от неё вовсе.

Самой главной проблемой является неготовность самого предприятия, в целом, к внедрению данной системы и складывается это из множества факторов. Например, сама структура предприятия, которая не подготовлена к такому процессу или же не компетенция персонала компании. Также можно рассматривать проблему не компетенции руководства компании или недостаток мотивации сотрудников.

Все эти проблемы ведут к неправильному внедрению КСУП в производство и эффекты, которые планирует получать компания от её использования, стремятся к нулю. Чаще всего они ведут к крупным финансовым потерям компании, а так же качества проектов и кадровых потерь.

Несмотря на высокие риски внедрения, при правильном подходе и анализе проблемы, эффективность внедрения КСУП говорит сама за себя, а именно, что 94% опрошенных отмечали - увеличение стоимости их организации, 50% - улучшения исполнения проектов, 36% - увеличения удовлетворения заказчиков, 54% - улучшение финансового исполнения, 30% - общее повышение удовлетворения штатных работников[4].

1. Разработка функциональной модели информационной системы автоматизации управления деятельностью компании / Медникова О.В., Смирнов С.А., Строев П.С., // eLibrary – научная электронная библиотека [Электронный ресурс] <https://elibrary.ru/item.asp?id=29244398>
2. Богданов, В. В. Управление проектами. Корпоративная система - шаг за шагом. - М.: Манн, Иванов и Фербер, 2012. - 248 с.
3. Попова М.И. Необходимо ли внедрять КСУП на предприятии. - Электронный научно-практический журнал «Современные научные исследования и инновации» [Электронный ресурс] <http://web.snauka.ru/issues/2016/03/65337>
4. Корпоративная система управления проектами (КСУП) [Электронный ресурс] / <http://mahamba.com/ru/korporativnaya-sistema-upravleniya-proektami-ksup>

Панченко А.О.

Анализ и исследование существующих протоколов Интернета вещей

*Дальневосточный федеральный университет
(Россия, Владивосток)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-16

idsp: 000001:lj-31-03-2018-16

Аннотация

В статье приведен краткий обзор протоколов прикладного уровня, наиболее подходящих и часто используемых в концепции интернета вещей (IoT). Рассмотрены их основные достоинства и недостатки, проведен сравнительный анализ по наиболее информативным критериям оценки эффективности сети.

Ключевые слова: Интернет вещей, IoT, протокол, M2M.

В последнее время концепция «Интернет вещей» совершила значительный скачок в развитии, так как в современном мире происходит стремление к созданию полностью автоматизированных систем связи, сбора, обработки и анализа информационных данных.

При разработке систем связи, способных решать задачи IoT необходимо учитывать специфику данной концепции. Важным, информативным показателем при анализе протоколов прикладного уровня можно считать контроль качества сервиса QoS (Quality of Service), который позволяет характеризовать гибкость доставки данных [1]. Также, можно отнести адресацию устройств в сети — способность поиска устройств в огромной базе IoT. Следующим, немаловажным показателем системы является ее энергетическая эффективность, повышение которой приводит к увеличению автономности сети. Так как все протоколы разрабатываются для решения определенного круга задач, то каждый из них имеет свои ключевые особенности, свои способы взаимодействия устройств, которые также необходимо взять во внимание.

Для решения задач, остро поставленных на данный момент в концепции IoT, было как разработано, так и адаптировано немало протоколов, каждый из которых заметно отличается друг от друга: MQTT (Message Queue Telemetry Transport), CoAP (Constrained Application Protocol), AMQP (Advanced Message Queuing Protocol), XMPP (Extensible Messaging and Presence Protocol), DDS (Data Distribution Service) и т.д [3].

Имея сложный показатель QoS, можно создать гибкую, масштабируемую систему. Так MQTT и DDS за счет наличия нескольких уровней качества сервиса способны обеспечить гибкую и масштабируемую систему. Большинство протоколов работают поверх TCP (Transmission Control Protocol), что позволяет простейшим способом обеспечить надежность доставки данных [2]. UDP (User Datagram Protocol) используется лишь в CoAP и DDS. Это значительно снижает объем служебной информации сообщений, а надежность передачи данных достигается уже за счет программных решений. Так, например, в CoAP используется три типа сообщений, которые позволяют создать гибкую надежную систему с возможностью синхронизации устройств [4]. При необходимости, возможно создать систему с надежной доставкой данных получателю. Также DDS способен обеспечить синхронизацию, надежность и контроль присутствия устройств.

