



ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
УПРАВЛЕНИЕ ЦИФРОВЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Кафедра «Прикладная математика»

Учебное пособие по дисциплине

«Дипломное проектирование по направлению «Математические методы в науке и технике» Часть 2

Авторы:
Ладоша Е. Н.,
Цымбалов Д. С.,
Яценко О. В.

Ростов-на-Дону, 2020



Аннотация

Учебное пособие предназначено для студентов очной формы обучения по направлению 01.03.04 «Прикладная математика».

Авторы

к.т.н., доцент, начальник «УЦОТ»
Ладоша Е.Н.,
ст. преподаватель кафедры «ЭиЭ»
Цымбалов Д.С.,
к.ф.-м.н., доцент кафедры «ПМ»
Яценко О.В.



Оглавление

Глава 4. Практическое моделирование тепловых процессов	7
4.1 Методы численного анализа теплообмена	7
4.2 Теплообмен: варианты, классификация, модели.....	8
4.2.1 Основные понятия и определения	10
4.3 Законы молекулярного тепло- и массообмена.....	14
4.4 Законы конвективного теплообмена	19
4.4.1 Классическая постановка задачи теплопроводности	21
4.5 Линейная задача о распространении тепла	21
4.6 Математическая модель теплопроводности	24
4.7 Вывод уравнения теплопроводности.....	24
4.7.1 Поток тепла через элементарный объем.....	24
4.7.2 Общий метод вывода уравнения теплопроводности	27
4.8 Постановка краевой задачи	28
4.8.1 Начальные условия.....	28
4.8.2 Граничные условия	29
4.9 Методы исследования моделей теплопроводности ...	33
4.9.1 О методах решения краевых задач	33
4.10 Метод разделения переменных	34
4.11 Практическое моделирование задач теплопроводности.....	45
4.11.1 Стационарное уравнение теплопроводности.....	45
4.11.2 Решение задачи с помощью рядов	57
4.12 Нестационарный вариант моделей в теплопроводности.....	88
4.12.1 Реализация и тестирование сеточного алгоритма	88
4.12.2 Интегрирование задачи методом прямых.....	101
4.12.3 Конечно-элементный алгоритм	105
4.13 Сопоставление методов и средств моделирования в задачах теплопроводности.....	111
4.14 Астрофизическое приложение результатов: тепловая модель звезды	113
4.15 Тепловая и экологическая модели двигателя внутреннего сгорания	123

4.15.1 Модель теплофизических процессов в ДВС.....	123
4.15.2 Модель термохимических процессов в ДВС.....	134
Список первоисточников к параграфу 4.14.....	163
4.16 Тепловой режим двигателя внутреннего сгорания с системой охлаждения	166
Выводы по разделу	176
Список первоисточников к параграфу 4.16.....	176
Глава 5. Практическое моделирование электрических процессов.....	177
5.1 Моделирование зарядного устройства для автомобильных аккумуляторов	177
5.2 Техническое обслуживание автомобильного аккумулятора: схемные решения и функционирование зарядных устройств	184
5.2.1 Особенности эксплуатации и обслуживания автомобильных аккумуляторов	184
5.2.2 Анализ характеристик промышленных зарядных устройств для автомобильных аккумуляторов	188
5.2.3 Объект проектирования и постановка задач.....	191
Глава 6. Практическое конструирование, расчёты, испытания и сравнение с промышленным образцом	192
6.1 Зарядное устройство из компьютерного блока питания	192
6.2 Зарядное устройство на базе токоограничивающего конденсатора	194
6.3 Измерение диэлектрической проницаемости пищевых продуктов аппаратными средствами ПК типа «ноутбук»	206
Глава 7. Диэлектрическая проницаемость зерноматериалов: физические основы и средства измерения	208
7.1 Диэлектрическая проницаемость зерна: физические основы и связь с важными технологическими параметрами.....	168
7.1.1 Связь физико-химических свойств с диэлектрической проницаемостью сельскохозяйственных и пищевых продуктов.....	210

