Международная Объединенная Академия Наук

Научные тенденции: Вопросы точных и технических наук

Сборник научных трудов

**по материалам
XIII международной научной конференции**

16 января 2018 г.

LJOURNAL.RU

Санкт-Петербург 2018

УДК 501
ББК 30

Н34

Научный диалог: Вопросы точных и технических наук. Сборник научных трудов, по материалам XIII международной научно-практической конференции 16 января 2018 г. Изд. ЦНК МНИФ «Общественная наука», 2018. – 60с.

SPLN 001-000001-0239-TT
DOI 10.18411/spc-16-01-2018
IDSP 000001: spc-16-01-2018

В сборнике научных трудов собраны материалы из различных областей научных знаний. В данном издании приведены все материалы, которые были присланы на XIII международную научно-практическую конференцию **Научный диалог: Вопросы точных и технических наук**

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

Все материалы, размещенные в сборнике, 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 Российского индекса научного цитирования (РИНЦ) и наукометрическую базу SPINDEX

Электронная версия сборника доступна на сайте ЦНК МНИФ «Общественная наука». Сайт центра: conf.sciencepublic.ru

УДК 501
ББК 30

SPLN 001-000001-0239-TT

<http://conf.sciencepublic.ru>

Содержание

РАЗДЕЛ I. МАТЕМАТИКА	5
Федотов А.И., Лисин С.К. Моделирование нелинейных колебаний измерительных систем.....	5
РАЗДЕЛ II. ФИЗИКА	9
Муслов С.А., Лотков А.И. Упругие постоянные 3-го порядка монокристаллов TiNi-2%Fe с памятью формы	9
Степанец В.А. К вопросу о природе электрического поля.....	12
РАЗДЕЛ III. ХИМИЯ.....	19
Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Влияние силового поля фуллерена на структурные и электронные характеристики двойной углерод-углеродной связимолекулы-гостя	19
Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Катионы в фуллеренах малого диаметра: примеры передачи заряда в эндокомплексе	21
Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Трансформация молекулы диалана, Al₂H₄, внутри нанотрубки (7,0)	23
Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Конформационные превращения молекулы глиоксаля в нанотрубке (7,0).....	25
Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Ацетилен в фуллерене C₆₀: пример взаимодействие силового поля наноструктуры с тройной углерод-углеродной связью	28
РАЗДЕЛ IV. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ	30
Гусева М.А., Андреева Е.Г., Петросова И.А., Гетманцева В.В., Корячихина М.А., Калинина Л.М. Современные технические решения модификации поверхности манекенов фигур человека для совершенствования процесса проектирования одежды.....	30

Рябова А.А. Внедрение элементов искусственного интеллекта в информационные системы управления 33

Чернов А.П., Князев В.Н. Вопросы разработки табличных процессоров 38

РАЗДЕЛ V. ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ 42

Аравенков А.А., Пасынков Ю.А. Разработка анализатора гармоник на основе широтно-импульсной модуляции с аналоговыми ключами и интеграторами..... 42

Демин В.И., Ломоносова Д.В. Обеспечение производственной безопасности на предприятиях по добыче и подготовке газа к транспорту..... 45

Довбыш Н.С., Фролов К.А., Жданов А.В. Исследование напряженно-деформированного состояния формообразующих деталей методом конечных элементов..... 50

Ерцкина Д.А., Рагозина М.А. Тенденции инновационного развития в сфере возобновляемых источников энергии в Красноярском крае и республиках Хакасии, Тыва 53

Торопов В.П. Проект устройства, отбирающего энергию у самого мощного природного аккумулятора – окружающего нас воздуха. Т.е. атмосферы Земли..... 56

РАЗДЕЛ I. МАТЕМАТИКА

Федотов А.И.¹, Лисин С.К.²

Моделирование нелинейных колебаний измерительных систем

¹СПб политехнический университет Петра Великого²СПб национальный минерально-сырьевой университет «Горный»
(Россия, Санкт-Петербург)

doi:10.18411/spc-16-01-2018-01

idsp: 000001:spc-16-01-2018-01

Abstract

The article presents the results of the study of amplitude-frequency $\alpha(\lambda)$ parameters of measuring vibration of the system in standalone mode. Identified components of values of period, amplitude and offset of the center of free oscillations $\alpha_0(\lambda)$ of the nonlinear measurement system.

Dependences characterizing the influence of the relative stiffness of the system and the test object in the frequency spectrum of free oscillations.

Для исследования вибраций физико-технических систем используются установленные теоретические закономерности на основе не только асимптотических, но и точных методов. К числу разновидностей методов теории нелинейных колебаний относятся метод гармонического баланса, разложений по степеням малого параметра, фазового отображения, «сшивания» решений, интегрирования в квадратурах и другие. Несмотря на функциональную общность механических, электромагнитных, звуковых колебаний каждый из них характеризуется принципиально отличным носителем информации присущих свойств исследуемых процессов или объектов.

Вибрационно-контактные системы контроля свойств материалов снабжаются устройствами, подвижные системы которых обеспечивают периодический контакт с изделием. Подобные режимы не связаны с необходимостью возбуждения соответствующих колебаний в самом изделии. Изучение вибрационных процессов машин, механизмов, средств измерительной техники, в том числе средств оценки локальных физических свойств материалов (чаще всего жесткости, твердости), связано с построением и анализом математических моделей режимов вынужденных и свободных колебаний.

Внутренние свойства вибрационно-контактной измерительной системы [1, с. 270-273] в первом приближении отображаются одномерной кусочно-линейной характеристикой

$$f(\zeta) = \begin{cases} \zeta, \zeta \leq 1, \\ k\zeta, \zeta > 1, \end{cases}$$

где k – коэффициент жесткости упругого подвеса и объекта контроля;

ζ – безразмерная координата перемещения измерительного наконечника.

Для решения модели свободных колебаний вибрационно-контактной системы, соответствующей $f(\zeta)$, используется метод интегрирования в квадратурах. Подобная задача сводится к анализу амплитудно-частотных режимов вибрационно-контактной системы с учетом её свойств, отвечающих $f(\zeta)$. Реализация интегрального метода позволяет определить составляющие периода τ_1 , τ_2 , амплитуду α , частоту λ ,

смещение центра α_0 свободных колебаний. Смещение центра колебаний обусловлено отклонениями измерительного наконечника от положения статического равновесия в момент выхода автономной системы из равновесного состояния.

Ключевые зависимости амплитуды $\alpha(\lambda)$ и смещения центра колебаний $\alpha_0(\lambda)$ в частотной области в соответствии с принятым методом строятся с учетом локальных свойств (жесткости, твердости) объекта контроля вибрационно-контактной системы. При этом зависимости $\alpha = u(k)$ и $\alpha_0 = \varphi(k)$ представляют параметры колебательного процесса, зависящие от внутренних свойств автономной системы.

В случае значительного отличия жесткости объекта контроля и жесткости упругого подвеса характеристика $f(\zeta)$ системы становится существенно-нелинейной. Существенно-нелинейная характеристика $f(\zeta)$ системы содержит узловую точку $\zeta = 1$.

Рассматриваемый метод позволяет, не прибегая к графическим построениям, определить с помощью аналитических моделей составляющие периода τ_1, τ_2 , а также значения отклонений измерительного наконечника от положения равновесия α_1, α_2 и значения смещения центра свободных колебаний α_0 в частотной области. Составляющие периода колебаний τ_1, τ_2 соответствуют перемещениям автономной вибрационно-контактной системы на участках $1 \leq \zeta \leq \alpha_1, \alpha_2 \leq \zeta < 1$.

Для построения амплитудно-частотной зависимости системы, устанавливаются компоненты функции $\alpha_2 = v(\alpha_1)$. Графические зависимости $\alpha = f(\lambda)$ автономной вибрационно-контактной системы с учетом её локальных свойств ($k=1.1, k=2$) приведены на рис. 1.

Рис. 1. Графические зависимости $\alpha = f(\lambda)$ системы

Графики функции $\alpha = f(\lambda)$ характеризуют взаимосвязь амплитуды колебаний измерительного наконечника вибрационно-контактной системы с локальной жесткостью поверхности объекта контроля. Установленная функция амплитуды

позволяет предсказать режим и использовать вибрационно-контактное средство (преобразователь) для оценки физико-механических свойств контролируемого изделия в режиме вынужденных колебаний. При этом графики $\alpha = f(\lambda)$ могут использоваться в качестве экспрессных характеристик. Графические зависимости $\alpha_0 = f(\lambda)$ смещения центра колебаний автономной вибрационно-контактной системы с учетом её локальных свойств по параметру k представлены на рис. 2.

Рис .2. Графические зависимости $\alpha_0 = f(\lambda)$ системы

Смещение центра колебаний измерительного элемента является функцией измеряемых $\alpha, \alpha_1, \alpha_2$ и устанавливаемых параметров k, λ . Приведенная графическая зависимость α_0 позволяет обеспечить исследователю возможность выбора вибрационно-контактного преобразователя и способа оценки свойств контролируемого изделия. Расчетные данные функций $\alpha = f(\lambda)$ и $\alpha_0 = f(\lambda)$ приведены в табл. 1.

Таблица 1

	K=1.1			K=2		
a1	lambda	alfa	alfa0	lambda	alfa	alfa0
1.01	22.80	1.010002	2.48e-6	26.05	1.010025	2.48e-6
1.02	16.16	1.02001	9.8e-6	18.44	1.020098	9.8e-5
1.03	13.22	1.030022	2.18e-5	15.08	1.030218	0.000218
1.04	11.48	1.040038	3.85e-5	13.07	1.040384	0.000384
1.05	10.29	1.050006	5.95e-5	11.70	1.050595	0.000595
1.06	9.42	1.060085	8.49e-5	10.70	1.060848	0.000848
1.07	8.74	1.070114	0.000114	9.92	1.071144	0.001144
1.08	8.19	1.080148	0.000148	9.29	1.081479	0.001479
1.09	7.74	1.090186	0.000186	8.77	1.091855	0.001855
1.1	7.36	1.100227	0.000227	8.33	1.102268	0.002268
1.11	7.04	1.110272	0.000272	7.95	1.112719	0.002719
1.12	6.75	1.120321	0.000321	7.62	1.123205	0.003205
1.13	6.50	1.130374	0.000374	7.34	1.133727	0.003727
1.14	6.28	1.14043	0.00043	7.08	1.144282	0.004282
1.15	6.08	1.150489	0.000489	6.85	1.154871	0.004871
1.16	5.90	1.160551	0.000551	6.64	1.165491	0.005491
1.17	5.74	1.170617	0.000617	6.45	1.176143	0.006143
1.18	5.59	1.180686	0.000686	6.28	1.186825	0.006825
1.19	5.45	1.190758	0.000758	6.12	1.197536	0.007536
1.2	5.32	1.20833	0.000833	5.98	1.208286	0.008276

Из изложенного следует, что полученные результаты исследования математической модели свободных колебаний представляют собой зависимости амплитуды $\alpha(\lambda)$, смещения центра колебаний $\alpha_0(\lambda)$ и параметров жесткой характеристики $f(\zeta)$ нелинейной вибрационно-контактной системы. Выполненные исследования модели свободных колебаний позволяет обеспечить проведение обоснованного прогнозирования физико-механических свойств автономной системы. В процессе изучения, проектирования и применения средств вибрационного контроля приведенная математическая модель является актуальной, так как включает в рассмотрение параметры жесткости или твердости, которые характеризуют локальные свойства контролируемого материала изделия. При этом рассматриваемая модель свободных колебаний позволяет предопределить формат режима вынужденных колебаний. Исследователю в области теории измерений и специалисту по проектированию средств вибрационного контроля приведенный анализ моделей режимов автономных систем послужит важной информационной основой при изучении колебаний.

1. Федотов А.И., Лисин С.К., Научно – технические ведомости № 4-1 (183) – СПбГПУ, 2013, с. 270-273.
2. Вибрации в технике. Защита от вибраций и ударов; Т.6: Справочник / Под ред. К.В. Фролова/. М.: Машиностроение, 1981. - 456 с.
3. Федотов, А.И. Теория измерений /А.И. Федотов, С.К. Лисин, Г.С. Морокина. – СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2013. – 325 с.
4. Лисин С.К., Федотов А.И. Научно – технические ведомости № 3 (84) – СПбГПУ, 2009, с. 181-184.
5. Victor Wowk. Machinery Vibration: Measurement and Analysis. McGraw – Hill Professional, 1991, 358 p.
6. Cyril M. Harris. Shock and Vibration Handbook. McGraw – Hill, 1996, 1000 p.

РАЗДЕЛ II. ФИЗИКА

Муслов С.А.¹, Лотков А.И.²

Упругие постоянные 3-го порядка монокристаллов TiNi-2%Fe с памятью формы

¹ГБОУ ВПО Московский Государственный Медико-Стоматологический
Университет (МГМСУ) им. А.И. Евдокимова Минздрава РФ
(Россия, Москва)

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук
(ИФПМ СО РАН)
(Россия, Томск)

doi:10.18411/spc-16-01-2018-02

ids: 000001:spc-16-01-2018-02

Упругие постоянные – одни из важнейших характеристик твердого тела. Упругие постоянные второго порядка и упругие постоянные третьего порядка являются коэффициентами разложения внутренней энергии по степеням деформации при квадратичных и кубических членах этого разложения. В области применимости закона Гука плотность упругой энергии квадратична относительно компонент деформации. Вне этой области появляются произведения деформаций более высокого порядка. Упругие постоянные (модули) c_{ijk} третьего порядка связывают упругую энергию кристалла с произведениями трех компонент тензора деформации [7, 8]. В общем случае анизотропное твердое тело имеет всего 216 модулей третьего порядка. Из условий симметрии, однако, могут быть найдены дополнительные связи между модулями третьего порядка. Кристаллы кубической симметрии имеют три независимые упругих постоянных второго порядка, шесть или восемь постоянных третьего порядка и одиннадцать четвертого порядка. Кубические кристаллы наиболее симметричных групп О, Oh и Td имеют шесть независимых модулей третьего порядка c_{111} , c_{112} , c_{123} , c_{144} , c_{456} и c_{166} . Модули третьего порядка обычно в 3-10 раз больше модулей второго порядка. Анггармонические эффекты важны при рассмотрении явлений, связанных с потерей устойчивости кристаллическими решетками и фазовыми переходами твердых тел. В [1] получены численные критерии устойчивости исходной B2 кристаллической решетки сплавов на основе никелида титана TiNi к однородным и коротковолновым деформациям. Критерии содержат соотношения между модулями упругости 2-го и 3-го порядка.

Некоторые соотношения между модулями упругости можно получить при гидростатическом сжатии исследуемого материала. Остальные необходимые соотношения получаются путем измерения скорости звука в условиях одноосного сжатия материала. Мы применили для расчета упругих постоянных третьего порядка данные [3] измерения скорости ультразвуковых волн (УЗВ) на частотах 3 и 5 МГц для различных мод, распространявшихся в кристаллах TiNi-2%Fe в различных направлениях при гидростатическом давлении от 0 до 0,8 ГПа (табл. 1).

В сплавах на основе TiNi хорошо изучено, что высокотемпературная ОЦК B2-фаза, упорядоченная по типу CsCl, может подвергаться при понижении температуры мартенситным превращениям по двум каналам: $B2 \rightarrow B19'$ и $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$, в зависимости от состава и термомеханической обработки (ТМО). Здесь $B19'$ и R – моноклинная и ромбоэдрическая фазы, соответственно [3]. Сплавы с эффектом памяти формы нашли широкое применение в технике и медицине, например в качестве финальных соединений при сборке конструкций (втулок), имплантируемых в организм длительно функционирующих материалов, ортодонтических дуг, сосудистых стентов и

сфера применения этих материалов постоянно продолжает расширяться [5]. Они способны обратимо изменять свою форму при изменении температуры, проявляют высокие эластичные свойства, не разрушаются в условиях знакопеременной нагрузки.

Монокристаллы системы TiNi-TiFe впервые получены и изучены в работах коллектива в составе Лотков А.И., Чумляков Ю.И., Хачин В.Н., Кузнецов А.В. и Муслов С.А. в СФТИ им. академика В.Д. Кузнецова, г. Томск [2, 4]. Упругие модули второго порядка кристаллов были измерены резонансным методом пьезоэлектрического составного вибратора [4, 9].

Таблица 1

L/T	Мода УЗВ	ω	ω , ГПа [4, 9]	$d\omega/\omega dp$	$d\omega/dp$	$1+2\omega/3B+(d\omega/dp)_{p=0}$ [10, 11]
L	[100][100]	c_{11}	162,5	0,032	5,20	$-\frac{1}{3B}(c_{111} + 2c_{112})$
T	[100] $\forall \perp N$	c_{44}	34,0	0,0235	7,99	$-\frac{1}{3B}(c_{144} + 2c_{166})$
L	[110][110]	c_L	179,3	0,036	6,50	$-\frac{1}{3B}(\frac{1}{2}c_{111} + 2c_{112} + c_{144} + 2c_{166} + \frac{1}{2}c_{123})$
T	[110][1 $\bar{1}0$]	C'	17,2	-0,020	-0,34	$-\frac{1}{3B}(\frac{1}{2}c_{111} - \frac{1}{2}c_{123})$

Здесь, L – продольные моды колебаний, T – поперечные моды колебаний; N – единичный вектор вдоль направления распространения волны; ω – упругие постоянные второго порядка или их линейные комбинации: $c_L = \frac{1}{2}(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})$; $C' = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$;

$B = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3}$, где B – модуль объемного сжатия.