Сравнивая возможность поиска устройств в сети, стоит отметить XMPP за счет его удобной системы адресации, которая позволяет быстро выполнять обработку больших массивов данных. MQTT в данном случае имеет преимущество за счет типа связи устройств с сервером. Если есть возможность подключиться к брокеру, можно получить доступ сразу ко всем его устройствам. AMQP за счет передачи данных очередями объединяет устройства через потоки сообщений. DDS не имеет преимуществ в механизме адресации устройств [3].

В вопросе энергетической эффективности стоит учитывать избыточность передаваемой информации. Использование протокола TCP на транспортном уровне влечет дополнительные накладные расходы на установление соединения и подтверждение доставки данных. Так CoAP, будучи бинарным и используя UDP, является одним из самых энергоэффективных протоколов из вышеперечисленных. Протокол MQTT является бинарным и способен обеспечить хорошие энергетические показатели системы за счет своей структуры, несмотря на использование TCP. Взаимодействие в данном случае происходит по шаблону “издатель-подписчик”, это повышает эффективность системы, так как устройства работают только по необходимости, а все остальное время находятся в режиме ожидания с минимальным потреблением энергии [2]. Протоколы MQTT и CoAP не требуют постоянного соединения для работы устройств и хорошо адаптированы для маломощных устройств Интернета вещей [4]. AMQP и XMPP используют TCP и не адаптированы для достижения высокой энергетической эффективности. DDS соединяет устройства друг с другом децентрализованно с малой задержкой. Подразумевается, что устройства будут иметь высокую производительность с большим потреблением энергии, поэтому о хороших энергетических показателях речь в данном случае не идет.

В заключение надо отметить, что основные особенности каждого протокола заложены в область их применения. Так передача данных между различными узлами сети значительно отличается друг от друга. Но все же, основная задача IoT — обеспечение коммуникации между мобильными, автономными устройствами, поэтому одним из важнейших показателей системы является энергетическая эффективность. Которая достигается с использованием протоколов CoAP и MQTT, наиболее адаптированных под взаимодействие маломощных узлов.

1. Росляков А.В. Интернет вещей: учебное пособие [текст] / А.В. Росляков, С.В. Ванияшин, А.Ю. Гребешков. – Самара: ПГУТИ, 2015. – 200 с.
2. Фам В. Д., Юльчиева Л. О., Киричек Р. В. Исследование протоколов взаимодействия интернета вещей на базе лабораторного стенда // Информационные технологии и телекоммуникации. 2016. Том 4. № 1. С. 55-67.
3. Гойхман В., Савельева А. Аналитический обзор протоколов Интернета вещей. // Технологии и средства связи. - 2016. № 4. С. 32-37.
4. Гойхман В., Абраменкова Д. Протокол Интернета вещей CoAP [Текст] // Технологии и средства связи. - 2017. - № 4. - С. 20-24.

Тимофеева Н.В., Тропников А.С.

Оптимизация деятельности по поддержке работы пользователей в сети предприятия

*Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова,
Институт судостроения и морской арктической техники
(Россия, Северодвинск)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-17

idsp: 000001:lj-31-03-2018-17

Аннотация

Статья посвящена вопросу оптимизации деятельности работ IT-специалистов, занимающихся обслуживанием пользователей, с помощью внедрения ITSM-систем. В работе рассмотрено прототип проектного решения организационных проблем, возникающих в ходе работ.

Ключевые слова: оптимизация, пользователь, ITSM-система, IT-поддержка, Service Desk, Help Desk.

Поддержание работоспособности компьютеров на рабочих местах, оперативное решение возникающих проблем у пользователей и мониторинг оборудования на предприятии – это основные требования, что предъявляет работодатель к сотрудникам технической поддержки.

«Поддержка пользователей» - одна из самых типовых задач, выполняемых различными техническими специалистами. В малых компаниях, не насчитывающих и трех десятков автоматизированных рабочих мест (АРМ), данной работой может заниматься штатный инженер, устраняющий неполадки в меру своих сил.