Глава 9. Планирование эксперимента, сбор, обработка и интерпретация данных	275
Глава 10. Рекомендации к практическому использованию разработки в учебном процессе вуза и при проведении экспресс-анализа зерновых на влажность	319
Глава 11. Практическое моделирование процессов в микросистемах	324
11.1. Моделирование квантовых систем (Забелин	324
Глава 12. Математический аппарат стационарной квантовой механики	327
12.1 Классификация дифференциальных уравнений	327
12.2 Краевые задачи в квантовой механике	330
12.2.1 Бесконечно глубокая потенциальная яма	330
12.2.2 Бесконечно глубокая параболическая яма	332
12.2.3 Конечная потенциальная яма прямоугольного профиля со стенками разной высоты.....	336
12.3 Метод малого параметра в решении дифференциальных уравнений.....	345
12.4 Численное интегрирование краевой задачи для уравнения Шрёдингера	351
12.5 Постановка задач дипломной работы и техника их решения	359
12.6 Решение с базовым (невозмущенным) потенциалом	361
12.7 Возмущение по первому приближению	376
12.8 Методы, средства и результаты вычислительного эксперимента.....	389
12.8.1 Треугольная асимметричная потенциальная яма в полупространстве.....	389
12.8.2 Треугольная симметричная потенциальная яма.....	396
12.8.3 Гармонический осциллятор.....	399
12.8.4 Квантовый осциллятор в потенциале Морзе... 	405
12.8.5 Прямая задача молекулярной спектроскопии. 	410
12.8.6 Обратная задача молекулярной	

спектроскопии.....	415
Выводы по разделу.....	416
Список первоисточников к параграфу 12.8.....	417
12.9 Оценка параметров генерирующей среды CO ₂ -лазера с оптической накачкой (Чакуров).....	419
12.9.1 Конструкция и процесс генерации в газовом CO ₂ - лазере.....	421
12.9.1.1 Описание конструкции и процесса.....	421
12.9.1.2 Динамика инверсной населенности в рабочей среде CO ₂ -лазера.....	426
12.9.1.3 Кинетическая модель среды CO ₂ -лазера и первичные данные.....	428
12.9.1.4 Точность и область применимости моде- ли.....	430
Выводы по разделу.....	432
12.10 Организация и результаты вычислительного экспери- мента.....	432
12.10.1 Программная реализация модели.....	433
12.10.2 Исходная термокинетическая информация.....	445
12.10.3 Результаты компьютерной имитации и их трактов- ка.....	447
12.10.4 Результаты численной оптимизации параметров лазерной среды.....	455
Выводы по разделу 12.10	458
Список первоисточников к параграфу 12.9.....	458

ГЛАВА 4. ПРАКТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ

В этом томе объектами компьютерного моделирования выступают тепловые, электрические и микромасштабные (квантовые процессы). При этом общий подход «модель – алгоритм – программа», а также технологии конструирования и анализа моделей не претерпевают изменений. Естественно, особенности элементов и связей в объектах новой природы требуют определенной специфики привлекаемых методов и средств моделирования.

4.1 Методы численного анализа теплообмена

Любая современная наукоемкая технология так или иначе использует результаты вычислительных экспериментов. В ведущих научных центрах развитых стран интенсивно разрабатываются новые численные методы, алгоритмы и пакеты прикладных программ для решения соответствующих классов задач.

Теплопередача является сложным процессом и играет важную роль в современной технике. При изучении ее делят на простые явления. Частным случаем является теплопроводность – перенос тепла (внутренней энергии) при непосредственном соприкосновении тел или частей одного тела с различной температурой.

В настоящее время практика требует от инженера умения творчески и самостоятельно использовать законы и методы теплопередачи, решать соответствующие задачи с использованием ЭВМ. Для этого требуется описать явление математически.