В результате для нахождения 6-и упругих постоянных TiNi имеем систему из 4-х линейных уравнений:

$$\begin{cases} c_{111} + 2c_{112} = -2,92 \\ c_{144} + 2c_{166} = -0,82 \\ \frac{1}{2}c_{111} + 2c_{112} + c_{144} + 2c_{166} + \frac{1}{2}c_{123} = -3,50 \\ \frac{1}{2}c_{111} - \frac{1}{2}c_{123} = -0,31 \end{cases} \quad (1)$$

Упругая постоянная c_{456} в уравнения системы не вошла, поскольку отсутствуют данные по зависимости от одноосного давления вдоль направления [111] скорости распространения звуковой волны, которая определяет эту постоянную [10]. Но и без c_{456} система не имеет численного решения, хотя и устанавливает соотношения между упругими постоянными третьего порядка кристаллов TiNiFe. Учтем условия Коши для упругих постоянных третьего порядка кубических кристаллов

$$c_{112} = c_{166}, c_{123} = c_{144} = c_{456}. \quad (2)$$

Условия Коши выполняются, вообще говоря, далеко не всегда, тем не менее, они часто фигурируют в литературе. В нашем исследовании условия (2) позволяют снизить число переменных до трёх. Но в этом случае получаем систему линейных уравнений,

которая на первый взгляд попадает под определение переопределенной (число уравнений – 4 превышает число неизвестных – 3):

$$\begin{cases} c_{111} + 2c_{112} = -2,92 \\ 2c_{112} + c_{123} = -0,82 \\ \frac{1}{2}c_{111} + 4c_{112} + \frac{3}{2}c_{123} = -3,50 \\ \frac{1}{2}c_{111} - \frac{1}{2}c_{123} = -0,31 \end{cases} \quad (3)$$

Редактор электронных таблиц Excel Microsoft Office позволяет решать такие системы линейных уравнений через надстройку “Поиск решения”, предназначенную для анализа уравнений и задач оптимизации. Однако более подробный анализ системы (3) выявил, что ранг её матрицы равен 2, в результате она на самом деле является неопределенной и получение даже приближенных её решений является весьма проблематичным. Однако мы можем численно оценить эти приближенные решения. Зная упругие постоянные третьего порядка для сплавов на основе меди, испытывающих мартенситные превращения из β -фазы зададим исходные значения изменяемых ячеек приложения (терминология метода) равными -1 ТПа. Тогда получим следующие значения упругих постоянных третьего порядка TiNi-2%Fe: $c_{111} = -1,19$ ТПа, $c_{112} = -0,51$ ТПа, $c_{123} = -0,57$ ТПа. Сумма отклонений точки решения от плоскостей системы – минимизируемый параметр метода составляет в этом случае 0,66 ТПа (для 3-х переменных уравнения системы можно геометрически интерпретировать как плоскости). Применить для решения системы уравнений (3) другой известный метод нахождения приближенных значений – метод наименьших квадратов (МНК) прямо невозможно, т.к. обратной матрицы системы не существует.

Выводы. Получены численные соотношения между упругими постоянными третьего порядка c_{ijk} кристаллов сплава на основе TiNi с эффектом памяти формы в виде системы линейных уравнений. Рассчитаны приближенные значения упругих постоянных третьего порядка TiNi-2%Fe с учетом условий Коши для кубических кристаллов. Авторы надеются, что приведенные данные помогут лучше понять природу и механизм мартенситных превращений, а также проблему зарождения мартенсита в сплавах никелида титана. Для расчета точных значений всех упругих постоянных третьего порядка сплава необходимы дополнительные исследования зависимости скорости распространения звука в сплаве от одноосного давления для высокосимметричных направлений [110] и [111].

1. Кондратьев В.В., Муслов С.А., Пушин В.Г., Хачин В.Н. Структура и свойства В2 соединений титана. II. Предмартенситная неустойчивость ОЦК (В2) решётки // Физ. метал. и металловедение. – 1988. – Т. 66, Вып. 2. – С. 359-369.
2. Кузнецов А.В., Муслов С.А., Лотков А.И., Хачин В.Н., Гришков В.Н., Пушин В. Г. Упругие постоянные TiNi вблизи мартенситных превращений // Известия вузов, сер. Физика. – 1987, № 7. – С. 98-99.
3. А.И. Лотков, В.П. Лапшин, В.Н. Гришков, В.А. Гончарова. Влияние гидростатического давления на упругие свойства сплавов с памятью формы Ti-Ni-Fe // Перспективные материалы. – 1999. – № 2. – С. 49-53.
4. Муслов С.А., Кузнецов А.В., Хачин В.Н., Лотков А.И., Пушин В. Г., Гришков В.Н. Аномалии упругих постоянных монокристаллов Ti50Ni48Fe2 // Известия вузов, сер. Физика. – 1987, № 8. – С. 104-105.
5. Муслов С.А., Шумилина О.А. Медицинский нитинол: друг или враг? Ещё раз о биосовместимости никелида титана // Фундаментальные исследования. – 2007. – С. 87-89.
6. Секоян С.С. Формулы Тэрстона–Браггера для кубических кристаллов // Акустический журнал, 21, 2, с. 264-267 (1975).

7. Францевич И.Н. и др. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник. – Киев: Наукова Думка, 1982. – 286 с.
8. Хантингтон Г. Упругие постоянные кристаллов // УФН. – 1961. – Т. LXXIV, вып. 2. – С. 303-352.
9. Хачин В.Н., Муслов С.А., Пушин В.Г., Кондратьев В.В. Особые упругие свойства В2-соединений титана с нестабильной решеткой // Металлофизика и новейшие технологии. – 1988. – Т. 10. – № 1. – С. 102-104.
10. R.N. Thurston and K. Brugger. Third-Order Elastic Constants and the Velocity of Small Amplitude Elastic Waves in Homogeneously Stressed Media. Phys. Rev., 133, A1604 (1964).
11. Zung-Ping Chang. Third-Order Elastic Constants of NaCl and KCl Single Crystals. Physical Review, 1965 vol. 140, Issue 5A, pp. 1788-1799.

Степанец В.А.

К вопросу о природе электрического поля

*АО «Научно-производственный испытательный центр «Арминт»
(Россия, Москва)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-03

idsp: 000001:spc-16-01-2018-03

*«Нет ничего практичнее хорошей теории»
Д.И. Менделеев*

1. Введение

Расчеты футурологов показывают, что без нового мощного источника «чистой» энергии нельзя выйти из надвигающегося энергетического кризиса и разрешить многочисленные нарастающие проблемы экологии и глобального изменения климата. И потребность в нем только растет.

Известные виды относительно «чистой» энергии: гидравлической, ветровой, геотермальной, солнечной, ядерной ресурсно ограничены. Промышленное использование термоядерной энергии пока видится в отдаленной перспективе. В то же время мы «купаемся» в море окружающей и атакующей Землю энергии космических лучей, нейтринного излучения, «темной» энергии, гравитационных, электрических и других полей...

Хотелось бы научиться утилизировать все эти энергии. Начать представляется целесообразным с наиболее исследованной из них – энергии электрического поля, с которым человечество знакомо порядка трех тысяч лет. Причем непонимание сути электричества не мешало его широкому практическому применению. Вместе с тем, не вызывает сомнений, что использование электрической энергии на основе полного знания физики электрических процессов было бы гораздо эффективнее.

2. История познания электричества

Анри Ампер указывал, что все электрические явления производит взаимодействие (притяжение и отталкивание) молекул электрических жидкостей. Эфир представляет собой соединение двух электрических жидкостей, разложение и соединение которых образуют электрический ток, являются единственной причиной образования тепла и света, т.е. колебаний жидкости, заполняющей все пространство [1]. Майкл Фарадей оставлял возможность многовариантности природы передачи электрических сил (электростатической индукции), ставя своей задачей дать описание результатов их действия, основываясь исключительно на опытных данных. Разрабатывая теорию силовых линий, он, в частности, допускал передачу этих сил, как через смежные частицы вещества, так и через вакуум [2].

Альберт Эйнштейн определял электрическое поле как нечто, обладающее энергией, помещающееся между заряженными телами, чтобы описать действующую между ними силу [3]. В теории электричества у Николы Теслы основополагающим было понятие эфира – некой невидимой субстанции, заполняющей весь мир и

передающей колебания со скоростью, во много раз превосходящей скорость света. Каждый миллиметр пространства, полагал Тесла, насыщен безграничной, бесконечной энергией, которую нужно лишь суметь извлечь [4].

«Баллистическая теория» Вальтера Ритца [5] привлекательна предельной простотой, отказом за ненадобностью и бесполезностью от понятия магнитного поля и постулатов Эйнштейна. Отталкиваясь от фотонной (корпускулярной) теории истечения света Ньютона, основываясь на конечности скорости распространения любых материальных объектов, Ритц свел все известные электромагнитные явления к механическим взаимодействиям зарядов посредством излучаемых ими «фиктивных» (виртуальных) частиц.

В классической электромагнитной теории устоявшимся является следующее определение электрического поля [6]: «особый вид материи, создаваемый в окружающем пространстве заряженными частицами или телами, посредством которого осуществляется взаимодействие между этими заряженными частицами или телами». Процесс возникновения и исчезновения поля и его природа при этом остаются за рамками теории. Силовой характеристикой электрического поля служит вектор его напряженности E : $E = F/q$, где F – сила, действующая на заряд q .

Согласно современной квантовой теории поля, взаимодействие поля и заряда, а также свободных зарядов между собой, происходит в форме испускания и поглощения зарядами квантов поля – фотонов. Например, между двумя электронами идет постоянный обмен фотонами: каждый из электронов испускает фотоны (кванты) электромагнитного поля, которые затем поглощаются другим электроном. Классическое же взаимодействие в виде сил, действующих между заряженными частицами, оказывается вторичным эффектом, возникающим в результате обмена виртуальными квантами поля, переносящими взаимодействие [7]. Заметим, что утверждение о возникновении электрических сил в результате обмена виртуальными низкочастотными квантами абстрактно и недостаточно для понимания физики превращения элементарных обменных актов в силовое воздействие.

В порядке компромисса ныне принята дуальная модель электромагнитного поля – классическая волновая в макроявлениях и корпускулярная (квантовая) в микромире.

3. Необходимость в новых теориях электрического взаимодействия

На настоящее время накоплены десятки экспериментов, свидетельствующих о некорректности классической электромагнитной теории и ее несоответствии картине реальных физических явлений: опытным данным, принципу причинности и естественности в смысле соответствия общечеловеческой практике (см., например, [8]). В качестве примера, а также в целях выявления возможного перспективного направления исследований, рассмотрим один из конфликтов теории электромагнитного поля и классической ньютоновской механики.

Как известно, взаимодействие движущихся зарядов проходит с нарушением принципа центральности сил, третьего закона Ньютона и, соответственно, закона сохранения механического импульса (например, см. статью «Электродинамика» [9] Физической энциклопедии, работы Р. Фейнмана [10], И. Савельева [11]). В современной электродинамике, для формального выполнения закона сохранения импульса, образовавшуюся разницу в расчете механического импульса относят на долю импульса электромагнитного поля (заметим, что в «баллистической теории» Ритца такого несоответствия нет). Ниже будет показано, что и в электростатике постулируемые принципы центральности и суперпозиции сил и полей также не выполняются.

Но если сумма внутренних сил механической системы (независимо от их природы), приложенных к элементам этой системы, не равна нулю, то из этого факта автоматически следует образование равнодействующей силы и принципиальная возможность организации так называемого безопорного движения!

Таким образом, возникает необходимость в адекватном непротиворечивом теоретическом описании известных электрических явлений. Руководствуясь рекомендацией Д.И. Менделеева: «Из всех гипотез выбирайте ту, которая не пресекает дальнейшего мышления об исследуемых вещах», предпочтение следует отдавать теоретическим положениям, непосредственно основанным на опытных данных. С позиции максимы Уильяма Оккама: «Не следует привлекать новые сущности без крайней на то необходимости», следует признать преимущества «баллистической теории» Ритца, основанной на простых, понятных и естественных механизмах. В то же время не вызывает сомнений ряд подтвержденных экспериментально аналитических соотношений электростатики и квантовой теории поля.

Из изложенного вытекает задача поиска нового, не противоречащего известным знаниям об электричестве пути дальнейшего продвижения вперед. Попытаемся, без потери физического смысла и содержания теоретических предположений сформулировать несколько возможных подходов для ее решения.

4. Физическая сущность электрического поля

Гипотеза существования потока электрического поля. Допустим, имеется еще некоторое (дополнительно к трем, эмпирически известным человечеству) количество измерений материального мира. Пусть одно из них сопрягается с нашей (ощущаемой людьми) Вселенной через точки (проколы, порталы), являющиеся положительными и отрицательными зарядами. И пусть это измерение проявляется в существовании у положительных и отрицательных зарядов потока материальной энергии, пропорционального значениям этих зарядов. Назовем его потоком электрического поля или электрополевым потоком.

Попробуем, основываясь на опытных данных и известных физических эффектах, определить характеристики и свойства этого потока.

1). Формируемый (вероятно в виде вихря) между разноименными зарядами вещества электролевой поток действует постоянно, обеспечивая удержание электронов в составе атомов. Он же существует и в макром мире, взаимодействуя со свободными зарядами в процессе испускания ими или поглощения субстанции (материальных частиц) потока.

2). Представляется принципиально возможным, что элементарные частицы электрон и позитрон являются как излучающе-поглощающими, так и чисто поглощающими субъектами электролевого потока, а предельно сблизившиеся пары электрон-позитрон образуют нейтрино. При этом поток может испускаться и поглощаться не только непрерывно, но и квантами (фотонами) при совершении электронами межорбитальных переходов.

3). Электролевой поток обладает плотностью, а его частицы, которые также можно назвать элементами наполняющего пространство «эфира», массой. Частицы потока, подобно молекулам стандартного газа, отталкиваются друг от друга, стремясь к максимальному рассеиванию. Это следует из опытов электростатики [12], в которых напряженность (интенсивность) поля заряженного тела произвольной формы или нескольких тел, по мере удаления от них, постепенно усредняется и, начиная с некоторого расстояния, становится равномерно сферической (см. Рис. 1, 2). Это очевидно и из опытов Фарадея [13], выявившего явление обтекания полем препятствий, а также, измерений давления света, отклонения лучей света под гравитационным воздействием и др.

4). Измерения силы, действующей на пробный заряд в однородном поле, показывают, что она не зависит от расстояния до источника или стока поля, а определяется только интенсивностью (плотностью) электролевого потока этого поля и величиной пробного заряда. Таким образом, закон Кулона определяет не столько силу, сколько плотность электролевого потока в контрольной точке или, в терминах классической электростатики, степень рассеяния поля заряда.

<p>Рис. 1</p> <p>Силовые линии вокруг двух зарядов один из которых равен +3, другой равен -1</p>	<p>Рис. 2</p> <p>Электрическое поле около двух проводников, один из которых имеет заряд +1, а заряд второго равен нулю</p>

5). Из характера действующих на поверхности заряженных уединенных проводников электростатических сил [14], которые всегда направлены наружу, нормально к поверхности проводника, следует, что поглощение или испускание субстанции потока поля происходит с усилием, приложенным к элементарным зарядам и суммарно к заряженному телу в целом. Результирующая сила этого распределенного усилия направлена по градиенту возрастания интенсивности электрополевого потока (напряженности поля) вокруг этого заряда или тела. Определить значение результирующей силы можно просуммировав (проинтегрировав) векторы силы линий поля на поверхности заряда или заряженного тела (см. Рис. 3).

Рис. 3

Карта силовых линий поля двух разноименно заряженных проводников

6). Скорость распространения фотонного излучения потока электрического поля в вакууме равна скорости света, что, видимо, связано с особенностями механизма их испускания, и аддитивно складывается со скоростью источника излучения согласно законам классической механики, что доказывается эффектом «красного» и «синего» смещения спектра излучения движущегося источника. Характер непрерывного течения частиц потока, как показывают электрические карты сложных полей (см. Рис. 1-3), определяется кинематическими параметрами действующих потоков и может происходить с любой скоростью, от световой до нулевой, а остановившиеся частицы поля, «стянутые» гравитацией галактик, наряду со слабовзаимодействующими частицами типа нейтрино, возможно, составляют «темную» материю. Также логично предположить, что циркулирующие во Вселенной фотонные электрополевые потоки, испускаемые в виде света и других видов излучения, например, объектов типа «белых дыр», оказывая давление на материю, как раз и ответственные за «разбегание» галактик.

5. Электрополевая энергетика

Что дает существование потока электрического поля практически? В теоретическом плане, для адекватного описания взаимодействия зарядов становится возможным использовать математический аппарат гидроаэромеханики и молекулярной

физики. Но самое главное, понимание существования в нашем материальном мире этих электрополевых потоков обеспечивает принципиальную возможность использования их кинетической энергии как неисчерпаемого внешнего источника энергии.

Одним из направлений практического применения выдвинутой гипотезы является построение считающихся ныне невозможными безопорных двигателей. По физике функционирования, такие двигатели являются электрическими машинами, преобразующими энергию электрического поля (электрополевого потока), действующего между механически связанными между собой разноименно заряженными электродами устройства, в механическую энергию их взаимного вращательного или поступательного движения. Рассмотрим возможный вариант такого конструирования на примере устройства, заявленного в качестве изобретения: «Способ электромеханического преобразования энергии и электрополевой двигатель на его основе».

Будем отталкиваться от известного. В электростатике хорошо изучены характеристики поля плоского электрического конденсатора [15]. Действующие между его заряженными обкладками силы наглядно описываются совокупностью силовых линий. В однородной части поля конденсатора они равны, встречно направлены, центральны и в целом взаимно компенсируют друг друга (см. Рис. 5, 6).

<p style="text-align: center;">Рис. 4</p>	<p style="text-align: center;">Рис. 5</p>
<p style="text-align: center;">Расположение крупинок между разноименно заряженными пластинами</p>	<p style="text-align: center;">Линии поля между разноименно заряженными пластинами</p>

Расположение крупинок между Линии поля между разноименно разноименно заряженными пластинами заряженными пластинами

Посмотрим, что получится, если развести обкладки конденсатора на некоторый угол.

В теории известно описание электростатического поля для двух проводящих заряженных плоскостей, сходящихся под углом [16] (см. Рис. 6).