Более крупные компании могут нанимать аутсорсинговые фирмы, предоставляющие услуги поддержки пользователям и специализирующиеся на оказании квалифицированных IT-услуг.

Предприятия же, насчитывающие уже сотни или даже тысячи АРМ, могут создавать свои собственные подразделения, входящие в структуру компании – Службы технической поддержки. Данные подразделения не только занимаются непосредственной поддержкой пользователей, но также создают для выполнения своей основной задачи различные Автоматизированные Информационные Системы, позволяющие обрабатывать огромный поток заявок от сотрудников компании.

Как в крупных, так и в малых компаниях, принцип работы специалиста технической поддержки не отличается: сотрудники фирмы, столкнувшиеся с некоторой проблемой, оставляют заявку, которая обрабатывается ИТ-специалистом, после чего данный специалист предпринимает ряд действий, направленных на устранение проблемы.

Но для оказания максимально эффективной помощи, способной свести к минимуму время простоя сотрудника компании, специалисты технической поддержки продельывают ряд подготовительных работ, включающих: изучение и модернизация бизнес-процессов предприятия, создание многоуровневой системы поддержки пользователей и внедрение ITSM-системы.

Даже при обслуживании малого количества пользователей одним штатным ИТ-специалистом, рано или поздно наступает момент, когда количество поступающих заявок от пользователей превышает скорость обработки данных заявок сотрудников технической поддержки. Технический специалист, не занимающийся структуризацией и автоматизацией обработки поступающих заявок, начинает терять свою эффективность. Он может не отслеживать приоритетные заявки, заниматься устранением минорных проблем вместо тех, что являются непосредственной причиной простоя работников предприятия.

Для решения данных проблем, необходимо оптимизировать деятельность ИТ-специалиста по поддержке пользователей.

Первым этапом при оптимизации деятельности сотрудника технической поддержки является изучение бизнес-процессов компании. Изучение бизнес-процессов и поиск в них узких мест позволяет определить наиболее вероятные места в работе ИТ-специалиста, при которых возможно появление организационных проблем.

Наиболее вероятными проблемами могут оказаться: наличие «лишних» сотрудников, требующихся для передачи заявок от непосредственно автора заявки и тем самым затягивающих процесс получения заявки самим ИТ-специалистом; неправильный порядок действий сотрудника технической поддержки, который каждый раз вынужден находится непосредственно рядом с АМР, даже когда проблема может быть решена удаленно.

После детального изучения действующих бизнес-процессов предприятия, необходимо приступить к внедрению ITSM-системы. ITSM-системы («IT Service Management», «управление ИТ-услугами») позволяют даже небольшому отделу технической поддержки обрабатывать и отслеживать постоянный поток заявок.

Одной из главных составляющих ITSM является формализация процессов ИТ-отдела. Для каждого процесса определяется последовательность выполнения работ, необходимые ресурсы и затраты времени, средства автоматизации и контроля качества. Когда процесс определен можно измерить его производительность, а также соотношение качество/стоимость.

Большое количество продуктов на рынке ITSM-систем позволяет выбрать узкоспециализированный подход при оптимизации деятельности ИТ-отдела. Одни программы позволяют организовать деятельность отдела технической поддержки не как вспомогательного подразделения, а как полноправного участника предприятия, который предоставляет непосредственные услуги другим подразделениям или даже другим компаниям.

Реализация ITSM также включает в себя формализацию регламента работы сотрудников, определение зон ответственности и полномочий персонала, критерии качества работы и формирование механизмов контроля и мониторинга состояния процессов, что помогает повысить информационную безопасность.

Следующим шагом в оптимизации работ будет создание различных подразделений, порядок работ которых показан на рисунке 1. Как правило, сначала организовывается подразделение, ответственное за первичную обработку заявок и непосредственную работу с пользователями – Service Desk.

Рисунок 1 – Порядок работ службы технической поддержки

Сотрудники данного подразделения обрабатывают поступающие заявки в ITSM-систему, поддерживают связь с обратившимися пользователями, фиксируют различную полученную информацию.

Кроме того, сотрудники Service Desk-подразделения занимаются первичным анализом проблемы. При получении заявки, специалисты просматривают базу типовых решений в ITSM-системе и выясняют, сталкивались ли ранее сотрудники с подобной проблемой и существует ли уже готовое решение.