Поэтому целью исследовательской работы ставится всестороннее сопоставление известных аналитических, численных и комбинированных методов исследования моделей теплопроводности.

Достижение поставленной цели осуществлялось посредством решения следующих задач:

- изучения известных моделей теплообмена в различных средах и условиях, а также методов их математического анализа и программного воплощения для компьютерной имитации;
- выбора или разработки подходящих математических методов

и алгоритмов, позволяющих адекватно реализовать и изучить выбранные модели теплопроводности аналитически и/или численно с использованием специализированного ПО;

- реализации предметных моделей в форме компьютерной программы (набора программ), удовлетворяющих требованиям безопасности и комфортности труда с использованием ПК;
- проведения компьютерного эксперимента с моделями в целях выяснения области их применимости и степени адекватности.
- Результат работы, полученный путем решения поставленных задач, следующий:
- используя методы прикладной математики разработаны и апробированы математический аппарат и программные средства моделирования стационарных и нестационарных задач теплопроводности в технических и природных системах;
- разработка воплощена в совокупность аналитических и численных алгоритмов, позволяющих успешно решать две поставленные руководителем задач, которые представляют интерес для техники и естествознания;
- дана интерпретация результатов проведенного вычислительного эксперимента.

4.2 Теплообмен: варианты, классификация, модели

Теплообменом называют процесс распространения теплоты в пространстве.

Различают три механизма распространения теплоты в среде:

- теплопроводность (кондукция, диффузия);
- конвекция;
- тепловое излучение (радиация).

Теплопроводность – перенос тепла микроскопическими частицами вещества в процессе их теплового движения.

Механизмы теплопроводности:

- в газах – по причине обмена энергией при упругом соударении молекул, имеющих различную скорость теплового движения;
- в жидкостях и твердых диэлектриках – путем передачи тепла молекулами и атомами соседним частицам вещества, передачей упругих волн колебаний кристаллической решетки;
- в металлах – движением свободных электронов, и передачей колебаний кристаллической решетки.

Таким образом, основой теплопроводности является кондукционный и диффузионный механизм переноса тепла.

Явление конвекции сопровождается теплопроводностью и наблюдается в жидкостях, газах и заключается в переносе тепла макроскопическими частицами вещества.

Виды конвекции:

- свободная – в неоднородном поле массовых или поверхностных сил;
- вынужденная – под действием внешних вынуждающих сил.

Теплообмен излучением – перенос теплоты посредством электромагнитного поля. Внутренняя энергия тела переходит в энергию электромагнитного поля и обратно во внутреннюю энергию поглощающего тела. При теплообмене излучением телом обмениваются даже тела, разделенные вакуумом.

Все три вида переноса тепла выполняются одновременно и их в совокупности называют сложным теплообменом.

Виды сложного теплообмена:

- радиационно-кондуктивный теплообмен – теплообмен излучением и теплопроводностью;
- радиационно-конвективный теплообмен состоит из всех трёх способов переноса тепла;
- теплоотдача – теплообмен между твердой поверхностью тела и текучей средой;
- теплопередача – теплообмен между двумя жидкими или газообразными средами, разделенными стеной.

Сложный теплообмен сопровождается переносом массы, иначе называют явлением тепломассообмена.

4.2.1 Основные понятия и определения

Для теплообмена нужна разная температура в различных точках тела.

Температурное поле – совокупность мгновенных значений температуры t во всех точках изучаемого пространства. В общем случае

$$t = t(x, y, z, \tau) \quad (4.1)$$

Изменяющееся во времени, температурное поле (1.1), называется нестационарным (неустановившимся). Если температура не изменяется со временем, $t = t(x, y, z)$, оно называется стационарным (установившимся). По количеству используемых координат температурные поля различаются: трехмерные $t = t(x, y, z)$ двумерные $t = t(x, y)$ и одномерные $t = t(x)$.