<p style="text-align: center;">Рис. 6</p>	<p style="text-align: center;">Рис. 7</p>
<p style="text-align: center;">Поле плоских разноименно заряженных проводников, развернутых под углом</p>	<p style="text-align: center;">Образование результирующей силы в конденсаторном диполе</p>

Линии равной напряженности (силовые линии) этого поля представляют собой окружности, проведенные из вершины двугранного угла, образованного плоскостями, на которых располагаются заряженные проводящие плоскости. А величина напряженности E является функцией разности потенциалов $U = U_2 - U_1$ и длины силовой линии между электродами:

$$E = U/(\alpha \cdot r), \quad (1)$$

где, α – угол между плоскостями [рад];

r – радиус силовой линии.

Расчеты показывают, что в отличие от плоского конденсатора, суммарные силы между двумя заряженными плоскими проводящими плоскостями 1, 2, зафиксированными диэлектрическими опорами 3 под углом, не компенсируются (см. Рис. 7).

Назовем эту систему плоских проводников, характерную переменным (расходящимся) расстоянием между пластинами, «конденсаторным диполем» или «раскрывающимся конденсатором». Поскольку общий вектор приложенной к каждой пластине силы формируется силовыми линиями на поверхности пластин, то, таким образом, в системе заряженных обкладок (пластин) конденсатора имеем некоторую результирующую силу, направленную по биссектрисе угла между пластинами конденсатора, которая формируется следующим образом.

Будучи заряженными, элементарные участки пластин конденсаторного диполя притягиваются друг к другу с силой $f_{1,2}$, результирующая векторной суммы которых в проекции на срединную линию устройства дает линейную составляющую f_l :

$$f_l = f \cdot \sin(0,5\alpha), \quad (2)$$

где $f = |f_1| + |f_2|$ – алгебраическая сумма модулей сил f_1 и f_2 .

Проинтегрировав указанные электростатические силы по площади пластин, получаем приложенную к конденсаторному диполю результирующую силу F_p , которая может быть использована для выполнения полезной работы.

С учетом формул связи напряженности E и плотности σ заряда, а также действующей на поверхности пластины шириной h и длиной ($r_k - r_o$) силы F , в условиях вакуума [17], равнодействующая результирующая сила F_p составит:

$$F_p = 2 F \cdot \sin(0,5 \cdot \alpha) = \epsilon_o \cdot U^2 \cdot h \cdot \sin(0,5 \cdot \alpha) \cdot (1/r_o - 1/r_k)/\alpha^2. \quad (3)$$

Расчеты по приведенным выше соотношениям показывают, что для тонких пластин, развернутых на острый угол, действующими между обратными сторонами пластин, а также между краями устройства силами можно пренебречь.

Таким образом, мы показали, что не только в динамике, но и в статике принципы суперпозиции и центральности электрических сил и полей в общем случае не соблюдается.

Для выполнения функции движителя указанные обкладки располагают в диэлектрической среде с малой диэлектрической проницаемостью и разворачивают друг относительно друга таким образом, чтобы образующаяся при этом между обкладками результирующая сила электростатического взаимодействия была ориентирована в направлении требуемого их перемещения. Т.е. получаем универсальный безопорный (в обычном понимании этого слова) электролевой движитель, преобразующий энергию электрического поля в энергию механического движения.

Закрепив указанные пластины или комбинацию их пар на рабочем объекте (теле), которое необходимо вращать или перемещать в пространстве, совершаем требуемую полезную работу. Необходимая сила взаимодействия заряженных обкладок регулируется изменением величины их заряда любым известным методом, например, от источника регулируемого напряжения.

Работоспособность заявленного способа подтверждена экспериментально, его новизна и изобретательский уровень закреплены патентом РФ за № 2629846,. На этих же принципах построены электролевые двигатели по патентам РФ № 2458451 и № 2471283 и генераторы электроэнергии по патентам РФ № 2471284 и № 2454783.

6. Заключение

В заключение немного истории. Бурное развитие электрополевой энергетики в девятнадцатом веке привело к созданию многочисленных образцов электрополевых машин – электростатических генераторов и двигателей. К сожалению, в дальнейшем они не выдержали конкуренции с машинами, основанными на эффекте электромагнитной индукции, и забылись.

Настало время возвращения к истокам электростатического машиностроения, но уже на новом уровне идей электрополевой энергетики. Кроме того, заметим, что возможность получения энергии из физического вакуума, как сложной энергетической системы со свернутыми в подпространствах вакуума кольцевыми электрическими структурами вещества-антивещества уже рассматривалась теоретически, например, советским физиком и математиком Герловиным И.Л. в разработанной им теории фундаментального поля [18]. Заявления астрофизиков о существовании «темной» материи и «темной» энергии также говорят в пользу выдвинутой гипотезы существования потока электрического поля.

Актуальность и возможные прикладные аспекты электрополевой энергетики в решении ряда практических задач рассмотрены в статье «Электрополевая энергетика: постановка задачи» [19].

Автор выражает глубокую благодарность кандидату физико-математических наук Гаврилову С.Д. за участие в обсуждении и подготовке материалов статьи к публикации.

1. Ампер А М Электродинамика (М.: Изд. АН СССР, 1954) с.194, 288-289.
2. Фарадей М Избранные работы по электричеству (М.-Л.: ГОНТИ, 1939) с.193-196.
3. Эйнштейн А Эволюция физики (М.: ООО «Тайдекс Ко», 2005) с.134-139, 144-146, 209-212.
4. Тесла Н Лекции и статьи (М.: «Tesla Print», 2003) с.23-25.
5. Семиков С А Баллистическая теория Ритца и картина мироздания (Н. Новгород: ООО «Стимул-СТ», 2010).
6. Яворский Б М, Детлаф А А Справочник по физике (М.: «Наука», 1974) с.343.
7. Савельев И В Курс общей физики (СПб.: «Лань», 2008) Т.3, с.239-244.
8. Николаев Г В Современная электродинамика и причины ее парадоксальности. Перспективы построения непротиворечивой электродинамики (Томск: Изд-во «Твердыня», 2003).
9. Кочаровский В В, Кочаровский Вл В в сб. Физическая энциклопедия (Гл. ред. А М Прохоров) (М.: Советская энциклопедия, 1988) Т.5, с.519-531.
10. Фейнман Р Ф и др. Фейнмановские лекции по физике (М.: Издательство ЛКИ, 2010) Вып.6, с.270, 303.
11. Савельев И В Курс общей физики (СПб.: «Лань», 2008) Т.1, с.60-62.
12. Парселл Э М Курс общей физики (М.: Наука, 1971) Т.2, с. 36, 103.
13. Фарадей М Экспериментальные исследования по электричеству (М.: Изд. АН СССР, 1947) Т.1, с. 503-512.
14. Тамм И Е Основы теории электричества (М.: Наука, 1989) с. 68-69.
15. Ландсберг Г С и др. Элементарный учебник физики (М.: Физматлит, 2008) Т.2, с.24-27, 71-74.
16. Демирчян К С и др. Теоретические основы электротехники (СПб.: Питер, 2004) Т.3, с.51-52.
17. Яворский Б М, Детлаф А А Справочник по физике (М.: Наука, 1974) с.357, 358.
18. Герловин И Л Основы единой теории всех взаимодействий в веществе (Л.: Энергоатомиздат, 1990) с.12-15.
19. Гаврилов С Д, Степанец В А Проблемы безопасности и чрезвычайных ситуаций (№ 2, 2014) с.96-105.

РАЗДЕЛ III. ХИМИЯ

Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Влияние силового поля фуллерена на структурные и электронные характеристики двойной углерод-углеродной связимолекулы-гостя*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфимский
государственный авиационный технический университет
(Россия, Уфа)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-04

idsp: 000001:spc-16-01-2018-04

Аннотация

В рамках расчетного DFTприближения PBE/3 ζ на примере эндокомплекса тетрафторэтена с фуллереном C₅₂, показано, что силовое поле нанообъекта заметно меняет электронные и структурные характеристики молекулы-гостя, в частности, повышает порядок двойной углерод-углеродной связи и сокращает ее длину.

Ключевые слова: тетрафторэтен, фуллерен, порядок связи, компьютерное моделирование.

Abstract

In the frame of computational approximation PBE/3 ζ using endocomplex of tetrafluoroethene with fullerene C₅₂ as an example it has been shown that the force field of nanoobjectappreciably changes the electronic and structural parameters of guest molecule in particular increases the order of double carbon-carbon bond and cuts its length.

Keywords: tetrafluoroethene, fullerene, bond order, computer simulation.

Известно, что силовое поле фуллеренов оказывает заметное влияние на структурные и конформационные характеристики инкапсулированных молекул. В частности, компьютерное моделирование конформационной предпочтительности этана в полости фуллерена C₆₀ выявило заметное возрастание барьера внутреннего вращения, а также сокращение длин всех связей в молекуле [1]. В этом отношении представляет значительный интерес исследование влияния фуллеренов на гостевые молекулы с кратными связями. Целью настоящей работы является изучение влияния фуллерена C₅₂ на структурные изменения инкапсулированной молекулы тетрафторэтена с помощьюDFTрасчетного приближенияPBE/3 ζ (программный комплекс ПРИРОДА [2]).

В ходе оптимизации геометрии эндокомплекса C₂F₄@C₅₂произошло изменение первоначальной ориентации гостевой молекулы (рис. 1).

Рис. 1. Изменение ориентации гостевой молекулы C₂F₄ при расчете.

Плоскость молекулы тетрафторэтена развернулась на 900 (правая структура); именно данное положение отвечает минимуму энергии системы.

Полученные результаты свидетельствуют о заметных различиях в структурных и энергетических характеристиках молекул свободного (рис. 2) и заключенного в полость фуллерена (рис. 3) тетрафторэтена.

Рис. 2. Параметры свободной молекулы C_2F_4

$C_2F_4@C_{52}$

Рис. 3. Параметры молекулы C_2F_4 в эндокомплексе

Нетрудно видеть, что инкапсулированная молекула тетрафторэтена характеризуется заметным сокращением длин связей, а также увеличением порядка двойной связи по Малликену. Заметно возрастают и значения частичных зарядов на атомах углерода. В результате гостевая молекула C_2F_4 приобретает общий положительный заряд (0.36), хотя в целом система $C_2F_4@C_{52}$ остается электрически нейтральной. Данное явление наблюдается для всех ранее исследованных эндокомплексов малых молекул с фуллеренами [1] и нанотрубками [3], свидетельствуя о заметном переносе заряда с гостевой молекулы на остов наноструктуры.

Помимо этого, гостевая молекула теряет планарную структуру: атомы углерода приобретают пирамидальную конфигурацию (рис. 1), что наглядно отражается на значении торсионного угла FCCF (19.70), в отличие от свободной молекулы, где он равен нулю.

Таким образом, молекула тетрафторэтена в модельном фуллерене подвергается существенной структурной перестройке из-за воздействия силового поля нанобъекта. Это явление дополняет ранее выявленные примеры воздействия нанотрубок на инкапсулированные молекулы с одинарными [3] и кратными связями [4]; оно свидетельствует о том, что процессы, происходящие с инкапсулированными

молекулами, подобны воздействию специфического растворителя с необычными свойствами. Систематическое изучение данных явлений может привести к разработке теоретических основ создания новых материалов с практически полезными свойствами.

1. Кузнецов В.В. Теоретическая оценка конформационной предпочтительности молекулы этана в фуллерене C₆₀ // Журнал общей химии – 2013. Т. 83. № 6. С. 1033-1034.
2. 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.
3. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нано-трубках // Российский химический журнал. 2017. Т. 61. № 1. С. 37-47.
4. Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Действие силового поля нанотрубок на молекулы с кратными связями: структура тетрафторэтена в нанотрубке (4,4) // Научный вестник. 2017. № 2(12). С. 72-78.

Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

**Катионы в фуллеренах малого диаметра: примеры передачи заряда в
эндокомплексе**

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

doi:10.18411/spc-16-01-2018-05

idsp: 000001:spc-16-01-2018-05

Аннотация

В рамках расчетного DFT-приближения PBE/3 ζ на примерах протона и ионов некоторых металлов в фуллеренах малого диаметра исследована степень передачи заряда на инкапсулированную частицу со стороны оболочки наносистемы.

Ключевые слова: фуллерен, инкапсулированный ион, компьютерное моделирование, передача заряда.

Abstract

In the frame of computational DFT approximation PBE/3 ζ using encapsulated proton and ions of some metals in small fullerenes as an example it has been investigated the degree of charge transfer from the wall of nano object to the encapsulated particle.

Keywords: fullerene, encapsulated ion, computer simulation, charge transfer.

Заметный интерес к физико-химическим процессам, происходящим с соединениями внутри фуллеренов и нанотрубок обусловлен активным влиянием последних на строение, электронное состояние и реакционную способность инкапсулированных молекул [1]. В частности, компьютерное моделирование строения нейтральных молекул, химически не связанных с оболочкой наносистемы, показало, что такой субстрат приобретает электрический заряд за счет передачи последнего с оболочки фуллерена либо нанотрубки [2]. Очевидно, в случае инкапсулированной заряженной частицы этот процесс будет проявляться более отчетливо: так заряд оксониевого иона H₃O⁺ в полости фуллерена C₂₀ возрастает почти в семь раз (6.7 элементарного заряда) по сравнению с изолированным ионом [3]. В этой связи целью настоящей работы является изучение влияния природы иона и фуллерена на степень передачи заряда с оболочки наносистемы на инкапсулированную частицу. В качестве объектов исследования были выбраны эндокомплексы однозарядных ионов H⁺, Li⁺ и Na⁺ с фуллеренами C₂₀, Si₇C₁₃ и Si₂₀, а в качестве расчетного приближения – PBE/3 ζ (программный комплекс ПРИРОДА [4]).

На рисунке представлены отдельные исследованные эндокомплексы $X^+@$ фуллерен, а в таблице – значения заряда на инкапсулированном катионе.

Рисунок. Исследованные эндокомплексы $X^+@$ фуллерен

Кроме комплекса $H^+@C_{20}$ катион не реагирует с остовом фуллерена. Полученные результаты свидетельствуют о том, что во всех случаях величина заряда на катионе в эндокомплексе отличается от наблюдаемой для свободной частицы X^+ (+1). Установленные различия определяются как химическим составом фуллерена, так и природой самого катиона.

Заряд на инкапсулированном катионе в эндокомплексе

Эндокомплекс	Величина заряда	$\Delta q (q_{\text{своб.}} - q_{\text{эндо}})$
$H^+@C_{20}$	0.1074	0.8926
$H^+@Si_{20}$	0.0906	0.9094
$Li^+@C_{20}$	0.5712	0.4288
$Na^+@C_{20}$	10.6537	-9.6537
$Li^+@Si_7C_{13}$	-0.0494	1.0494

Значения заряда протона и катиона лития однозначно уменьшаются за счет передачи электронной плотности со стенок фуллерена на инкапсулированную частицу, причем в случае комплекса $Li^+@Si_7C_{13}$ заряд на катионе становится отрицательным ($\Delta q > 1$). Однако при увеличении линейного размера катиона (Na^+) его заряд возрастает более чем в 10 раз, аналогично наблюдаемому для эндокомплекса $H_3O^+@C_{20}$ [3]. По всей видимости, это обусловлено влиянием особенностей несвязанных взаимодействий инкапсулированного катиона с атомами фуллереновой оболочки; дальнейшее исследование последних требует увеличения числа примеров эндокомплексов $X^n+@$ фуллерен, включая многозарядные катионы и фуллерены большего размера.

1. Manzetti S. Molecular and crystal assembly inside the carbon nanotube: encapsulation and manufacturing approaches // *Advances in Manufacturing*. 2013. V. 1. № 3. P. 198-210.
2. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нано-трубках // *Российский химический журнал*. 2017. Т. 61. № 1. С. 37-47.
3. Кузнецов В.В. Оксониевый ион в фуллеренах малого диаметра // *Научный вестник* – 2016. - № 4(10). С. 118-125.
4. 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.

Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Трансформация молекулы диалана, Al_2H_4 , внутри нанотрубки (7,0)

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

doi:10.18411/spc-16-01-2018-06

ids: 000001:spc-16-01-2018-06

Аннотация

В рамках расчетного DFT-приближения PBE/3 ζ показано, что молекула диалана в полости нанотрубки (7,0) претерпевает изомеризацию и превращается в новую форму, не существующую в свободном виде.

Ключевые слова: диалан, нанотрубка, изомеризация, компьютерное моделирование.

Abstract

Using DFT approximation PBE/3 ζ it has been shown that the molecule of dialane inside nanotube (7,0) undergoes isomerization into new form that cannot exist in the free state.

Keywords: dialane, nanotube, isomerization, computer simulation.

Известно, что силовое поле нанотрубок оказывает существенное влияние на структурные и конформационные характеристики инкапсулированных молекул. В частности, компьютерное моделирование строения этана в полости нанотрубок различной хиральности выявило нетривиальный эффект: инверсию относительной стабильности шахматной и заслоненной форм; последняя становилась главным минимумом на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) [1]. С другой стороны, молекула диалана, Al_2H_4 , впервые полученного в работе [2], является удобным модельным соединением для оценки взаимодействия двух планарных фрагментов со связью металл-металл в электрон-дефицитной системе. В этой связи целью настоящей работы является изучение влияния модельной нанотрубки (7,0) на структурные изменения инкапсулированной молекулы диалана, с помощью DFT-расчетного приближения PBE/3 ζ (программный комплекс ПРИРОДА [3]).

Расчеты в приближении DFT [2] показали, что минимуму на ППЭ свободной молекулы Al_2H_4 отвечает ортогональная форма А. Результаты расчетов в настоящей работе также свидетельствуют об относительной выгодности этого конформера; его геометрические параметры близки к полученным в работе [2] (рис. 1).

Рис. 1. Структурные параметры свободной молекулы Al_2H_4

Засчет вращения вокруг связи Al-Al форма А превращается в свой энантиомер через переходное состояние, отвечающее планарной конформации В. Торсионный угол H-Al-Al-H в формах А и В составляет 86.90 и 00 соответственно (рис. 2).