При обнаружении уже существующего типового решения, сотрудник Service Desk-подразделения пытается решить возникшую проблему удаленно, либо дают детальные указания пользователю, находящемуся за АРМ.

Если в базе данных отсутствует типовое решение или оно требует непосредственное наличие квалифицированного специалиста, то в работу подключаются сотрудники «2-ой линии поддержки» - технические специалисты, имеющие необходимую квалификацию для «полевой» работы.

Технический специалист получает всю необходимую информацию через сотрудника Service Desk, который уже обработал заявку. Используя данную информацию, специалист подготавливается к решению проблемы и отправляется непосредственно к АРМ, где уже приступает к устранению неполадки.

Данное делегирование обязанностей позволяет уменьшить нагрузку на «полевых» технических специалистов, задействуя их только в необходимом случае, позволяя отсеивать мелкие неисправности на уровне первичной удаленной поддержки и консультировании.

По окончании работ, вся полученная информация, включая данные о проделанных работах, затраченном времени, использованных материалах, исполняющих сотрудниках и т.д., вносится в ITSM-систему. На основе этой информации в дальнейшем формируются отчеты, демонстрирующие эффективность отдела технической поддержки.

Авторы данной статьи спроектировали и в данный момент осуществляют этап внедрения описанной выше ITSM-системы на одном из некрупных предприятий города в проектно-конструкторском бюро (КПБ), имеющего более двух десятков АРМ. С учетом особенностей работы данного предприятия был предложен план оптимизации рабочего процесса, с которым согласилось вышестоящее руководство.

Основной задачей было создание и внедрение небольшой автоматизированной информационной системы (АИС), способной автоматизировать поток поступающих

заявок от пользователей сети данного предприятия, а также сразу пересылать их этому системному администратору на любое мобильное устройство, где бы он не находился. Полная функциональная структура АИС представлена на рисунке 2.

Использование профессиональных и готовых продуктов на рынке разработчиками системы было признано избыточным, так как парк машин и общая нагрузка на одного системного администратора не оправдывают усилия, затрачиваемые на внедрение крупномасштабной системы.

До внедрения АИС, КПБ оформляла заявки на устранения неполадок в свободной форме. Как правило, устной или через интернет-мессенджеры, без какой либо системы упорядочивания подачи заявок. Данное обстоятельство не позволяло осуществлять контроль за выполнением необходимых работ, их очередности (приоритету), а также приводило к утере некоторых заявок. При столь неструктурированной системе, отслеживать или создавать план предстоящих технических работ было невозможно.

Рисунок 2 – Функциональная структура АИС

Система, реализованная в соответствии с представленной функциональной структурой позволяет принимать заявки от пользователей любого ранга, в том числе и от самого администратора, выстраивать их очередность в соответствии с приоритетом, контролировать выполнение работ (отслеживать заявки на исполнении, не выполненные, перенесенные и т.д.), формировать ряд отчетности по требованию руководства. База данных системы размещена на сервере Oracle.

В ходе дальнейшей разработки, был разработан интерфейс системы, позволяющий отражать список хранящихся в ней заявок сотрудников предприятия, вводимых через клиентские пользовательские формы. Как было сказано выше, заявки автоматически обрабатываются и структурируются, согласно их приоритету самой системой. Прототип экранной формы системного администратора представлен на рисунке 3. На данный момент ведется работа по разработке справочника, позволившего бы структурировать описание проблем, так как сейчас данные вводятся каждым пользователем «от себя», так, как он может её описать.