Температурное поле можно представить совокупностью изотермических поверхностей (Рисунок 0.1). След изотермической поверхности на плоскости называется изотерма – линия постоянной температуры ($t = \text{const}$).

Интенсивность теплообмена характеризуется тепловыми потоками.

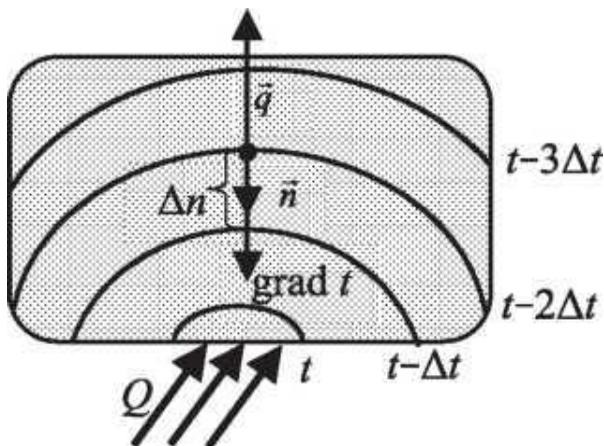


Рисунок 0.1– Представление температурного поля

Тепловым потоком Φ называется тепло dQ , передаваемое за время dt через произвольную поверхность,

$$\Phi = \frac{dQ}{dt} \left[\frac{\text{Дж}}{\text{с}} \Rightarrow \text{Вт} \right] \quad (4.2)$$

Плотность теплового потока \vec{q} Вт/м² – векторная величина, направленная по нормали к изотермической поверхности в сторону увеличения температуры и равную тепловому потоку, отнесенному к площади поверхности dS :

$$\vec{q} = \frac{d\Phi}{dS} \vec{n} = \frac{d^2Q}{dS dt} \quad (4.3)$$

В общем случае плотность теплового потока – функция координат и времени, с её помощью можно определить расход тепла (Дж) через поверхность тела,

$$d^2Q = q dS d\tau, \text{ откуда } Q = \int_S \int_{\tau} q dS d\tau \quad (4.4)$$

Следовательно, для определения расхода тепла через поверхность тела необходимо знать тепловые потоки внутри этого тела. Тепловые потоки возникают в теле только при наличии разности температур.

Температурным градиентом в данной точке тела называется векторная величина (К/м), направленная по нормали к изотерме в сторону увеличения температуры и равная по модулю производной от температуры по нормали к изотерме:

$$\text{grad } t \equiv \nabla t = \lim_{\Delta n \rightarrow \infty} \frac{\Delta t}{\Delta n} = \frac{\partial t}{\partial n} \vec{n}.$$

(4.5)

В прямоугольной системе координат

$$\text{grad } t = \frac{\partial t}{\partial n} \vec{n} = \frac{\partial t}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial t}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial t}{\partial z} \vec{k},$$

(4.6)

где

$$\frac{\partial t}{\partial x} = \frac{\partial t}{\partial n} \cos(\widehat{n, x}), \quad \frac{\partial t}{\partial y} = \frac{\partial t}{\partial n} \cos(\widehat{n, y}), \quad \frac{\partial t}{\partial z} = \frac{\partial t}{\partial n} \cos(\widehat{n, z})$$

Температурный градиент в произвольном направлении / под углом α к нормали (Рисунок 0.2)

$$\frac{\partial t}{\partial l} = \frac{\partial t}{\partial n} \cos \alpha.$$

(4.7)

Для массообмена необходима разность концентраций в различных точках тела.

Процессы массообмена происходят в многофазных системах и приводят к установлению равновесного распределения концентраций i -го компонента примеси.