Рис. 2. Конформационные превращения свободной молекулы Al_2H_4

Предполагалось, что молекула Al_2H_4 (форма А) в полости нанотрубки (7,0) в ходе оптимизации геометрии данной системы будет оставаться неизменной либо поменяет свою конформацию подобно этану [1]. Однако после первоначального превращения в форму В последняя в ходе дальнейшей оптимизации геометрии системы превратилась в новую форму С, не известную для этой молекулы в свободном виде (рис. 3).

Рис. 3. Изомеризация молекулы диалана в эндокомплексе $Al_2H_4@C(7,0)$

Гессиан данной формы не содержит мнимых частот. Таким образом, она является единственным минимумом на ППЭ эндокомплекса $\text{Al}_2\text{H}_4@ (7,0)$. Однако изомер С, сам по себе, вне нанотрубки, является неустойчивой структурой и в ходе оптимизации геометрии необратимо превращается в форму D (рис. 4).

Рис. 4. Изомеризация конформера С вне нанотрубки

Гессиан асимметричного изомера D не содержит мнимых частот. Однако он не является главным минимумом на ППЭ молекул свободного диалана.

Относительные энергии молекулярных форм свободного диалана (PBE/3 ζ)

Форма	ΔE_0^0 ($\Delta E_0^{\neq}$) ккал/моль	ΔH_{298}^0 ($\Delta H_{298}^{\neq}$) ккал/моль	ΔG_{298}^0 ($\Delta G_{298}^{\neq}$) ккал/моль	ΔS_{298}^0 ($\Delta S_{298}^{\neq}$) кал/моль К	r_{Al-Al} , Å
A	0	0	0	0	2.604
B	(2.3)	(1.9)	(2.5)	(-1.9)	2.638
D	6.6	6.4	7.0	-2.0	2.386

Согласно данным таблицы последний принадлежит изомеру А. Форма В хоть и отвечает переходному состоянию (данные в скобках), однако отличается относительно невысоким энергетическим барьером. В то же время изомер D, хоть и является минимумом, характеризуется весьма высокими значениями относительной энергии и достаточно короткой длиной связи Al-Al (r_{Al-Al}).

Таким образом, изомеризация молекулы диалана в модельной нанотрубке из-за воздействия силового поля приводит к форме, энергетическая стабилизация которой возможна только внутри нанобъекта. Это явление свидетельствует о том, что процессы, происходящие с инкапсулированными молекулами, достаточно уникальны. Их изучение может привести к разработке теоретических основ создания наноматериалов с необычными ценными свойствами.

1. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нанотрубках // Российский химический журнал. 2017. Т. Т. 61. № 1. С.37-47.
2. Wang X., Andrews L., Tam S., DeRose M.E., Fajardo M.E. Infrared Spectra of Aluminum Hydrides in Solid Hydrogen: Al₂H₄ and Al₂H₆// Journal of the American Chemical Society. 2003. V. 125. № 30. P. 9218-9228.
3. 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.

Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Конформационные превращения молекулы глиоксали в нанотрубке (7,0)

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

doi:10.18411/spc-16-01-2018-07

idsp: 000001:spc-16-01-2018-07

Аннотация

В рамках расчетного DFT-приближения PBE/3 ζ показано, что конформационные превращения глиоксали в полости нанотрубки (7,0) характеризуются заметным изменением структуры основного состояния по сравнению со свободной молекулой и более чем двукратным возрастанием потенциального барьера вращения.

Ключевые слова: глиоксаль, нанотрубка, конформационный анализ, компьютерное моделирование.

Abstract

Using DFT approximation PBE/3 ζ it has been shown that the conformational transformation of oxalic aldehyde inside nanotube (7,0) is characterized by appreciable change in structure in comparison with free molecule and more than two-fold growth of internal rotational barrier.

Keywords: oxalic aldehyde, nanotube, conformational analysis, computer simulation.

Глиоксаль – диальдегид щавелевой кислоты – является ценным соединением для материалов фармацевтики, текстильной, металлургической, нефтяной промышленности

и строительства. Помимо этого, данное соединение является удобной моделью для анализа пространственного взаимодействия двух соседних карбонильных групп. Конформационный анализ глиоксаля показал, что наиболее стабильной является транс-форма А; барьер перехода в цис-форму В (переходное состояние С) составляет 6.8 ккал/моль. Конформер В является локальным минимумом и отличается от формы А на 5.86 ккал/моль [1]. С другой стороны, известно, что нанотрубки активно воздействуют на химически не связанные с ними соединения, помещенные во внутреннюю полость, заметно влияя на изменение структурных и конформационных свойств молекулы-гостя. В частности, компьютерное моделирование строения этана в полости нанотрубок различной хиральности выявило необычный эффект: инверсию относительной стабильности шахматной и заслоненной форм; последняя становилась главным минимумом на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) [2].

В силу всего сказанного целью настоящей работы является исследование влияния модельной нанотрубки (7,0) на структурные и конформационные свойства инкапсулированной молекулы глиоксаля с помощью DFT-расчетного приближения PBE/3 ζ (программный комплекс ПРИРОДА [3]).

Моделирование конформационных превращений глиоксаля проводилось за счет вращения вокруг связи С-С (сканирование торсионного угла Н-С-С-О). При этом форма А превращается в конформер В через переходное состояние, отвечающее ортогональной конформации С (рис. 1). Результаты расчетов в настоящей работе подтверждают относительную выгодность формы А; энергетические параметры соответствующих конформационных превращений близки к полученным в работе [1] (таблица).

Рис. 1. Конформационные превращения свободной молекулы глиоксаля

Торсионный угол Н-С-С-О в планарном конформере А равен нулю, а для конформации С составляет 75.60. Длина С-С связи в данной форме (1.538 Å) немного превышает соответствующее значение для конформера А.

Расчетные геометрические и электронные параметры формы А свободной молекулы глиоксаля представлены на рис. 2.

Рис. 2. Структурные параметры свободной молекулы $C_2H_2O_2$ (форма А)

В случае эндокомплекса $C_2H_2O_2@(7,0)$ конформер А также отвечает главному минимуму на поверхности потенциальной энергии. Однако его структурные параметры заметно меняются (рис. 3).

Рис. 3. Структурные параметры молекулы $C_2H_2O_2(A)$ в эндокомплексе

Укорачивается связь C-C, немного увеличивается длина C=O связи, заметно меняются порядки связей по Малликену и частичные заряды на атомах углерода и кислорода. В результате инкапсулированная молекула приобретает небольшой (0.0695) положительный заряд. Однако наиболее заметные различия касаются энергетического профиля конформационных превращений молекулы глиоксаля (табл.).

Относительные энергии молекулярных форм глиоксаля (PBE/3ζ)

Форма	ΔE_0^0 ($\Delta E_0^\ddagger$) ккал/моль	ΔH_{298}^0 ($\Delta H_{298}^\ddagger$) ккал/моль	ΔG_{298}^0 ($\Delta G_{298}^\ddagger$) ккал/моль	ΔS_{298}^0 ($\Delta S_{298}^\ddagger$) кал/моль К
$C_2H_2O_2$				
A	0	0	0	0
B	4.0	4.0	3.7	0.9
C	(5.1)	(4.8)	(5.5)	(-2.4)
$C_2H_2O_2@(7,0)$				
A	0	0	0	0
B	8.9	8.7	9.7	-3.5
C	(13.4)	(12.8)	(14.7)	(-6.2)

Согласно данным таблицы потенциальный барьер внутреннего вращения вокруг C-C связи ($\Delta G_{298}^\ddagger$) в эндокомплексе увеличивается в 2.67 раза. Примерно во столько же возрастает и относительная энергия локального минимума В. Полученные результаты дают основание полагать, что силовое поле нанотрубки дополнительно

стабилизирует транс-конформер А, вероятно, за счет изменения конфигурации молекулярных орбиталей из-за электронных взаимодействий с остовом нанотрубки.

1. Osamura Y., Schaefer H.F. Internal rotation barrier and transition state for glyoxal // Journal of Chemical Physics. 1981. V. 74. № 8. P. 4576-4580.
2. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нанотрубках // Российский химический журнал. 2017. Т. Т. 61. № 1. С.37-47.
3. 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.

Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Ацетилен в фуллерене C₆₀: пример взаимодействия силового поля наноструктуры с тройной углерод-углеродной связью

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

doi:10.18411/spc-16-01-2018-08

idsp: 000001:spc-16-01-2018-08

Аннотация

В рамках расчетного DFT-приближения PBE/3 ζ на примере эндокомплекса ацетилена с фуллереном C₆₀, показано, что силовое поле нанобъекта меняет электронные и энергетические характеристики гостевой молекулы, в частности, понижает порядок тройной углерод-углеродной связи и сокращает ее длину.

Ключевые слова: ацетилен, фуллерен, порядок тройной связи, компьютерное моделирование.

Abstract

In the frame of computational DFT approximation PBE/3 ζ using endocomplex of acetylene with fullerene C₆₀ as an example it has been shown that the force field of nanoobject changes the electronic and structural parameters of guest molecule, in particular, decreases the order of triple carbon-carbon bond and cuts its length.

Keywords: acetylene, fullerene, order of triple bond, computer simulation.

Влияние силового поля фуллеренов на структурные и конформационные характеристики инкапсулированных молекул наглядно демонстрируется примером заметного возрастания барьера внутреннего вращения, а также сокращения длин всех связей молекулы этана в фуллерене C₆₀[1]. В этом отношении представляет значительный интерес исследование эндокомплексов фуллеренов с гостевыми молекулами, содержащими кратные связи. Целью настоящей работы является изучение влияния фуллерена C₆₀ на структурные изменения инкапсулированной молекулы ацетилена с помощью DFT-расчетного приближения PBE/3 ζ (программный комплекс ПРИРОДА [2]).

Полученные результаты свидетельствуют о заметных различиях в структурных и энергетических характеристиках молекул свободного (рис. 1) и заключенного в полость фуллерена (рис. 2) ацетилена.

Как и в других случаях [1] силовое поле фуллерена «сжимает» инкапсулированную молекулу, приводя к заметному сокращению длин связей. Помимо этого, существенно уменьшается порядок тройной связи по Малликену и значения отрицательных зарядов на атомах углерода. Положительный заряд на водородных атомах, наоборот, возрастает. В результате молекула ацетилена в полости фуллерена

приобретает результирующий положительный заряд (0.32), хотя в целом система $C_2H_2@C_{60}$ остается электрически нейтральной. Данное явление наблюдается для всех ранее исследованных эндокомплексов малых молекул с фуллеренами [1] и нанотрубками [3], свидетельствуя о заметном переносе заряда с гостевой молекулы на остов наноструктуры.

Рис. 1. Параметры свободной молекулы C_2H_2

Рис. 2. Параметры молекулы C_2H_2 в эндокомплексе

Таким образом, молекула ацетилена в модельном фуллерене в результате структурной перестройки приобретает новые свойства, которые можно использовать для осуществления разнообразных химических реакций в полости наноструктуры с целью синтеза новых практически полезных материалов.

1. Кузнецов В.В. Теоретическая оценка конформационной предпочтительности молекулы этана в фуллерене C_{60} // Журнал общей химии – 2013. Т.83. № 6. С.1033-1034.
2. 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.
3. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нанотрубках // Российский химический журнал. 2017. Т. 61. № 1. С.37-47.

РАЗДЕЛ IV. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Гусева М.А., Андреева Е.Г., Петросова И.А., Гетманцева В.В.,
Корячихина М.А., Калинина Л.М.

**Современные технические решения модификации поверхности манекенов фигур
человека для совершенствования процесса проектирования одежды**

ФГБОУ ВО РГУ им. А.Н.Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство)
(Россия, Москва)

doi:10.18411/spc-16-01-2018-09

idsp: 000001:spc-16-01-2018-09

Аннотация

В статье представлен анализ современных технических решений преобразования поверхности манекенов фигур человека для совершенствования процесса проектирования швейных изделий. Проанализированы результаты применения технологии трехмерного сканирования для исследования антропоморфной характеристики индивидуальных фигур и перспективность использования модифицированных манекенов в условиях виртуальных примерок.

Ключевые слова: манекены фигур, технологии трехмерного сканирования, пространственная форма, преобразование поверхности.

В производственный цикл швейного предприятия включен обязательный этап анализа проектных решений [1] - примерка макетов [2] для установления антропометрического соответствия [3] образцов проектируемых изделий и улучшения качества выпускаемой продукции устранением дефектов посадки [4]. Посадку определяет соответствие формы и размеров внутренней поверхности швейного изделия конфигурации опорной поверхности [5] тела.

Современные отечественные швейные предприятия, как правило, выпускают одежду типовых конструкций [6] на равновесные фигуры [7] первой и второй полнотных групп [8-9]. При этом потребителям нетипового телосложения сложно подобрать себе гардероб из-за несоответствия габаритов одежды индивидуальным антропологическим особенностям [10]. Поэтому для совершенствования процесса проектирования одежды актуальными остаются научные исследования в области топографических преобразований типовых портновских манекенов.

Модернизацией поверхности типовых манекенов заинтересовались еще в XX веке. Учеными были предложены разъемные [11], надувные [12], раздвижные [13] и динамические [14] манекены, имитирующие пространственную форму фигуры человека. Манекены с преобразованной поверхностью необходимы для оценки эргономических характеристик изделия, динамических эффектов, а также для поиска пространственной формы модели сложного конструктивного решения методом макетирования [2]. Недостатками перечисленных модифицированных манекенов являются: дискретная поверхность [13], снижающая результативность оценки качества проектных работ; узкий диапазон персонификации преобразований модифицированных манекенов [11, 12], не учитывающих такие характеристики как разворот плеч, форму и положение рук и ног, форму грудных желез, изменение размеров тела по полнотным группам [15].

С расширением класса потребителей, заинтересованных в приобретении одежды высокого качества посадки, сформировалась потребность в модернизации портновских манекенов типовых фигур. Современные швейные предприятия предлагают услуги индивидуального пошива, при этом, для оптимизации процесса

производства исключением многочисленных и длительных примерок, постоянных клиентов заинтересовывают изготовлением индивидуальных манекенов на основе 3D сканирования фигур [16]. Однако, высокая стоимость изготовления индивидуальных манекенов снижает популярность таких услуг.

На кафедре художественного моделирования, конструирования технологии швейных изделий РГУ им. А.Н.Косыгина предложена прогрессивная технология модификации поверхности типового манекена съемной накладкой, имитирующей рельеф поверхности тела индивидуальной фигуры [17]. Внутренняя оболочка съемной накладки повторяет контур типового манекена, а внешняя – конфигурацию торса индивидуальной фигуры. Поиск пространственной формы съемной накладки проводился с применением технологии трехмерного сканирования [18] типового манекена и тела индивидуальной фигуры. При совмещении виртуальных моделей [19] по основным антропометрическим точкам (рис. 1) визуально оценивался рельеф обоих манекенов, и определялись участки для модификации.

Рисунок 1 – Совмещение виртуальных типовой и индивидуальной фигур для анализа рельефа поверхности

Анализ сечений совмещенных виртуальных типовой и индивидуальной фигур (рис. 2а) позволил получить пространственные характеристики (рис. 2б) для преобразования типового манекена (рис. 2в) съемной накладкой (рис. 2г), адресно имитирующей поверхность тела.

Рисунок 2 – Иллюстрация технологии модернизации поверхности типового манекена по параметрам индивидуальной фигуры

Технология совмещения позволяет получить достоверную сравнительную характеристику рельефов поверхностей на любом участке обеих фигур (рис. 3) и обосновать необходимость введения дополнительных формообразующих элементов (вытачки, членения) в конструкцию одежды, доводя, тем самым качеством ее посадки до высокого.

Применение разработанной технологии преобразования электронных типовых манекенов показывает хорошие результаты при он-лайн виртуальных примерках [20]. Внесение изменений в конструктивные решения моделей одежды, предлагаемых интернет-магазинами, выполнимо после анализа совмещенных сечений фигур и определения отклонений параметров потребителя от типовых значений по данным сканирования. Визуализация посадки одежды при этом выполняется совмещением

виртуальных образов фигуры и изделия с учетом физико-механических свойств материалов [21]. Анализ качества посадки виртуального изделия на сгенерированной электронной поверхности индивидуальной фигуры оценивается как проектировщиком в диалоговом режиме, так и потребителем при он-лайн примерках.

Рисунок 3 – Модификация виртуального манекена по форме ног: а – фигура с Х-образной формой ног; б – фигура с О-образной формой ног

Таким образом, применение съемных накладок для модификации поверхности типового манекена – целесообразная альтернатива дорогостоящим пенополиуретановым манекенам индивидуальных фигур.