Описание	Время подачи	Сотрудник	Срочность	Ход выполнения	Устройство
Проблема	01.11.2017 11:02:29	Мышкин	Не срочно	Не выполнено	PC1
Осмотреть PC2 на наличие излишнего шума	06.01.2018 5:36:11	Русановский	В порядке вы	Выполнено	PC2
Отключилась локальная сеть	06.01.2018 20:18:25	Русановский	Не срочно	Не выполнено	PC2
Отвалились передние USB-пк	12.12.2017 17:20:56	Никитин	Не срочно	Выполняется	PC2
Подключить PC3 к локально	06.01.2018 17:29:08	Русановский	Не срочно	Не выполнено	PC3
Величайшая проблема в мире	06.01.2018 20:20:02	Русановский	Не срочно	Не выполнено	PC3
Проверить куллера	20.12.2017 17:20:59	Никитин	Не срочно	Не выполнено	PC3
Починить Ксерокс, не печат	06.01.2018 20:58:16	Русановский	Срочно	Не выполнено	XEROX 6025

Описание: Осмотреть PC2 на наличие излишнего шума. Провести активацию КryptoPRO. Подключить отвалившиеся модули в Komras v16

Ход работ: Выполнено

Заявки за месяц Заккрыть

Рисунок 3 – Прототип экранной формы.

Но следует уточнить, что внедряемая система уже сейчас позволяет структурировать поступающий поток заявок. Тем самым, значительно сокращая издержки системного администратора при планировании и отслеживании текущего фронта работ.

Таким образом, основным способом оптимизации деятельности по поддержке работы пользователей в сети предприятия является создание многоуровневой системы обработки поступающих заявок, способной свести к минимуму организационные проблемы и эффективно распределять нагрузку между сотрудниками службы технической поддержки.

1. Обязанности Службы Service Desk, ее функции, уровни кадрового обеспечения и проч. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://project.dovidnyk.info/index.php/itil/podderzhkauslug/396-obyazannosti_sluzhby_service_desk_ee_funkcii_urovni_kadrovogo_obespecheniya_i_proch_ (дата обращения: 17.03.2018)
2. Управление инцидентами и проблемами [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.osp.ru/os/2001/07-08/180310/> (дата обращения: 17.03.2018)
3. HelpDesk и ServiceDesk. Что это и зачем это нужно вашей компании [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://habrahabr.ru/company/deskun/blog/331354/> (дата обращения: 17.03.2018)
4. Разработка проекта по внедрению системы Redmine в деятельность отдела программирования [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.scienceforum.ru/2015/890/8218/> (дата обращения: 17.03.2018)
5. Help Desk (helpdesk) или Service Desk [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.inframanager.ru/itsapiens/articles/helpdesk/> (дата обращения: 17.03.2017)

Шивкова Е.Г.**Повышение производительности тестирования программного обеспечения при управлении тестовыми данными**

*Российский университет транспорта (РУТ (МИИТ))
(Россия, Москва)*

doi: 10.18411/lj-31-03-2018-18

idsp: 000001:lj-31-03-2018-18

Аннотация

Управление тестовыми данными помогает организациям создавать более качественное программное обеспечение, которое будет надежно работать при развертывании. Он предотвращает исправления ошибок и откаты и в целом создает более экономичный процесс развертывания программного обеспечения. Это также снижает риски организации и риски безопасности.

Ключевые слова: тестирование, программное обеспечение, производительность, управление тестовыми данными.

Зачем рассматривать управление тестовыми данными?

Управление тестовыми данными подразумевает планирование, проектирование, хранение и управление процессами и методологиями тестирования программного обеспечения. Это позволяет командам качества программного обеспечения и тестирования контролировать и проверять данные, файлы, методологии и политики на протяжении всего жизненного цикла тестирования программного обеспечения.

Основная цель – создавать, управлять и поддерживать исходные коды приложения или программного обеспечения для тестирования. Благодаря управлению тестовыми данными возможно отделить тестовые данные от производственных данных и сохранить версию тестируемого программного обеспечения, отслеживание ошибок и другие процессы тестирования программного обеспечения.

Другой ключевой задачей управления тестовыми данными является минимизация и оптимизация объема данных тестирования программного обеспечения и в то же время сопоставление, централизация и стандартизация документации по тестированию программного обеспечения и ресурсов тестирования. Это важно во время жизненного цикла тестирования, когда данные, сгенерированные и сопоставленные, массивны для тестирования приложения или программного обеспечения. Когда результаты сообщаются, это сокращает время, затрачиваемое на обработку данных. Это также помогает повысить эффективность общего приложения или программного обеспечения.

Необходимо учитывать следующий контрольный список во время управления тестовыми данными:

- Общие элементы данных;
- Архивирование и сохранение данных;
- Организация и распределение тестовых данных;
- Создание отчетности и мониторинга;
- Приоритет в распределении тестовых данных;
- Разработка автоматизации тестирования для подготовки основных данных;
- Ведение версий тестовых данных, процессов и стандартов.