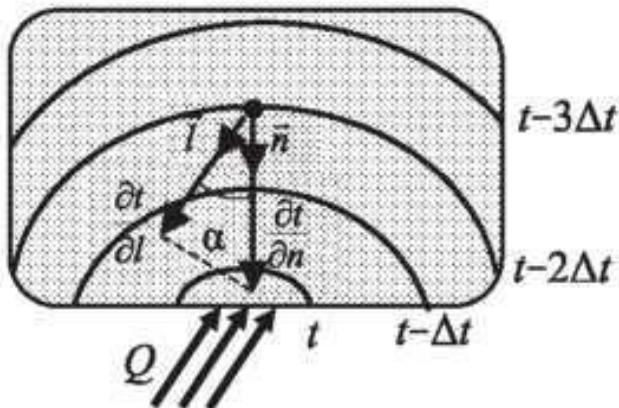


Рисунок 0.2– Градиент температуры в произвольном направлении

Концентрацией C_i (кг/м³) i -го компонента примеси в объеме – отношение массы примеси к объему,

$$C_i = \frac{m_i}{V} . \quad (4.8)$$

Векторная величина, направленная по нормали к изоконцентрической поверхности в сторону увеличения концентрации и равная потоку массы, отнесенному к площади поверхности dS – плотность потока массы i -го компонента \vec{q}_{mi} (кг/м²с),

$$\vec{q}_{mi} = \frac{d\Phi_{mi}}{dS} \vec{n} = \frac{d^2 m_i}{dS d\tau} \vec{n} . \quad (4.9)$$

Функция координат и времени – общий случай плотность потока массы i -го компонента смеси; зная её, можно определить расход массы через поверхность тела (кг),

$$d^2 m_i = q_{mi} dS d\tau , \text{ откуда } m_i = \int_S \int_{\tau} q_{mi} dS d\tau . \quad (4.10)$$

Следовательно, зная потоки концентрации примеси внутри тела можно определить расход массы через его поверхность. Исключительно при наличии разности концентраций примеси, в объеме возникают потоки примеси.

Концентрационным градиентом (кг/м^4) в данной точке тела называется векторная величина, направленная по нормали к изоконцентрате в сторону увеличения концентрации примеси и равная по модулю производной от концентрации примеси по нормали к изоконцентрате,

$$\text{grad } C = \lim_{\Delta n \rightarrow \infty} \frac{\Delta C}{\Delta n} = \frac{\partial C}{\partial n} \vec{n} . \quad (4.11)$$

4.3 Законы молекулярного тепло- и массообмена

В соответствии с законом Фурье, которому подчиняется процесс теплопроводности, количество тепла dQ , проходящей через площадку dS за время dt , пропорционально температурному градиенту (Рисунок 0.3),

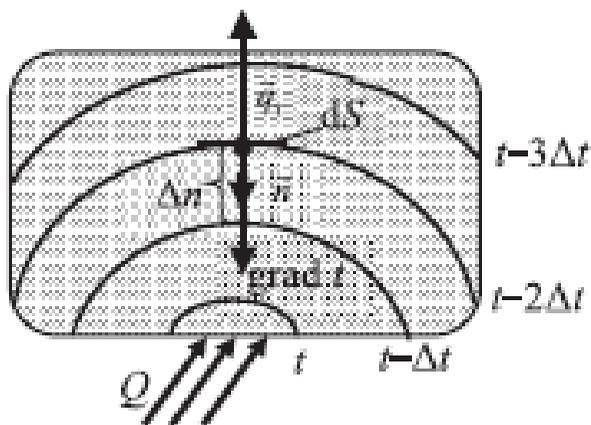


Рисунок 0.3– Схема к закону Фурье

$$dQ = -\lambda \frac{\partial t}{\partial n} dS dt \quad (4.12)$$

При делении на $dS dt$ получается

$$\vec{q}_r = -\lambda \frac{\partial t}{\partial n} \vec{n} = -\lambda \nabla t = -\lambda \mathbf{grad} t \quad (4.13)$$

т.е. при теплопроводности, плотность теплового потока прямо пропорциональна температурному градиенту.