1. Андреева Е.Г., Петросова И.А. Методология оценки качества проектных решений одежды в виртуальной трехмерной среде. - Москва, 2015.
2. Гусева М.А., Чижова Н.В., Петросова И.А., Андреева Е.Г., Гетманцева В.В. Разработка конструкций швейных изделий сложных форм методом макетирования: Учебное пособие. – М.: МГУДТ, 2016.- 81 с.
3. Гусева М.А., Андреева Е.Г. Анализ антропометрического соответствия современной меховой одежды из промышленных коллекций. // Международный научно-исследовательский журнал (Research Journal of International Studies), 2016. № 5-3 (47). с.78-81.
4. Петросова И.А., Андреева Е.Г. Мерчендайзинг, оценка качества посадки и выбор готовой одежды, соответствующей фигуре потребителя в виртуальной среде. // В сборнике: Современные задачи инженерных наук сборник научных трудов Международного научно-технического симпозиума. Москва, 2017. С. 140-145.
5. Гусева М.А., Андреева Е.Г., Петросова И.А. Преобразование поверхности манекена для проектирования внутренней формы мехового изделия. // В книге: Научные исследования и разработки в области конструирования швейных изделий./ Андреева Е.Г., Лунина Е.В., Петросова И.А., Гусева М.А., Гетманцева В.В., Базаев Е.М., Шпачкова А.В., Чижова Н.В., Степанищева А.Н., Гуторова Н.В., Киселева М.В., Руднева Т.В., Никитина Н.В. Москва, 2016. С. 58-78.
6. Гусева М.А., Петросова И.А., Андреева Е.Г., Гетманцева В.В. Проектирование типовых конструкций поясной и плечевой одежды. Учебное пособие.: – М.: РГУ им. А.Н.Косыгина, 2018.
7. Андреева Е.Г., Гусева М.А., Петросова И.А., Рогожин А.Ю. Антропометрические исследования для конструирования одежды. Лабораторный практикум по размерной антропологии и биомеханике - М.: МГУДТ, 2015. - 164 с.
8. ГОСТ 31396-2009 Классификация типовых фигур женщин по ростам, размерам и полнотным группам для проектирования одежды / введ. 30.06.2010. – М.: Стандартиформ, 2011. -18 с.
9. ГОСТ Р 52774-2007. Классификация типовых фигур мужчин по ростам, размерам и полнотным группам для проектирования одежды.- М.: Стандартиформ, 2008.- 22 с.
10. Коряхихина М.А., Калинина Л.М., Рогожина Ю.В. Анализ ассортиментного ряда манекенов фигур человека. // Международный студенческий научный вестник. - 2017. - №6.
11. Булатова Е.Б., Семенов А.Г. Разъемный манекен для проектирования и демонстрации одежды. Патент RU 2 076492C1. Заяв. № 9494036287, 28.09.1994.
12. Бескоровайная Г.П., Савельева Н.Ю. Манекен для примерки одежды. Патент RU 2 114541C1. Заяв. № 97112986/12, 29.07.1997. Оpubл. 10.07.1998.
13. Эстонцы решили проблему интернет-магазинов. Видео программы «Сегодня. НТВ». URL: <http://www.ntv.ru/video/250552/> (дата обращения 30.10.2017).
14. Гусева М.А., Рогожин А.Ю. Динамический манекен с макетами рук. Патент на изобретение RUS 2303382 27.09.2005. Бюл. № 21.
15. Рогожин А.Ю., Гусева М.А., Андреева Е.Г., Петросова И.А. Основы прикладной антропологии и биомеханики. Конспект лекций. – М.: РГУ им. А.Н.Косыгина. 2017. – 154 с.
16. Портновские манекены Royal Dress forms. Официальный сайт. URL: <http://www.royaldressforms.ru/> (дата обращения 30.10.2017).

17. Гусева М.А., Хмелевская А.Г., Гусев И.Д. Съемная накладка на типовой манекен для имитации формы поверхности тела индивидуальной фигуры человека. Патент на полезную модель RU 156 812 U1. от 21.05.2015. Оpubл. 20.11.2015 Бюл. № 32.
18. Петросова И.А., Андреева Е.Г. Разработка технологии трехмерного сканирования для проектирования виртуальных манекенов фигуры человека и 3D моделей одежды. - Москва, 2015.
19. Гусева М.А., Андреева Е.Г., Петросова И.А. Способ проектирования конструкций одежды на основе совмещения виртуальных образов типовой и индивидуальной фигур. Заявка № 2017111453 от 05.04.2017.
20. Андреева Е.Г., Петросова И.А., Гусева М.А., Шанцева О.А. Анализ существующих способов проведения виртуальной примерки. // В сборнике: Материалы докладов 50-й международной научно-технической конференции преподавателей и студентов, посвященной году науки 50-я международная научно-техническая конференция: в 2-х томах. 2017. С. 142-145.
21. Гетманцева В.В., Гончарова А.С., Никитина Н.Г., Андреева Е.Г. Влияние показателей физико-механических свойств тканей на пространственную форму плечевого изделия// Известия вузов. Технология текстильной промышленности. - 2011, № 6. С.88-94.

Рябова А.А.

**Внедрение элементов искусственного интеллекта в информационные
системы управления**

*ФГБОУ ВПО «РЭУ им. Г.В. Плеханова» филиал в г. Пятигорске
(Россия, Пятигорск)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-10

idsp: 000001:spc-16-01-2018-10

Аннотация

В статье исследованы вопросы разности понимания искусственного и естественного интеллекта в процессе принятия решения.

Приведен пример внедрения элементов искусственного интеллекта в информационную системы по выбору смартфона.

Abstract

In the article questions of difference of understanding of artificial and natural intelligence in the decision-making process are investigated.

An example of the introduction of artificial intelligence elements into the information system for choosing a smartphone is given.

Искусственный интеллект (ИИ) сегодня одно из важнейших направлений исследований ученых и инженеров. Причем рассматриваются как системы, созданные с его частичным использованием: например распознавание текстов, бытовые роботы, до возможности полной замены творческого труда человека искусственным. В настоящее время в самых различных областях науки и техники требуется автоматическое выполнение тех задач, которые раньше под силу были только человеку. Сегодня системы, как программные, так и аппаратные, созданные на основе искусственного интеллекта находят все большее применение в технике. Это и автопилотируемые автомобили с электроникой с использованием ИИ, и новейшие роботы, участвующие в производстве чего-либо, и компьютерные программы, которые включают ИИ в качестве советующих или систем поддержки принятия решений.

На современном этапе развития исследований в этой области до создания систем полного ИИ довольно далеко, поэтому нам приходится ограничиваться лишь частичным вмешательством ИИ в интеллектуальные системы. Это, прежде всего, программные средства. Например, экспертные системы, системы распознавания образов и др.

Среди многих точек зрения касательно вопроса понятия ИИ преобладают следующие три:

1) фундаментальные исследования, в процессе которых разрабатываются новые модели и методы для решения задач, считающихся интеллектуальными и не поддававшихся ранее формализации и автоматизации.

2) исследования, связанные с новыми идеями решения задач на ЭВМ, с разработкой новых технологий программирования и переходом к компьютерам не фон-неймановской архитектуры.

3) исследования, в процессе которых появляется множество прикладных систем, способных решать задачи, для которых ранее создаваемые системы были не пригодны.

Чтобы облегчить понимание такого явления как искусственный интеллект, выявим его признаки на основе сравнения двух основных видов интеллекта - естественного (интеллекта человека) и искусственного. Как известно, понятие интеллект отождествляют с понятием мышления. Если говорить об интеллекте человека, это утверждение верно, однако, в случае искусственного - не совсем.

Как естественный, так и искусственный интеллект использует различные типы информационных единиц - признаки, понятия или концепты, образы, модели и пр. При этом существует значительное различие в способах реализации и возможностях этих двух видов интеллекта.

Процесс восприятия информации у человека можно представить в виде цепочки следования: семантизация понятий > понимание > получение выводов.

В процессе восприятия и понимания информации у человека возникает представление о проблемной ситуации, т.е. ментальная модель, которая позже может быть преобразована в более формализованный вид.

Что касается искусственного интеллекта, то в процессе принятия решения интеллектуальной системой отсутствует этап понимания, а, следовательно, речь идет уже не об интеллекте, а о моделях реализации интеллекта. Это существенное различие и составляет грань между интеллектом человека и искусственным интеллектом.

Таким образом, искусственная интеллектуальная система, обладающая механизмами искусственного мышления, получает возможность упорядочивать и корректировать свои знания. Осуществляя повторный неоднократный ввод хранящейся в памяти информации, снова распознавая и сравнивая ее с содержимым памяти, тем самым выполняет неоднократный просмотр и коррекцию формируемых внутри образов (моделей внешнего мира) в непрерывном потоке информации. В действительности же, процесс осознания представляет собой ассоциативное воспоминание с обновлением и требует периодического распознавания информации, представляющей внутренне состояние и внешнюю среду.

Реализация подобных возможностей предполагает необходимость обеспечения следующих функций человеко-машинного интерфейса:

- поддержание диалога на уровне естественного языка с речевым и символьным вводом/выводом;
- ввод и адекватное восприятие естественно-языковых целеуказаний и команд оператора на выполнение требуемых прикладных задач;
- объяснение принимаемых решений на уровне естественного языка;
- естественно-языковое обучение понятиям и общим закономерностям, признакам объектов и ситуаций, правилам целесообразного поведения в типовых ситуациях.

Требования к функциям интеллектуальной системы определяются необходимостью достоверной идентификации текущего состояния среды для построения адекватной модели ситуации выбора и последующего принятия решений о рациональном порядке выполнения поставленной прикладной задачи. При этом очевидно, что эффективность функционирования интеллектуальной системы

управления выбором будет во многом зависеть от заложенного набора ее возможностей, включая:

- сбор и выполнение предварительной обработки различных видов информации о текущем состоянии и воздействиях;
- распознавание образов;
- способность к оперативному обучению средств распознавания;
- способность отслеживать заданные типы объектов или изменений внешней среды с идентификацией их параметров.

Для подтверждения идей и теорий, изложенных выше, автором была поставлена задача разработки и реализации модели интеллектуальной системы по выбору смартфона. Работа выполнялась студентом 4 курса специальности «Информационные системы и технологии» ФГБОУ ВПО «РЭУ им. Г.В. Плеханова» филиал в г. Пятигорске Машином Алексеем под руководством автора.

Если не следить за рынком обновления смартфонов постоянно, то может быть затруднительно выбрать подходящий смартфон. Представленная интеллектуальная система может дать ответы на самые важные вопросы по выбору смартфона. С ее помощью можно узнать, как выбрать смартфон, подходящий именно вам, какой смартфон лучше купить в 2017-2018 году, а также как сэкономить на покупке.

В процессе исследования предметной области были выявлены самые распространённые ошибки при выборе смартфона. Например, что если в смартфоне стало вдвое больше ядер процессора и оперативной памяти, увеличилось разрешение экрана и количество мегапикселей камеры, то он обязательно будет лучше. Это не совсем так. Результаты тестов смартфонов, после проверки устройств в лаборатории и при ежедневном использовании, наглядно показали, что многие параметры и характеристики не влияют на качество смартфона напрямую. Поэтому, если у вас смартфон прошлого или позапрошлого года, то совершенно необязательно менять его именно из-за «устаревших» характеристик.

Благодаря данной системе может быть подобран самый оптимальный вариант смартфона, исходя из запросов конкретного пользователя. Это поможет избежать переплаты за смартфон т.е. избежать покупки дорогого смартфона, если требуется смартфон ограниченного функционала.

При решении задачи был выбран метод ветвей и границ. Данный метод является одной из первых эффективных схем неявного перебора, идея которого состоит в том, что при решении задачи можно избежать полного перебора путем отбрасывания заведомо неоптимальных решений.

Идея метода состоит в следующем: решая задачу, необходимо разложить ее решение на множество возможных вариантов. В результате становится возможным отбрасывать решения целыми классами, если в них уже нет необходимости.

На рисунке 1 представлена функциональная модель системы.

Интерфейс приложения для реализации модели интеллектуальной системы представляет собой кнопочную систему управления. Работа в системе выглядит следующим образом:

1. Выбор одного из предложенных вариантов ответов.
2. После выбора остальные варианты отбрасываются.
3. Далее необходимо повторять первый пункт, пока не будет предложен оптимальный вариант смартфона.

В итоге подбирается самый подходящий смартфон на основе этих действий.

Для реализации этой идеи использовалась среда программирования Delphi, так как в алгоритме используются и алгебраические операции, и операции логики, необходимо использовать универсальный язык программирования, например: Pascal, Java, C++.

В самом начале подбора смартфона следует выбрать по каким критериям будет производиться выбор. На рисунке 2 представлены критерии.

Рисунок 1 - Функциональная модель системы

☒ Операционная система	☒ Тип экрана	☒ Материал корпуса	☒ Камера
☒ Диагональ экрана	☒ Разрешение экрана	☒ Память смартфона	☐ Выбрать все

Рисунок 2 - Выбор критериев отбора смартфона

В качестве примера рассмотрим критерий - операционная система (ОС). Для ознакомления с особенностями данных ОС необходимо нажать на интересующее вас название, как показано на рисунке 3. После это в правой части формы отобразится краткая информация о выбранной ОС. Если пользователь не знает, что такое ОС, то система придет на помощь по нажатию на кнопку «Что такое ОС?»

Рисунок 3 - Выбор операционной системы смартфона

Далее можно выбрать интересующую диагональ будущего устройства, как показано на рисунке 4. По нажатию на изображение необходимой диагонали смартфона отображается краткая информация о данной диагонали.

Рисунок4 -Выбор диагонали устройства

Для ознакомления с особенностями предпочитаемых данных материалов корпуса смартфона необходимо нажать на интересующее название, как показано на рисунке 5. После это появится краткая информация о выбранном материале корпуса. Если пользователь затрудняется в выборе, то по нажатию на кнопку «помощь», система подскажет необходимую информацию.

Рисунок5 -Поле выбора материала корпуса

После выбора всех характеристик критериев отбора смартфона необходимо нажать на кнопку «Выбор смартфона».

Далее системой будет произведен выбор самого оптимального смартфона, исходя из критериев отбора. Пример представлен на рисунке 6. Если пользователь захочет купить выбранный смартфон, то по нажатию на его название система перенаправит пользователя на сайт интернет-магазина, где он сможет произвести покупку подобранного смартфона.

Название модели	Цена	Операционная система	Диагональ дисплея	Тип экрана	Разрешение экрана	Материал корпуса	Объем памяти	Слот SD карты	Основная камера	Фронтальная камера	Стабилизатор изображения	Двойная камера	Емкость батареи
iPhone X	91950	iOS	5,8	AMOLED	2436x1125	Метал	256	Нет	12	7	Да	Да	2700

Рисунок 6–Пример выбранного смартфона

В конечном итоге система должна помочь потенциальным покупателям выбрать смартфон, который полностью соответствует их запросам.

1. Иноземцева С.А., Коновцова М.М., Рябова А.А., Черкалина Н.А., Баранов Р.Д. Информационные ресурсы и системы. Учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлениям подготовки 230400 "Информационные системы и технологии", 230700 "Прикладная информатика". - Пятигорск: РИА на КМВ, 2014.-160 с.
2. Интеллектуальные информационные системы и технологии [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Ю.Ю. Громов [и др.].— Электрон.текстовые данные.— Тамбов: Тамбовский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2013.— 244 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/63850.html>.— ЭБС «IPRbooks»

Чернов А.П., Князев В.Н.
Вопросы разработки табличных процессоров

*Пензенский государственный университет
(Россия, Пенза)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-11

idsp: 000001:spc-16-01-2018-11

В последнее время формат языка XML, наряду с JSON, стал одним из наиболее распространённых форматов для хранения структурированных данных. XML (расширяемый язык разметки) вобрал в себя все преимущества языка SGML, правила формальной корректности и простоту разметки свободной формы. Однозначная структура и интуитивно понятный синтаксис — это те качества, которые позволяют использовать язык XML для обработки данных в программах. [1,2]

Язык XML применяется в большом числе программ, из которых можно выделить офисный пакет Microsoft Office, подразумевающий хранение данных документов в виде Office Open XML, представляющего из себя архив, в котором хранятся XML файлы с данными, графика и другие объекты. Именно задача эффективной работы с Office Open XML- файлами ставится в данной работе.

К разрабатываемому табличному процессору для операционной системы специального назначения предъявляются следующие требования:

- быстроедействие;
- оптимальное использование ресурсов;
- сохранение пользовательских данных: исходя из того, что на реализацию полного функционала, аналогичного MS Excel, потребуется время, необходимо организовать работу таким образом, чтобы работа с документом не приводила к потере данных из-за нереализованного функционала.

В процессе разработки табличного процессора возникла проблема с объёмом памяти, занимаемым объектным представлением XML- структуры документа. Так как разработка ведётся на языке C# с использованием уже существующих библиотек, определяющих специфику языка разработки, было установлено, что стандартные средства библиотеки System.XML не соответствуют требованиям по оптимальному использованию оперативной памяти. Дальнейшее решение проблемы требовало вникания в суть проблемы и рассмотрения возможных вариантов решения проблемы.

Для того, чтобы прочитать либо записать информацию на языке XML программе необходим соответствующий инструментарий. Программные модули, применяющиеся для чтения и записи XML, называются XML-процессорами. XML-процессоры можно классифицировать по способу применения: для чтения, для записи либо для чтения и записи одновременно.

Выделяют следующие типы XML-процессоров для чтения: событийные, потоковые, объектные. [3,4]

Событийные процессоры предполагают последовательное чтение текста XML, и разбор структуры XML заключается в вызове callback-функций при возникновении определённых событий, таких как появление открывающего тега, закрывающего тега, текстовой строки, атрибута и т.п.

К плюсам событийных процессоров можно отнести следующие: быстроедействие, низкие потребности в использовании оперативной памяти, простая реализация.

К минусам событийных процессоров можно отнести следующие: XML с перепутанным порядком тегов, которые можно считать «почти верными» будут интерпретированы как ошибочные; сложное применение на практике — необходимо

помнить, в каком месте документа происходит чтение и текущий контекст; если документ содержит много перекрёстных ссылок, приходится держать в памяти эти ссылки в строковом виде до тех пор, пока файл не будет считан до конца и станет возможно преобразовать строковые идентификаторы в указатели; при ошибке необходимо реализовать программное уничтожение уже созданной полузаполненной структуры, хранящейся в оперативной памяти; не получится использовать этот же алгоритм для записи.

Потоковые процессоры работают аналогично потокам ввода-вывода. Процессор этого типа действует как курсор, который размещается сразу после разобранный самой последней XML-лексемы и предоставляет методы для получения информации о ней. Этот подход очень эффективно использует память, так как не создает новых объектов.

К плюсам потоковых процессоров можно отнести следующие:

- высокое быстродействие;
- требуют мало памяти для работы;
- место в документе неявно задаётся местом в потоке выполнения.

К минусам потоковых процессоров можно отнести следующие:

- XML с перепутанным порядком тегов, которые можно считать «почти верными» будут интерпретированы как ошибочные;
- сложная реализация;
- если документ содержит много перекрёстных ссылок, приходится держать в памяти эти ссылки в строковом виде до тех пор, пока файл не будет считан до конца и станет возможно преобразовать строковые идентификаторы в указатели, возможно реализовать простановку ссылок при обратном проходе, но такой подход потребует дополнительных ресурсов;
- при ошибке необходимо реализовать программно освобождение ресурсов из-под уже созданной полузаполненной структуры, хранящейся в оперативной памяти;
- не получится использовать этот же алгоритм для записи.