Каким образом можно повысить производительность анализа данных?

С традиционными процессами разработки программного обеспечения команды разработчиков обычно имеют неадекватный доступ к тестовым данным. Это в первую очередь приводит к необходимости эффективного управления тестовыми данными. Он может расширить возможности групп разработчиков и подниматься выше проблем с данными.

Минимальный порог разрабатываемых и тестируемых приложений резко возрастает. В результате команды тестирования и разработки не смогут работать отдельно друг от друга. Им нужен полный доступ к методологиям тестирования, результатам выполнения тестов и стандартам. Это помогает внедрять усовершенствования и исправления на каждом уровне и создавать условия для разработки при непрерывном тестировании.

Организации соблюдают преимущества управления тестовыми данными и даже конфиденциальность для управления производственными данными. Методологии разработки и тестирования нового поколения требуют более быстрых и более повторяющихся циклов выпуска для решения различных новых задач, поставленных цифровым миром. В этом контексте организациям становится неизбежным создание тестовой среды и необходимыми тестовыми данными и стандартами тестирования. Автоматизация тестирования может помочь ускорить этот процесс в конвейере доставки программного обеспечения, где каждый элемент становится автоматическим, и процесс остается итеративным. Это не позволяет прерывать проект из-за ограничений скорости или задержки обнаружения ошибок.

Отслеживание ошибок имеет решающее значение и может стоить огромных денег для предприятия. Управление тестовыми данными помогает обеспечить правильные тестовые данные в нужное время для необходимых действий. Одной из основных причин отказа приложения является неадекватность тестовых данных с командами разработчиков.

Задачи и рекомендации по управлению тестовыми данными

Количество инструментов управления тестовыми данными на рынке продолжает расти в соответствии с такими инструментами, как инструмент архивирования данных, инструменты ETL, аппаратные средства хранения на дисках и т.д. Тем не менее, разрыв преобладает, и становится необходимым понять основные проблемы с управлением тестовыми данными.

Одной из ярких проблем является сохранение безопасности данных. Если были случаи сбоя данных, то это может повлиять на процесс разработки приложений и сами данные. Помимо этого, быстрый рост объема тестовых данных и связанные с ними конечные затраты постоянно растут. Организации работают над улучшением повторного использования данных. Опытные команды управления тестовыми данными пытаются использовать новые технологии, чтобы сделать требуемые данные доступными с легкостью, безопасностью и скоростью. Виртуализация данных рассматривается как решение, где виртуальные данные могут быть доступны в течение нескольких минут и не несут физических затрат на инфраструктуру. Чтобы продолжать непрерывное тестирование, виртуализация данных дополнительно оснащает конечных пользователей элементами управления данными самообслуживания для исходных данных в любое время в любом месте. Это помогает сделать процесс тестирования программного обеспечения более итеративным и сократить задержку. Развитые и опытные ИТ-организации идут дальше с управлением тестовыми данными, в частности, с интегрированной маскировкой и распределением данных. При этом администраторы могут предоставить практически доступные данные командам разработчиков в течение нескольких минут и даже запустить алгоритм повторного маскирования для согласования процессов разработки и транзакций.

В целом эффективное управление тестовыми данными тестирования облегчает быструю доставку приложений, снижает затраты и, следовательно, улучшает согласованность с бизнес-моделями.

1. Хамбл Дж., Фарли Д. Непрерывное развертывание ПО: автоматизация процессов сборки, тестирования и внедрения новых версий программ, Управление данными, с. 317-332

Научный журнал

**Тенденции науки и образования в современном мире
№36, 03.2018**

В номере собраны материалы
XXXVI международной научной конференции
«Тенденции развития науки и образования»
31 марта 2018 г.
Часть 1

SPLN 001-000001-0270-LJ

Подписано в печать 14.04.2018. Тираж 400 экз.
Формат.60x841/16. Объем уч.-изд. л.3.68
Бумага офсетная. Печать оперативная.
Отпечатано в типографии НИЦ «Л-Журнал»
Главный редактор: Иванов Владислав Вячеславович