Коэффициент пропорциональности λ – коэффициент теплопроводности,

$$\lambda = \frac{|q_r|}{|\partial t / \partial n|} \left(\frac{\text{Вт м}}{\text{м}^2 \text{ К}} \Rightarrow \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}} \right) \quad (4.14)$$

Одним из важнейших теплофизических свойств вещества является коэффициент теплопроводности, который характеризует плотность теплового потока при единичном температурном градиенте.

Плотность теплового потока возрастает по 2-му закону термодинамики в направлении уменьшения температуры, при этом знак «минус» указывает на противоположное направление вектора плотности теплового потока и температурного градиента.

В (Рисунок 0.4– Порядок значений коэффициентов теплопроводности различных материалов) представлены коэффициенты теплопроводности некоторых материалов. Анализ данных, представленных в этой таблице показывает, что серебро - наиболее теплопроводный материал.

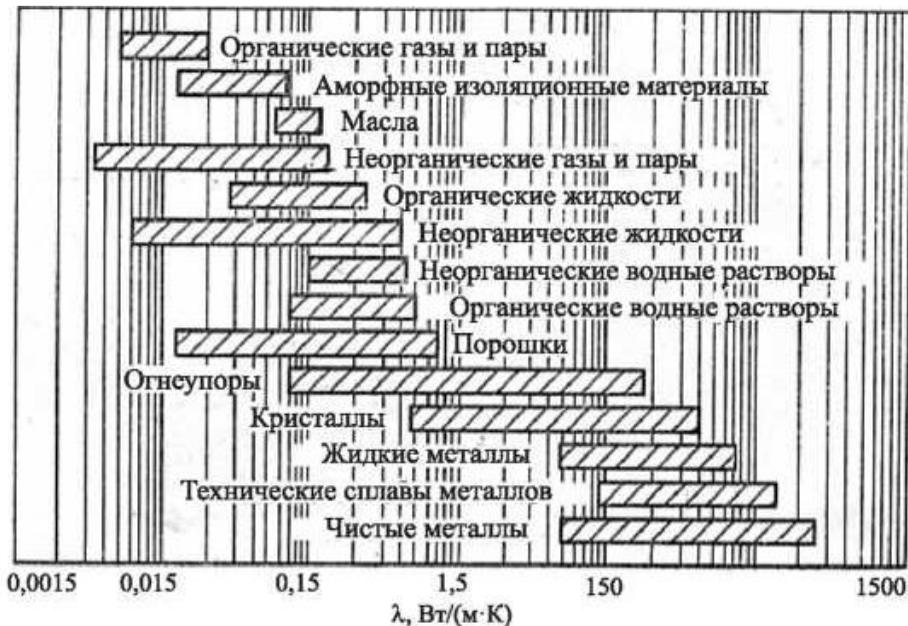


Рисунок 0.4– Порядок значений коэффициентов теплопроводности различных материалов

Например, теплопроводность технически чистого железа уменьшается с увеличением температуры и зависит от содержания примесей. А теплопроводность сосны зависит от направления.

Теплоизоляционными называют материалами, для которых коэффициент теплопроводности $\lambda < 0,25$ (Вт/(м·К)). На рис. 1.4 показаны интервальные значения коэффициентов теплопроводности для широкого спектра материалов.

Формулу расхода тепла через поверхность тела можно получить, проинтегрировав уравнение (1.13):

$$Q = - \int_S \int_t \lambda \frac{\partial t}{\partial n} dS dt \quad (4.15)$$

Эта формула показывает, что для определения расхода тепла через его поверхность необходим расчет температурного поля внутри тела.