Объектные процессоры (DOM – Document Object Model, объектная модель документа) воссоздают объектную модель по считанному текстовому представлению документа.

К плюсам объектных процессоров можно отнести следующие:

- относительная простота в программировании;
- в большинстве случаев, «почти верные» XML удастся корректно интерпретировать;
- в том случае, когда XML содержит много перекрёстных ссылок достаточно двух проходов: при первом происходит поиск ссылок, при втором их связывание;
- при ошибке в XML полусозданная модель в оперативной памяти будет автоматически очищена самой библиотекой;
- для чтения и записи используется один и тот же интерфейс.

К минусам объектных процессоров можно отнести следующие:

- более требовательны к памяти относительно других типов процессоров;
- довольно низкое быстродействие;
- ограниченный объём XML файла, с которым можно работать.

Для записи XML выделяют следующие типы процессоров: прямой записи, объектный. [3,4]

Процессоры прямой записи записывают содержимое XML последовательно, элемент за элементом.

К плюсам процессоров прямой записи можно отнести следующие:

- нет промежуточных объектов;
- высокое быстродействие.

К минусам процессоров прямой записи можно отнести следующие:

- при некоторых специфических задачах непригодны;
- примитивный процессор может генерировать неоптимальные пустые теги(<tag></tag>), а реализация более оптимального сложнее в программировании;
- при ошибке во время записи можно потерять данные;
- подходят только для записи;
- при ошибке программиста может получиться некорректный документ.

Объектная модель DOM соответствует аналогичной из пункта про запись.

К плюсам объектной модели можно отнести следующие:

- универсальность;
- единственный вариант, когда могут быть потеряны данные – это когда недостаточно места на диске, во всех других случаях исходный файл считывается в модель и данные хранятся в первоизданном виде.

К минусам объектной модели можно отнести следующие:

- объектные процессоры более требовательны к памяти относительно других типов процессоров;
- довольно низкое быстродействие.

Был проведён сравнительный анализ SAX-процессоров и объектных (DOM) процессоров. Результаты сравнения приведены в таблице 1.

Таблица 1

Сравнительный анализ XML-процессоров

Критерий	SAX	DOM
Минимизация потери данных	-	+
Оптимальное использование памяти	+	-
Быстродействие	+	-
Возможность как чтения, так и записи	-	+

Из анализа моделей XML-процессоров был сделан вывод, что для решения поставленной задачи необходимо использовать процессор, основанный на работе с DOM-представлением XML-документа.

Была рассмотрена реализация DOM модели из библиотеки System.XML. В результате анализа, был сделан вывод, что существующий алгоритм нуждается в доработке, так как расходует слишком много оперативной памяти. DOM-модель из библиотеки System.XML имеет такую особенность, что она хранит исходный текст узла на языке XML в памяти, что повышает скорость сохранения файла, так как для сохранения происходит простая последовательная запись узлов один за другим. Однако это не оптимальным образом расходует память и увеличивает время работы с документом.

Предлагается следующий алгоритм для построения DOM-модели документа. При чтении файла происходит его обход SAX-парсером, структура документа сохраняется в объектном виде без сохранения строкового представления элементов. Таким образом, DOM-дерево станет меньше занимать места в оперативной памяти, повысится быстродействие при работе с ним. Увеличится только время сохранения файла, так как придётся объектное представление конвертировать в текстовое.

Если документ состоит из 2 элементов: родительского и дочернего, то его текстовое представление в памяти будет содержать 4 тега (1 в тексте дочернего элемента и 3 в тексте родительского). Если эту иерархию расширить до 3

последовательно вложенных элементов, то результирующий текст будет содержать $1+3+5 = 9$ элементов.

Таким образом если документ состоит из 50 элементов, каждый из которых является потомком другого, то его объектная модель будет содержать в текстовом виде 502 тегов.

В предлагаемой модели это число можно уменьшить до 1 на каждый тэг: вместо дублирования этого текста в открывающем и закрывающем тегах и дублирования дочерних элементов в тексте родительских можно просто запоминать имя элемента.

Таким образом, представляется возможным сохранить больший объем памяти не занятым под хранение объектной модели, нежели этого требует реализация из библиотеки System.XML.

Предлагаемый комбинированный алгоритм подразумевает снижение используемого объема оперативной памяти, увеличение быстродействия, что соответствует требованиям, налагаемым на разрабатываемые программные средства. Так как была использована модель DOM, при чтении файла происходит считывание всего текста файла, а при его сохранении никакие данные не теряются, что также соответствует заданным требованиям.

Предлагаемый алгоритм будет реализован при разработке табличного процессора для операционной системы специального назначения.

1. Рэй, Э. – Perl & XML. Библиотека программиста / Э. Рэй, Дж. Макинтош. — СПб.: Питер, 2003.— 208 с
2. Одиночкина, С.В. Основы технологий XML / С.В. Одиночкина. - СПб: НИУ ИТМО, 2013. – 56 с.
3. Сравнение XmlReader и SAX Reader. - URL: [https://msdn.microsoft.com/ru-ru/library/sbw89de7\(v=vs.110\).aspx](https://msdn.microsoft.com/ru-ru/library/sbw89de7(v=vs.110).aspx) (дата обращения 10.01.2018)
4. Модель DOM для XML. - URL: [https://msdn.microsoft.com/ru-ru/library/hf9hbf87\(v=vs.110\).aspx](https://msdn.microsoft.com/ru-ru/library/hf9hbf87(v=vs.110).aspx) (дата обращения 10.01.2018)

РАЗДЕЛ V. ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Аравенков А.А., Пасынков Ю.А.

Разработка анализатора гармоник на основе широтно-импульсной модуляции с аналоговыми ключами и интеграторами

*Новосибирский Государственный Технический Университет
(Россия, Новосибирск)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-12

idsp: 000001:spc-16-01-2018-12

Аннотация

В работе рассматривается процесс разработки и исследования анализатора гармоник на основе широтно-импульсной модуляции (ШИМ). В качестве области применения анализатора гармоник выбирается область измерения качества электрической энергии в системах электроснабжения общего назначения. Разрабатываемый анализатор гармоник будет применяться для измерения параметров гармонических составляющих сетевого напряжения и расчета его коэффициента несинусоидальности.

Современный мир не способен существовать без электрической энергии. Она занимает важное место в экономике любой страны как один из ведущих продуктов производства и потребления. А значит, электрическая энергия, как и любой продукт, должна обладать определенными параметрами, которые в совокупности характеризуют её качество. Высокое качество электрической энергии является обязательным, так как от него напрямую зависит срок службы эксплуатируемого оборудования, а также времени затраченное на производство и качество самой выпускаемой продукции. Одним из важных параметров качества электрической энергии в системах электроснабжения общего пользования является коэффициент несинусоидальности напряжения [1]. Так же, можно отметить, что в области учета электрической энергии можно увидеть тенденции, по которой современные счетчики электрической энергии становятся достаточно сложными устройствами, выполняющие множество дополнительных функций. Такими функциями счетчиков может быть возможность легко организовать многотарифные системы учёта, режим ретроспективы, легко вписываются в конфигурацию систем АСКУЭ и т.д. Одной из новых возможностей современных счетчиков является определение качества электрической энергии.

На сегодня, основным способом определения несинусоидальности напряжения является применение дискретного преобразования Фурье (ДПФ), на основе которого разработан алгоритм быстрого преобразования Фурье, так называемый БПФ [2]. Применение ДПФ требует достаточно большого объема памяти и вычислительной мощности в связи с необходимостью хранения как кода программы самого алгоритма умножения, так и промежуточных результатов, которые получаются в ходе таких вычислений. Основным преимуществом БПФ является снижение количества математических операций, по сравнению с использованием ДПФ [3]. Но все же БПФ, остаётся достаточно требовательным алгоритмом, что вызывает трудности при его использовании в маломощных устройствах. К подобным устройствам можно отнести и счетчики электрической энергии, которые чаще всего выполняются на микроконтроллерах общего назначения с ограниченными ресурсами.

Другим способом определения параметров гармоник сигнала может служить метод спектрального анализа основанный на широтно-импульсной модуляции (ШИМ). Основная идея данного метода заключается в формирование специальных широтно-

импульсных сигналов (ШИС), соответствующих синусоидальной и косинусоидальной составляющим исследуемой гармоники. Умножения этих ШИС на входной сигнал с последующим интегрированием результатов умножения. После чего находится квадратный корень из суммы квадратов результатов интегрирования. Полученное значение будет равно амплитуде исследуемой гармоники. Преимущество данного метода заключается в том, что операции умножения входного сигнала на ШИС и интегрирование легко реализуются в аналоговом виде, что позволяет снять нагрузку с вычислительного устройства [4 – 9].

В соответствие с ГОСТ 32144 – 2013 [10] разрабатываемое устройство должно позволять измерять амплитуды гармоник с 1 по 40 для основной частоты 50 Гц, т.е. измерения будем проводить в диапазоне 50 Гц – 2 кГц, с точностью не хуже 5 %. Рассмотрим структурную схему анализатора гармоник на основе ШИМ, которая приведена на рис. 1. Здесь:

1. ИУ – инвертирующее устройство;
2. К1 – аналоговый ключ для определения синусоидальной составляющей сигнала;
3. К2 – аналоговый ключ для определения косинусоидальной составляющей сигнала;
4. И1 – аналоговый интегратор для определения синусоидальной составляющей сигнала;
5. И2 – аналоговый интегратор для определения косинусоидальной составляющей сигнала;
6. МК – микроконтроллер;
7. USB – интерфейс USB, применяемый для обмена данными с ПК;
8. ПК – персональный компьютер.

Рис.1. Структурная схема анализатора гармоник на основе ШИМ.

Аппаратная часть анализатор гармоник на основе ШИМ реализуется на элементах с 1 по 5. Исследуемый сигнал подается на инвертирующее устройство 1, а также на первые входы аналоговых ключей 2 и 3. На вторые входы аналоговых ключей 2 и 3 подается инвертированный сигнал с выхода инвертирующего устройства 1. Третье входы аналоговых ключей 2 и 3 подключаются к общей точке схемы (нулевой потенциал). Так же ключи 2 и 3 имеют управляющие входы, на которые подаются сигналы с выходов микроконтроллера 6. Сигнал с выходов ключей 2 и 3 подаются на аналоговые интеграторы 4 и 5. Далее сигнал с выходов аналоговых интеграторов 4 и 5 подаются на микроконтроллер 6, имеющий в своём составе АЦП, что позволяет оцифровать сигналы и произвести окончательные расчеты. Персональный компьютер 8 используется для управления и отображение данных полученных от анализатора гармоник посредством интерфейса USB 7 при тестировании.

Все элементы анализатора гармоник разработаны с применением современных электронных компонентов. Для реализации инвертирующего устройства использован операционный усилитель (ОУ) AD8033, включенный по схеме инвертирующего усилителя с коэффициентом усиления равным 1. Аналоговые интеграторы, собранные на той же микросхеме ОУ по схеме интегрирующего преобразователя. В качестве аналоговых ключей используются микросхемы ADG1411.

При тестировании устройства применялась отладочная плата STM32F4DISCOVERY с установленным на ней микроконтроллером STM32F407VGT6. Для микроконтроллера было разработано программное обеспечение, которое содержит в себе алгоритм измерения гармоник на основе ШИМ. Данная программа может быть легко перенесена на любой другой микроконтроллер. Результаты тестирования полностью совпали с результатами, полученными при моделировании [6 – 9].

В ходе проектирования анализатора гармоник была осуществлена разработка аппаратной и программной части, которые могут быть использованы в современных счетчиках электрической энергии. Разработка устройства включала в себя такие этапы как: разработка структурной схемы устройства, разработка принципиальных схем анализатора гармоник, подбор электронных комплектующих, разработка печатной платы, разработка прошивки для микроконтроллера (в том числе: алгоритмов расчета таблицы ШИМ, самого анализатора гармоник, кода для отладки алгоритмов и тестирования устройства) и программы для ПК. Инструментальная погрешность получившегося устройства составляет приблизительно 1,5 %. Оно позволяет измерять параметры гармонических составляющих сигнала в диапазоне частот 50 Гц – 2 кГц, что соответствует ГОСТ Р 30804.4.7-2013 [10]. Тестирование устройства показало его работоспособность и возможность применения для измерения коэффициента несинусоидальности при решении задач качества электрической энергии в системах электроснабжения общего пользования.

1. ГОСТ Р 32144 – 2013. Нормы качества электрической энергии в системах электроснабжения общего назначения – Введ. 2013-03-25. – М.: Изд-во стандартов, 20,31. – 20 с.
2. Сергиенко А.Б. Цифровая обработка сигналов: СПб.: Питер, 2002. – 608 с.: ил.
3. Айфичер, Эммануил С., Джервис, Барри У. Цифровая обработка сигналов: практический подход, 2-е издание. : Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2008 – 992 с. : ил. – Парал. тит. англ.
4. Пат. 2564831С1 Российская Федерация, МПК7 G 01 R 23/16. Анализатор гармоник [Текст] / Аравенков А.А., Пасынков Ю.А.; заявитель и патентообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Новосибирский государственный технический университет" – № 2014117408/28; заявл. 29.04.2014; опубл. 10.10.2015, Бюл. № 28. – 6 с. : ил.
5. Пат. 131496U1 Российская Федерация, МПК7 G 01 R 23/16. Анализатор гармоник [Текст] / Аравенков А.А., Пасынков Ю.А.; заявитель и патентообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Новосибирский государственный технический университет" – №. 2012118134/28; заявл. 03.05.2012; опубл. 20.08.2013, Бюл. № 23. – 7 с. : ил.
6. Аравенков А.А. Анализатор гармоник на основе широтно-импульсной модуляции / А.А. Аравенков, Ю.А. Пасынков // Ползуновский вестник. - 2015. - № 3. - С. 120-125.
7. Aravenkov, A.A. Harmonic analyzer based on PWM method (2014) International Summerschool computer Science 2014 Proceeding of Summerschool 7.7.-13.7.2014, ChemnitzInformatik-Berichte, CSR-14-01, pp. 6-11.
8. Аравенков А.А. Анализатор гармоник на основе широтно-импульсной модуляции / А.А. Аравенков, Ю.А. Пасынков // Наука. Технологии. Инновации / Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых в 4-х частях. - 2012. - № 2. - С. 10-11.
9. Аравенков А.А. Исследование влияния спектра широтно-импульсного сигнала на погрешность определения амплитуды гармоник в анализаторе гармоник на основе широтно-импульсной модуляции / А.А. Аравенков, Ю.А. Пасынков // Научный вестник. – 2017. - №. – С. 42-54.
10. ГОСТ Р 30804.4.7-2013.Общее руководство по средствам измерений и измерениям гармоник и интергармоник для систем энергоснабжения и подключаемым к ним техническим средств. – Введ. 2013-03-25. – М.: Изд-во стандартов, 20,31. – 39 с.

Демин В.И., Ломоносова Д.В.

Обеспечение производственной безопасности на предприятиях по добыче и подготовке газа к транспорту

*Кубанский государственный технологический университет
(Россия, Краснодар)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-13

ids: 000001:spc-16-01-2018-13

Аннотация

Газовая промышленность - одна из важнейших отраслей экономики страны. Вопросы обеспечения взрывобезопасности, а соответственно производственного травматизма, в отрасли является актуальными.

В работе рассмотрены основные отравляющие вещества, обращающиеся на площадке установки комплексной подготовки газа (УКПГ), и основные причины утечек и выбросов их в окружающую среду. Проведена оценка вероятных последствий аварии на предприятии по добыче и подготовке газа к транспорту. Оценка производилась по величина избыточного давления ударной волны при вероятной ЧС, связанной с разгерметизацией колонны регенерации амина на расстояниях 20, 25 и 28 м до блока стабилизации конденсата. Определены класс зоны возможного разрушения, степень возможного разрушения блока стабилизации конденсата, установки водоподготовки и установки подготовки сырьевого газа, вероятность смертельного исхода человека, получения тяжелых и легких травм. Для снижения вероятности возникновения взрыва на УКПГ и снижения производственного травматизма предложены мероприятия.

Сделан вывод о том, что решение вопросов снижения производственного травматизма на предприятиях по добыче и подготовке газа к транспорту необходимо проводить комплексно путем разработки и функционирования системы управления охраной труда.

Ключевые слова: магистральный трубопровод, установка комплексной подготовки газа, производственный травматизм, риск аварии, избыточное давление ударной волны, система управления охраной труда.

Газовая промышленность - одна из важнейших отраслей экономики, которая имеет существенное значение в создании материально-технической базы страны, в связи, с чем правительство уделяет этой отрасли большое внимание. Однако добыча и транспорт газа сопряжен с рядом опасностей, одной из которых является возможность взрыва при разгерметизации оборудования. Так с 2006 по 2015 год на магистральных трубопроводах и установках произошло 545 аварий. Среднегодовой показатель аварийности составляет 50-60 аварий и в целом не имеет устойчивости к снижению. Материальный ущерб за этот период в среднем составляет 1 млн. долл. Погибло 63 человека. Более 150 человек получили травмы различной степени тяжести.

Поэтому вопрос обеспечения взрывобезопасности в отрасли является актуальным.

Подход к идентификации опасностей производственного процесса, состоянию охраны труда и производственного травматизма, оценке профессионального риска на предприятиях различного профиля рассмотрены в [1-10].

На участках комплексной подготовки газа используют установки комплексной подготовки газа (УКПГ), которые помогают подготавливать топливо для его последующей транспортировки. Очень важно соблюдать правила производственной безопасности на таких объектах, потому что они относятся к категории опасных и риск

возникновения аварий на них выше, при этом последствия от чрезвычайных ситуаций (ЧС) могут быть весьма серьезными.

Основными отравляющими веществами (ОВ), обращающимися на площадке УКПГ, являются: природный газ, нестабильный конденсат, стабильный конденсат, метанол.