Таблица 4.1 – Коэффициенты теплопроводности различных материалов

№ п/п	(Наименование материала)	$t, ^\circ\text{C}$	$\lambda, (\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К}))$
1	2	3	4
1	Серебро	0	458
2	Медь	0	384
3	Алюминий	0	204
4	Железо (99,92 %)	20	72
5	Железо (99,92 %)	300	55
6	Железо (99,92 %)	700	34
7	Железо (99,92 %)	1000	28
8	Сталь 45	20	54
9	Сталь Р18 (быстрорежущая)	20	25
10	Бетон	20	1,28
11	Стекло	20	0,745
12	Вода	20	0,55
13	Сосна вдоль волокон	20	0,256
14	Сосна поперек волокон	20	0,107
15	Стекловата	0	0,0372
16	Воздух	0	0,0244

Существует несколько видов диффузии:

- концентрационная;
- термодиффузия;
- бародиффузия.

Согласно закону Фика (которым описывается концентрационная диффузия) в однородной по температуре и давлению макроскопически неподвижной смеси плотность потока массы \dot{m} компонента смеси пропорциональна градиенту концентрации этого компонента.

Коэффициент пропорциональности D называется коэффициентом молекулярной диффузии,

$$D = \frac{|q_{mi}|}{\left| \frac{\partial C_i}{\partial n} \right|} \cdot \left(\frac{\text{КГ М}^4}{\text{М}^2 \text{ КГ}} \Rightarrow \frac{\text{М}^2}{\text{с}} \right) \quad (4.16)$$

Коэффициент молекулярной диффузии (коэффициент диффузии) характеризует плотность потока массы i -го компонента смеси при единичном градиенте концентрации примеси. При этом знак «минус» указывает на противоположность направлений векторов плотности потока массы i -го компонента смеси и градиента концентрации примеси. Иными словами, плотность потока массы i -го компонента смеси возрастает в направлении уменьшения концентрации этого компонента.

Термодиффузия происходит в смеси с неоднородной температурой: более тяжелые молекулы стремятся переместиться в холодные области (эффект Соре).

Бародиффузия происходит в смеси с неоднородным давлением: тяжелые молекулы стремятся переместиться в область повышенного давления.

При термо- и бародиффузии плотность потока массы определяется соотношением

$$q_{mi} = -\frac{D_t}{t} \frac{\partial t}{\partial n} = -\frac{D_p}{p} \frac{\partial p}{\partial n}, \quad (4.17)$$

где D_t и D_p - коэффициенты термо- и бародиффузии, $D_t = k_t D$, $k_t = D_t / D$, $k_p = D_p / D$ - термо- и бародиффузионные отношения.

В общем случае плотность потока массы i -го компонента смеси определяется суперпозицией концентрационной, термо- и бародиффузий,

$$q_{mi} = -\left(D \frac{\partial C_i}{\partial n} + \frac{D_t}{t} \frac{\partial t}{\partial n} + \frac{D_p}{p} \frac{\partial p}{\partial n} \right). \quad (4.18)$$

Если молекулярные массы компонентов смеси равны, то

термо- и бародиффузия отсутствуют, а главную роль играет концентрационная диффузия. При этом соотношение (1.19) переходит в закон Фика (1.16).

4.4 Законы конвективного теплообмена

В случае конвективного теплообмена перенос теплоты неразрывно связан с переносом массы. Если текучая среда плотностью ρ (кг/м³) движется в направлении оси x со скоростью u_x (м/с), то её массовая скорость характеризует массу среды, проходящей в единицу времени через единичную площадку,

$$\rho u_x \left[\frac{\text{кг} \cdot \text{м}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}} \Rightarrow \frac{\text{кг}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}} \right]. \quad (4.19)$$

Теплосодержание среды может быть описано через массовую теплоёмкость c [Дж/(кг*К)] и температуру t .

$$ct \left[\frac{\text{Дж} \cdot \text{К}}{\text{кг} \cdot \text{К}} \Rightarrow \frac{\text{Дж}}{\text{кг}} \right]. \quad (4.20)$$