Основными причинами утечек и выбросов ОВ в окружающую среду являются:

- абразивный износ (эрозия) трубопроводов в первую очередь на участках технологической цепочки с обращением пластового, не очищенного в первой ступени сепарации газа;
- коррозия;
- нарушения правил эксплуатации;
- низкое качество строительно-монтажных работ,
- механические повреждения.

Природный газ, получаемый с промыслов, содержит посторонние примеси: твердые частицы (песок и окалину), конденсат тяжелых углеводородов, водяные пары и часто, сероводород и углекислый газ. Присутствие твердых частиц в газе приводит к быстрому износу соприкасающихся с газом деталей компрессоров. Твердые частицы засоряют и портят арматуру газопровода и контрольно-измерительные приборы, скапливаясь на отдельных участках газопровода, они сужают его поперечное сечение.

Жидкие частицы, оседая в пониженных участках трубопровода, также вызывают уменьшение площади его поперечного сечения. Они, кроме того, оказывают корродирующее действие на трубопровод, арматуру и приборы.

Влага в определенных условиях приводит к образованию гидратов, выпадающих в газопроводе в виде твердых кристаллов. Гидратные пробки могут полностью закупорить трубопровод.

Сероводород – весьма вредная примесь. В количествах, больших 0,01 мг на 1л воздуха рабочей зоны, он ядовит. При промышленном использовании газа содержащийся в нем сероводород отрицательно сказывается на качестве выпускаемой продукции. В присутствии влаги сероводород вызывает сильную коррозию металлов.

Очистка природного и других газов от сероводорода может осуществляться разными методами. Выбор процесса очистки природного газа от сернистых соединений в каждом конкретном случае зависит от многих факторов, основными из которых являются: состав и параметры сырьевого газа, требуемая степень очистки и область использования товарного газа, наличие и параметры энергоресурсов, отходы производства и др.

Коррозия зависит от многих факторов: от концентрации H_2S и CO_2 в очищаемом газе, степени насыщения амина кислыми газами, концентрации амина, качества поглотительного раствора, температуры технологической среды и т.д. Коррозия ускоряется под действием продуктов деградации амина, которые взаимодействуют с металлом.

Интенсивность коррозии возрастает в ряду: первичные алканол амины-вторичные-третичные, так как более реакционно способные первичные и вторичные амины требуют более высоких температур для десорбции кислых газов, остаточное содержание кислых газов в регенерированных растворах таких аминов также, выше. На границе раздела фаз существенным фактором разрушения становится кавитация.

Оборудование установок очистки газа помимо общей коррозии подвергается и другому виду разрушения – коррозионному растрескиванию низколегированных и углеродистых сталей в регенерированных и насыщенных сероводородом и углекислым газом (или одним из этих газов) аминовых растворах. Вероятность растрескивания возрастает с повышением температуры. Зарегистрированы случаи появления коррозионных трещин в абсорберах, десорберах, теплообменниках, трубопроводах.

Ещё одним видом коррозии оборудования установок сероочистки является расслоение (НІС) углеродистых и низколегированных сталей под действием водных сероводородсодержащих сред, образующихся в результате десорбции кислых газов.

При очистке газа водными растворами аминов коррозия происходит по всему тракту поглотительного раствора. Наиболее интенсивная коррозия наблюдается в зонах с максимальной концентрацией кислых газов и максимальной температурой. Следствием коррозии может стать взрыв оборудования очистки газа от серосодержащих соединений.

Вышеописанные факторы привели к тому, что в некоторых странах перешли на изготовление оборудования целиком из нержавеющей стали, несмотря на огромные первоначальные затраты. В России, как правило, основное оборудование установок очистки газа изготавливают из углеродистой стали и лишь наиболее подверженные коррозии узлы (трубные пучки теплообменников, кипятильников, холодильников) – из нержавеющей стали, скорость коррозии которой ниже, чем у углеродистой стали.

Чтобы избежать возможной катастрофы на предприятии по подготовке газа для дальнейшей транспортировки используется анализ риска аварий.

Для оценки вероятных последствий аварии на предприятии по добыче и подготовке газа к транспорту необходимо использовать Свод правил СП 12.13130.2009 «Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности», утвержденные приказом МЧС РФ от 25 марта 2009 года № 182, а именно, приложение В «Методы расчета критериев пожарной опасности наружных установок».

В работе определены величины избыточного давления ударной волны при вероятной ЧС, связанной с разгерметизацией колонны регенерации амина на расстояниях 20, 25 и 28 м до блока стабилизации конденсата, которые соответственно будут - 57,45 кПа, 38,89 кПа и 32,23 кПа.

Класс зоны разрушения типовых зданий и сооружений определяется по избыточному давлению ударной волны, развиваемому при сгорании газопаровоздушных смесей (таблица 1).

Таблица 1

Классификация зон разрушения типовых зданий и оборудования

Класс зоны разрушения	К	ΔP , кПа	Возможные последствия, характер повреждений зданий и сооружений
1	3,8	≥ 100	Полное разрушение зданий с массивными стенами
2	5,6	70	Разрушение стен кирпичных зданий толщиной в 1,5 кирпича; перемещение цилиндрических резервуаров; разрушение трубопроводных эстакад
3	9,6	28	Разрушение перекрытий промышленных зданий; разрушение промышленных стальных несущих конструкций; деформации трубопроводных эстакад
4	28	14	Разрушение перегородок и кровли зданий; повреждение стальных конструкций каркасов, ферм
5	56	≤ 2	Граница зоны повреждений зданий; частичное повреждение остекления

При избыточном давлении ΔP на расстоянии, соответствующем расстояниям до блока стабилизации конденсата, установки водоподготовки и установки подготовки сырьевого газа, равным 20, 25 и 28 м, будет 3 класс зоны разрушения. Исходя из

данного типа зданий и избыточного давления ударной волны, определяется степень разрушения производственных и административных зданий (таблица 2).

Таблица 2

Степень разрушения производственных, административных зданий и сооружений, имеющих разную устойчивость

Тип зданий, сооружений	Степень разрушения при избыточном давлении на фронте падающей ударной волны, кПа			
	Слабое	Среднее	Сильное	Полное
Промышленные здания с легким каркасом и бескаркасной конструкцией	10 - 25	25 - 35	35 - 45	> 45
Складские кирпичные здания	10 - 20	20 - 30	30 - 40	> 40
Одноэтажные складские помещения с металлическим каркасом и стеновым заполнением из листового металла	5 - 7	7 - 10	10 - 15	> 15
Бетонные и железобетонные здания и антисейсмические конструкции	25 - 35	80 - 120	150 - 200	> 200
Здания железобетонные монолитные повышенной этажности	25 - 45	45 - 105	105 - 170	170 - 215
Котельные, регуляторные станции в кирпичных зданиях	10 - 15	15 - 25	25 - 35	35 - 45
Деревянные дома	6 - 8	8 - 12	12 - 20	> 20
Подземные сети, трубопроводы	400 - 600	600 - 1000	1000 - 1500	> 1500
Трубопроводы наземные	20	50	130	-
Кабельные подземные линии	до 800	-	-	> 1500
Цистерны для перевозки нефтепродуктов	30 - 50	50 - 70	70 - 80	> 80
Резервуары и емкости стальные наземные	35 - 55	55 - 80	80 - 90	> 90
Подземные резервуары	40 - 75	75 - 150	150 - 200	> 200

Степень разрушения блока стабилизации конденсата, установки водоподготовки и установки подготовки сырьевого газа будет оцениваться как средняя.

Условная вероятность травмирования и гибели людей определяется по таблице № 3.

Таблица № 3

Зависимость условной вероятности поражения человека с разной степенью тяжести от степени разрушения здания

Тяжесть поражения	Степень разрушения			
	Полное	Сильное	Среднее	Слабое
Смертельное	0,6	0,49	0,09	0
Тяжелые травмы	0,37	0,34	0,1	0
Легкие травмы	0,03	0,17	0,2	0,05

Таким образом, вероятность смертельного исхода человека будет равна 0,09, получение тяжелых травм – 0,1 и легкие травмы – 0,2.

Для снижения вероятности возникновения взрыва на УКПГ и снижения производственного травматизма следует провести ряд мероприятий:

1. Установить предохранительные устройства, такие как устройства с разрушающимися мембранами, либо импульсные предохранительные устройства (ИПУ), состоящие из главного предохранительного клапана (ГПК) и управляющего импульсного клапана (ИПК) прямого действия;
2. Увеличить количество датчиков дозрывных концентраций газа.
3. Установить запорную арматуру.
4. Установить систему непрерывного мониторинга за состоянием оборудования под давлением.
5. Использовать методы газопламенного напыления металлизационных покрытий с целью защиты от коррозии.
6. Установить систему по предупреждению образования взрывоопасной среды.
7. Установить систему автоматической противоаварийной блокировки.
8. Провести дополнительное обучение персонала.
9. Перейти на систему ремонта по состоянию оборудования, используя технические системы мониторинга.
10. Провести внеплановые инструктажи по охране труда с персоналом.

Таким образом, реализация предложенных мероприятий позволит снизить вероятность возникновения взрыва на УКПГ и производственный травматизм на предприятиях по добыче и подготовке газа к транспорту.

Решение вопросов снижения производственного травматизма на предприятиях по добыче и подготовке газа к транспорту необходимо проводить комплексно. Это возможно путем разработки и функционирования системы управления охраной труда на предприятии [10-17].

1. Ригер Т.В., Сапрыкина Н.В., Демин В.И., Козак Д.А. Идентификация опасностей производственного процесса на предприятиях строительной отрасли// Научные труды КубГТУ: электрон. сетевой политематич. журн. 2016. № 5. URL: <http://ntk.kubstu.ru/file/953>.
2. Берсекова В.И. О состоянии охраны труда в организациях строительной отрасли/ Берсекова В.И., Рыжкова А.А., Ригер Т.В., Демин В.И.// Научные труды КубГТУ: электрон. сетевой политематич. журн. 2017. № 1. URL: <http://ntk.kubstu.ru/file/1328>.
3. Демин В.И. Состояние производственного травматизма на малых предприятиях/ Демин В.И., Ригер Т.В., Сапрыкина Н.В./В сборнике: Природноресурсный потенциал, экология и устойчивое развитие регионов России/сборник статей XIII Международной научно-практической конференции. Под общей редакцией Селезнева В.А., Лушкина И.А. МНИЦ ПГСХА. – Пенза: РИО ПГСХА, 2015. – с. 22 - 25.
4. Демин В.И., Ригер Т.В., Ломоносова Д.В. О результатах анализа производственного травматизма на предприятиях строительной отрасли//Тенденции науки и образования в современном мире, 2017. № 27-1. – с. 31-34.
5. Демин В.И., Гром Д.С. Анализ состояния электробезопасности в КубГТУ// Научные труды КубГТУ: электрон. сетевой политематич. журн. 2015. № 4. URL: <http://ntk.kubstu.ru/file/376>.
6. Демин В.И., Гром Д.С., Кравец А.С., Хоменко Ю.О. Оценка состояния электробезопасности на предприятиях и в организациях/В сборнике: Молодежь. Наука. Инновации//труды XIII Международной научно-практической интернет-конференции, 2016. – с. 298-308.
7. Ригер Т.В., Сапрыкина Н.В., Демин В.И., Власенко Н.В. Совершенствование работы по охране труда на предприятиях по хранению и переработке зерна// Научные труды КубГТУ: электрон. сетевой политематич. журн. 2015. № 9. URL: <http://ntk.kubstu.ru/file/503>.
8. Ригер Т.В. Методика оценки профессионального риска методом использования коэффициента безопасности труда/ Ригер Т.В., Сапрыкина Н.В., Демин В.И., Норман Л.В.// Научные труды КубГТУ: электрон. сетевой политематич. журн. 2016. № 5. URL: <http://ntk.kubstu.ru/file/960>.
9. Косова Ю.Ю., Демин В.И. Методика оценки профессионального риска электротехнического персонала/В сборнике: Разработки, достижения, творчество школьников и студентов Тульской области в различных областях знаний: доклады первой Всероссийской научно-практической

- конференции школьников и студентов Тульской области в различных областях знаний, 2011. - с. 22-24.
10. Мандаровская Ю.А., Демин В.И., Дмитренко Е.В., Ригер Т.В. Опыт организации производственного контроля в сфере охраны труда в дирекции механизированной дистанции ОАО «РЖД»// Научные труды КубГТУ: электрон. сетевой политематич. журн. 2016. № 15. URL: <http://ntk.kubstu.ru/file/1303>.
 11. Ригер Т.В. Система управления охраной труда вуза/ Ригер Т.В., Демин В.И., Сапрыкина Н.В./В сборнике: Дальневосточная Весна-2014// сборник статей 12-й Международной научно-практической конференции по проблемам экологии и безопасности. Под редакцией И.П. Степановой И.П., Никифоровой Г.Е. – Комсомольск-на-Амуре: ФГБОУ ВПО «КнАГТУ», 2014. – с. 120-123.
 12. Демин В.И. Опыт разработки системы управления охраной труда в вузе/Демин В.И., Ригер Т.В., Сапрыкина Н.В./В сборнике Экология и безопасность жизнедеятельности: сборник статей XIV Международной научно-практической конференции. Под общей редакцией Селезнева В.А., Лушкина И.А. МНИЦ ПГСХА. – Пенза: РИО ПГСХА, 2014. – с. 31 - 33.
 13. Ригер Т.В. Разработка системы управления охраной труда на малых предприятиях пищевого профиля/ Ригер Т.В., Сапрыкина Н.В., Демин В.И., Истошина Н.Ю./ Известия высших учебных заведений. Пищевая технология, 2016. № 1. - с. 113-117.
 14. Демин В.И., Ригер Т.В., Ломоносова Д.В. Особенности разработки политики в области охраны труда организации строительной отрасли// Тенденции науки и образования в современном мире, 2017. № 30-3. – с. 38-46.
 15. Ригер Т.В., Демин В.И., Истошина Н.Ю., Соловьева Ж.П., Ломоносова Д.В. Опыт внедрения системы управления охраной труда на малых предприятиях пищевой промышленности// Известия высших учебных заведений. Пищевая технология, 2016. № 5-6 (353-354). - с. 109-112.
 16. Ригер Т.В. Опыт внедрения системы управления охраной труда на различных предприятиях/ Ригер Т.В., Сапрыкина Н.В., Демин В.И., Власенко Н.В./ Научные труды КубГТУ: электрон. сетевой политематич. журн. 2015. № 10. URL: <http://ntk.kubstu.ru/file/545>.
 17. Демин В.И., Аноприева И.К. Оценка рисков в учебно-курсовом комбинате ООО «УКК «Лабинский»// Тенденции науки и образования в современном мире, 2017. № 32-4. – с. 27-31.

Довбыш Н.С., Фролов К.А., Жданов А.В.

Исследование напряженно-деформированного состояния формообразующих деталей методом конечных элементов

*Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и
Николая Григорьевича Столетовых
(Россия, Владимир)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-14

idsp: 000001:spc-16-01-2018-14

Abstract

The article deals with the STUDY of the stress-strain state of the DETAIL punch-die die under the complex loading by the finite element method. The calculation was carried out for workloads for various cases of percussion of parts equivalent to wear of a die. Within the framework of the study, allowed skew angles are obtained, under which the stresses do not exceed the allowed ones.

Наиболее ответственными элементами конструкции вырубных штампов являются нагруженные формообразующие детали, которые испытывают комбинированные нагрузки. Особый интерес представляют детали вырубных штампов типа пуансон-матрица, которые находятся в сложном напряженно-деформированном состоянии (НДС), характерном как для пуансонов, так и для матриц. Традиционный подход к расчету такой детали является сильно упрощенным и не может использоваться в нашем случае. Это объясняется не только отсутствием аналитических решений для подобной геометрии, но и наличием в детали сразу нескольких существенных концентраторов напряжений. Следовательно, необходимо проводить анализ НДС данной детали с помощью численных методов. С целью оптимизации конструкции, снижения массогабаритных характеристик без изменения прочности и жесткости конструкции необходимо рассмотреть следующие вопросы:

- определить объемное НДС детали при действии рабочих давлений;
- определить поля напряжений и деформаций при различных зазорах и углах перекося;
- выявить опасные участки с точки зрения прочности и жесткости;
- дать рекомендации по усовершенствованию конструкции детали по надежности и долговечности.

Решение поставленных задач проводилось в программном пакете Pro/MechanicaWF4, основанного на методе конечных элементов (КЭ), особенностью которого по сравнению с другими аналогичными программами являются высокая сходимость (точность) решения, определяемая пользователем, удобная дискретизация модели и высокая достоверность результатов. Решение задач по определению объемного НДС в программном пакете Pro/MechanicaWF4 основано на методе КЭ, в основе которого лежит замена континуальной расчетной модели с непрерывным распределением параметров и бесконечным числом степеней свободы дискретной моделью, имеющей конечное число неизвестных, которое может быть очень большим. Схема нагружения твердотельной модели детали «Пуансон-матрица» представлена на рис. 1.

Рис. 1. Модель детали «Пуансон-матрица»

Для расчета методом КЭ весьма эффективны программы, имеющие блок автоматического разбиения области на элементы, сокращающие процесс составления и контроля обширной исходной информации. Целесообразно применять графический контроль данных о геометрии области и характера ее разбиения, а также выходной информации. Пример разбиения детали на КЭ представлены на рис.1, б. Анализ результатов дискретизации показывает, что наиболее приемлемым с точки зрения скорости расчета и точности является вариант со следующими параметрами: 4881 элемент и 1268 узлов. Его мы и выбираем для дальнейшего расчета.

Для исследования НДС, возникающего при приложении нагрузки, необходимо создать расчетную схему модели. В эту схему входит определение параметров материала, приложение граничных условий (параметры закрепления и нагружения). На рис.1, а представлена схема нагружения детали, стрелками показаны направления давления, оказывающие на стенки детали. Основываясь на разработанных моделях, отдельно рассчитывались силовые нагружения, возникающие в теле модели для различных нагрузок штампа.

Поля напряжений и деформаций представлены на рис. 2 (а – вариант нагружения без перекося, б – вариант нагружения с перекосям). Из анализа областей видно, что опасные напряжения возникают в местах сопряжения плоской и кольцевой частей

детали. Анализ рис. 2 позволил определить влияние перекоса штампа (в градусах) на максимальные величины деформаций и напряжений.

Рис.2. Поля деформаций и напряжений для исследуемой модели

Графическая интерпретация данных результатов отражена на графиках рис.3. Из их анализа видно, что наибольшую опасность представляет перекос более 2,5 градусов. Так при перекосе в 4 градуса максимальные растягивающие напряжения составляют 82 МПа, при отсутствии перекоса – 40 МПа, перекос более 2,5 градусов недопустим при эксплуатации данного штампа.

На рис. 3 представлены графики зависимостей упругих перемещений и напряжений от угла перекоса при максимальной рабочей нагрузке в штампе.

Рис. 3. Графики зависимостей упругих перемещений и напряжений от угла перекоса при максимальной рабочей нагрузке в штампе.

Как видно из анализа графиков, наибольший вклад в максимальные эквивалентные напряжения вносит составляющая напряжений в плоскости XX. На остальные составляющие приходится не менее 35% от общей. Это обстоятельство доказывает обоснованность применения объемной (а не плоской) модели при исследовании напряженно-формированного состояния упругого элемента.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ
в рамках научного проекта № 16-48-330031p_a*

Ерцкина Д.А., Рагозина М.А.

**Тенденции инновационного развития в сфере возобновляемых источников
энергии в Красноярском крае и республиках Хакасии, Тыва**

*Сибирский государственный университет науки и технологий
имени академика М.Ф. Решетнева
(Россия, Красноярск)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-15

idsp: 000001:spc-16-01-2018-15

С начала 2000-х годов в энергетике одновременно происходят несколько технологических революций, одним из признаков которых – активное развитие возобновляемой энергетики (ВЭ) [1].

В настоящее время мировое энергопотребление опирается преимущественно на ископаемые энергоресурсы. Вместе с тем большинство стран мира последовательно диверсифицируют используемые энергоресурсы с целью укрепления энергетической безопасности, под которой понимается «бесперебойное наличие энергетических ресурсов по доступной цене», и учитывают эту задачу в государственном стратегическом планировании.

Необходимость обеспечения энергетической безопасности – важнейшая движущая сила развития новых энергетических технологий, в том числе тех, которые делают доступными новые источники энергии или удешевляют существующие. Наличие технологической базы и заделов в энергетике позволяет любой стране получить дополнительные конкурентные преимущества на мировых рынках.

Один из основных вызовов для мировой энергетики – значительное увеличение энергопотребления в мире, обусловленный экономическим развитием и ростом населения планеты. В России к 2035 г. ожидается рост производства и потребления энергетических ресурсов на 27–28% по сравнению с 2010 г. При условии стабилизации численности населения страны на уровне 140–145 млн. чел., увеличения продолжительности жизни и повышения плотности населения в регионах Сибири и Дальнего Востока рост энергопотребления составит в среднем 1,5% в год до 2040 г. Однако структура энергетического баланса будет меняться: за период 2015–2040 гг. доля нефти сократится с 31 до 27%, угля – с 28 до 25%; природного газа – увеличится с 22 до 24%.

Что касается возобновляемых источников энергии (ВИЭ), доля гидроэнергии, по прогнозам, вырастет с 2 до 3%, биоэнергии – с 10 до 11%, других ВИЭ – с 1 до 4% [2]. Ожидается увеличение выработки электроэнергии на базе ВИЭ в 10–14 раз [3]. Если не появятся новые конкурентоспособные источники энергии, к 2050 г. среди ВИЭ будут преобладать ветровая (34%), гидро- (30%) и солнечная (18%) энергия [4].

Для топливно-энергетических комплексов основными целями являются развитие нового производства высокотехнологичного оборудования и материалов для генерации на основе ВИЭ, создание новых рабочих мест и компетенций в технологической и научной сфере. ВИЭ выступают в роли катализатора изменений структуры рынка электроэнергии и совершенствования энергетической системы. Цели развития возобновляемой энергетики в сельских районах и зонах децентрализованного энергоснабжения – повышение доступности и надежности энергоснабжения, экономия бюджетных средств, создание рабочих мест для населения и дополнительных доходов местных бюджетов, рост качества жизни населения.

В крупных городах и их пригородах развитие ВЭ связано в первую очередь с решением экологических проблем. В Красноярском крае имеются достаточные запасы альтернативных (возобновляемых) источников энергии – обобщены и систематизированы в [5].

Так наибольшим потенциалом энергии ветра на территории Красноярского края обладают муниципальные образования, расположенные в северной его части, а именно – Таймырский Долгано-Ненецкий муниципальный район [6], где среднегодовая скорость ветра может достигать 7,5 м/с (о. Диксон), в то время как для функционирования ветроустановок необходима средняя скорость ветра от 3,6 м/с. Перспективными для использования энергии ветра являются также Ачинский, Боготольский и Уярский районы, скорость ветра в которых превышает 4 м/с.

Анализ потенциала ВИЭ Красноярского края показал, что наиболее перспективными территориями для использования энергии солнца являются Шушенский и Ермаковский районы, у которых потенциал энергии солнца составляет 1198 и 1205 кВт·ч/м² за год соответственно.

Инновационная составляющая развития энергетического сектора Красноярского края также связана с развитием биоэнергетики, которая является самым новым и

динамически развивающимся направлением среди других видов ВИЭ. Наиболее оптимальным вариантом развития «зелёной энергетики» в крае является совокупность следующих структур [7]: торфяная энергетика (в регионе более 700 месторождений торфа; при этом использование торфа в энергетике края может составить более 40% от общего энергетического баланса), производство топлива на основе масленичных культур (рапс) и лигноцеллюлозы (отходы лесопромышленного и агропромышленного секторов). Именно данных ресурсов в регионе наибольшее количество, что позволяет отрасли альтернативной энергетики и в целом отрасли всей экономики динамично развиваться.

В 2015 г. в Республике Хакасия введена компанией «ЕвроСибЭнерго» в эксплуатацию электростанция, работающая на солнечной энергии – «Абаканская СЭС» установленной мощности 5,2 МВт (возможность увеличения до 35 МВт). В среднем к 2020 г. планируется производить 9 млн кВт·ч/год электроэнергии.

Как поясняют в компании «ЕвроСибЭнерго», новая станция – это в первую очередь технологический шаг вперёд. Во-первых, в плане экологии – уже нынешний объём выработки электроэнергии на «Абаканской СЭС» позволяет избежать сжигания 3,5 тыс. тонн угля и выбросов примерно 9 тыс. тонн парниковых газов. Кроме того, строительство станции дало импульс появлению новых производств. В частности, для создания солнечных панелей компания «ЕвроСибЭнерго» организовала собственное инновационное производство по выращиванию слитков мультикристаллического кремния (основной материал для солнечных модулей) в Ангарске, а также сборку инверторов в Дивногорске.

С учётом географических и климатических особенностей Республики Тыва с высоким уровнем инсоляции (солнечная радиация 4,5 кВт·ч/м²) наиболее перспективными из возобновляемых источников энергии к реализации являются проекты по установке фотоэлектрических станций разной мощности [8], при этом обеспечиваются условия для вложения частных инвестиций. Планируется строительство двух солнечных электрических станций в двух селениях Монгун-Тайгинского кожууна мощностью 400 и 200 кВт. Намечается строительство гибридных солнечных электростанций (технология солнце-дизель) в труднодоступных населённых пунктах, в которых электроснабжение потребителей обеспечивается только дизельными электростанциями. Рассматривается возможность реализации проектов по обеспечению мобильной связи ПАО «Мегафон» в ряде селений с применением фотоэлектрических станций на основе государственно-частного партнёрства.

Энергоснабжение от энергетических установок, использующих ВИЭ (в первую очередь ветровую энергию в условиях удалённых северных посёлков или солнечную энергию в южных районах Восточной Сибири), экономически оправдано, так как они замещают дизельные ЭС с себестоимостью производства электроэнергии на порядок выше.

Таким образом, Красноярский край и Республики Хакасия, Тыва перспективны для инновационного развития возобновляемой энергетики и управления ею.

Основываясь на положительном опыте развитых стран по внедрению энергетических установок, использующих ВИЭ, в нашей стране необходима разработка и реализация государственной политики по поддержке этого направления развития энергетики, включающая не только разработку инновационных проектов, производство отечественного оборудования и его внедрение, но и дотации на первоначальном этапе.

1. Проскурякова, Л.Н. Возобновляемая энергетика 2030: глобальные вызовы и долгосрочные тенденции инновационного развития / Л.Н. Проскурякова, Г.В. Ермоленко; Нац. исслед. ун-т «Высшая школа экономики». – М.: НИУ ВШЭ, 2017. – 96 с.
2. Прогноз развития энергетики мира и России 2016. – М.: Институт энергетических исследований РАН (ИНЭИ РАН), Аналитический центр (АЦ) при Правительстве РФ.

3. Прогноз научно-технологического развития отраслей топливно-энергетического комплекса России на период до 2035 года. Утв. Министром энергетики Российской Федерации 14 октября 2016 г. – Режим доступа: <http://minenergo.gov.ru/node/6365>.
4. OECD/IEA. World Energy Outlook 2014. Paris: InternationalEnergyAgency.
5. Поподько, Г.И. Анализ направлений инновационного развития энергетического комплекса Красноярского края / Г.И. Поподько, Е.Н. Голоушкина // Петербургский экономический журнал. – СПб.: Санкт-Петербургский гос. ин-т кино и телевид., 2016. – № 3. – С. 64–73.
6. Бобров А.В. Энергоснабжение изолированных потребителей северных районов Красноярского края на базе возобновляемых источников энергии / А.В. Бобров, В.А. Тремясов, Д.А. Чернышев // Инновации. – №3 – 2009. – С. 74–77.
7. Джафаров, Т.А. Структура биоэнергетики и перспективы её развития в Красноярском крае // Молодёжь и наука: Сборник материалов VI Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых учёных [Электронный ресурс]. – Красноярск: Сиб.федер. ун-т, 2011. – Режим доступа: <http://conf.sfu-kras.ru/sites/mn2010/section13.html>, свободный.
8. Развитие возобновляемых источников энергии / Министерство топлива и энергетики Республики Тыва. Официальный сайт. – Кызыл, 2017 – Режим доступа: <http://minenergo.tuva.ru/node/605>.

Торопов В.П.

Проект устройства, отбирающего энергию у самого мощного природного аккумулятора – окружающего нас воздуха. Т.е. атмосферы Земли

(Россия, Крым, п.Октябрьское)

doi:10.18411/spc-16-01-2018-16

idsp: 000001:spc-16-01-2018-16

Наша атмосфера обладает огромным количеством энергии. Полная энергия находится по формуле: $E = C_{уд} \times \Delta T \times m$, где E – полная энергия, дж; $C_{уд}$ – теплоёмкость воздуха = 1000 дж/кг град.; ΔT – разница температур средней и нулевой нашей атмосферы $300-0 = 300$ градусов Кельвина; m – масса нашей атмосферы, кг – очень большое число тонн. Всё это перемножается и получается очень большое число, практически равное бесконечности. А ещё существует закон сохранения энергии, открытый М.В. Ломоносовым: энергия не может из ничего возникнуть, а равно и нигде исчезнуть, она может только превратиться в другой вид. До сих пор считалось, от воздуха невозможно отнять энергию. Я же доказал, что возможно с помощью моего устройства. Оно по своей конструкции будет напоминать конструкцию газотурбинного двигателя с кое-какими изменениями. Меняются местами турбина и компрессор и вместо камеры сгорания установлен теплообменник.

Сади Карно, великий учёный прошлого, описал прямой цикл для теплового двигателя и обратный цикл для холодильных установок. Он брал теплоту от охлаждаемых тел. Не умаляю его работы, но я пошёл дальше его: разработал обратный цикл для теплового двигателя. Я же брал теплоту от потока воздуха после сжатия в компрессоре и поступающего через возвратную систему в теплообменник.

Сущность изобретения показана на схематическом чертеже Фиг.1.

1 – стартёр-генератор; 2 – вал устройства; 3 – турбина; 4 – теплообменник; 5 – компрессор; 6 – возвратная система; 7 – выход воздуха.

Устройство для преобразования воздушного потока работает следующим образом.

Вал устройства разгоняется стартер-генератором в режиме стартера до оборотов, на которых работа, производимая турбиной, не станет больше затрачиваемой компрессором, на величину передачи теплоты в теплообменнике. Далее происходит переключение стартер-генератора в режим генератора. Вал выходит на обороты малого газа. Оборотах руководит автоматическое устройство, заведённое на датчик оборотов вала. Обороты задаются натяжением пружины. При изменении оборотов на уменьшение, заслонка перекрывает щель перепуска воздуха, обороты увеличиваются. И, наоборот, при отклонении оборотов на увеличение, заслонка передвигается на открытие щели. Обороты уменьшаются. При включении нагрузки, щель перепуска воздуха прикрывается, и устройство выходит на режим заданных рабочих оборотов.

При вращении вала, компрессор работает как вакуумный и создаёт на входе разрежённую область, куда из атмосферы начинает стекаться воздух, проходя воздухозаборник, турбину и теплообменник. Возникает поток воздуха, подчиняющийся всем законам термодинамики. Проходя турбину, воздух в сопловом аппарате разгоняется до определённой скорости, при этом будут изменяться его параметры по закону адиабаты: скорость увеличиваться, давление и температура уменьшаться. Далее при проходе рабочего колеса воздух будет ещё расширяться, при этом давление и температура ещё упадут. Относительная скорость потока воздуха возрастет. Абсолютная скорость упадет до определённых значений (относительная скорость будет складываться с линейной скоростью лопаток турбины), вызвав ещё падение давления и температуры. Пройдя все ступени турбины, поток изменит свои параметры: давление и температура понизится, объём увеличится.

Далее, имея пониженные температуру и давление, воздух поступает в теплообменник, где за счет естественного теплообмена будет получать от встречного потока воздуха, вернувшегося из-за компрессора, имеющего после сжатия воздуха повышенные температуру и давление, теплоту самопроизвольно. Воздух при нагревании будет расширяться по закону изотермы, т.е. в сужающемся канале, а, следовательно, и увеличивать свою скорость, тем самым восстановив потерянную кинетическую энергию на рабочем колесе турбины, которая передастся валу устройства. Особенность закона изотермы в том, что вся теплота, переданная в теплообменнике, превращается в работу, в нашем случае в скорость. Далее воздух поступит на вход компрессора, где он будет по закону адиабаты сжиматься до атмосферного давления. После сжатия, воздух, проходя возвратную систему и перепускную заслонку, возвращается в теплообменник для отдачи своей теплоты самопроизвольно потоку воздуха после турбины, имеющего пониженную температуру, по отношению к потоку воздуха, вернувшегося после его сжатия. Процесс будет протекать по закону изотермы в расширяющемся канале. Отдавший часть теплоты воздух при давлении, равном атмосферному, выходит наружу, т.е. покидает устройство. Процесс закончен. В этом процессе будет учитываться одна особенность. При работе компрессора, как сжимающего, работа будет на графике зависимости давления от объёма располагаться между линией зависимости и осью объёма. При работе как вакуумного, работа тоже будет располагаться там же, но знаки поменяются на противоположные. Поэтому и работа устройства будет вычисляться:

$$l_{\text{сум}} = l_{\text{турб}} + l_{\text{тепл}} - l_{\text{комп}} - l_{\text{тр}}, = l_{\text{тепл}} - l_{\text{тр}}, \text{ при } l_{\text{турб}} = l_{\text{комп}}, \text{ где } l - \text{ работа}$$

Фиг.2 – изображены в деталях входное устройство и классическая трёхступенчатая турбина, в которую входят лопатки направляющего аппарата 5 (сужающиеся каналы), лопатки рабочего колеса 6. Все процессы, протекающие в турбине, теплообменнике, диффузоре и осевом компрессоре рассчитаны согласно термодинамическим законам по отношению к воздушному потоку, возникшему при работе вакуумного компрессора. Стартёр-генератор при запуске работает в режиме стартера. После выхода устройства на рабочие обороты стартёр-генератор переключается на режим генератора.

Фиг.3 – теплообменник, представляющий себя трубчатый противоточный воздуховоздушный радиатор. Мощность устройства будет зависеть от площади

теплообмена в теплообменнике, разности температур потоков воздуха после турбины и после сжатия воздуха в компрессоре, способа теплообмена (попутными потоками, поперечным обдувом и противотоком).

Фиг.4 – вакуумный осевой компрессор (лопатки рабочего колеса 7 и лопатки спрямляющего аппарата 8) и возвратная система 9 с перепускной заслонкой 10 для автоматической регулировки оборотов (мощности), заведённой на датчик оборотов. При увеличении мощности будут падать обороты, но датчик установит заслонку в положение, более прикрывающее перепуск воздуха в атмосферу, теплообмен увеличится. Обороты снова станут заданными. Осевой компрессор представляет себе трёхступенчатый классический компрессор с рабочим колесом и спрямляющим аппаратом. Последняя ступень рассчитана с условием прироста кинетической энергии потока воздуха в теплообменнике. Несколько ниже изображены профили лопаток. Ещё ниже – графики зависимости параметров воздушного потока: P па, C м/сек, T Кельвин, от прохождения той или иной части устройства.

1. Б.Н.Юдаев. Техническая термодинамика. Теплопередача. Москва «Высшая школа». 1988г. 479 стр.
2. И.И.Кулагин. Основы теории авиационных газотурбинных двигателей. Москва. 1967г. Военное издательство министерства обороны СССР.

Научное издание

**Научный диалог:
Вопросы точных и технических наук**

Сборник научных трудов, по материалам
XIII международной научно-практической конференции
16 января 2018 г.

SPLN 001-000001-0239-TT

Подписано в печать 25.01.2018. Тираж 400 экз.
Формат. 60x84/16. Объем уч.-изд. л. 3,45
Бумага офсетная. Печать оперативная.
Отпечатано в типографии НИЦ «Л-Журнал»
Главный редактор: Иванов Владислав Вячеславович