Плотность теплового потока, определяемая конвекцией, равна произведению массовой скорости на теплосодержание,

$$q_k = \rho u_x ct \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}} \frac{\text{Дж}}{\text{кг}} \Rightarrow \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2} \right]. \quad (4.21)$$

Поскольку конвекция напрямую связана с теплопроводностью, то общая плотность теплового потока при конвективном теплообмене

$$\vec{q} = \vec{q}_T + \vec{q}_k = -\lambda \nabla t + \rho \vec{u} ct. \quad (4.22)$$

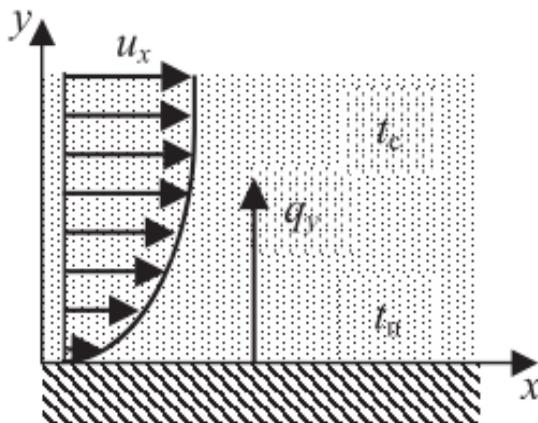


Рисунок 0.5 – Схема теплоотдачи

Теплоотдачей называется конвективный теплообмен между потоком текучей среды и поверхностью соприкасающегося тела (Рисунок 0.5 – Схема теплоотдачи). Расчет теплоотдачи (Вт) производится согласно закону Ньютона-Рихмана:

$$d\Phi = \alpha(t_n - t_c)ds, \quad (4.23)$$

где температурный напор – это разность температуры поверхности тела (t_n) и температуры окружающей среды (t_c); α - коэффициент теплоотдачи, Вт/(м²·К),

$$\alpha = \frac{d\Phi/dS}{t_n - t_c}. \quad (4.24)$$

Плотность теплового потока на границе текучей среды и соприкасающегося с ней тела, отнесенная к температурному напору, характеризуется коэффициентом теплоотдачи.

При конвективном теплообмене между поверхностью тела и окружающей средой плотность теплового потока (Вт/м²) описывается уравнением теплоотдачи,

$$q_k = \alpha(t_n - t_c). \quad (4.25)$$

4.4.1 Классическая постановка задачи теплопроводности

Уравнением теплопроводности называют простейшее уравнение параболического типа

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.26)$$

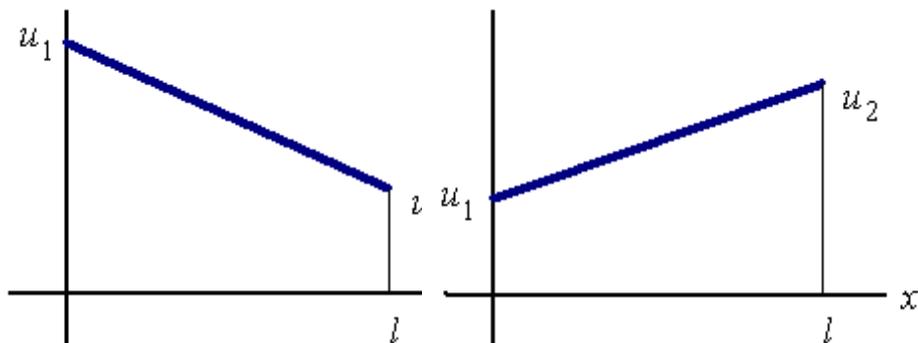
4.5 Линейная задача о распространении тепла

В однородном, очень тонком, теплоизолированном с боков стержне длины l в любой момент времени температуру во всех точках поперечного сечения можно считать одинаковой. Если концы такого стержня поддерживать при постоянных температурах u_1 и u_2 , то вдоль стержня установится линейное распределение температуры.

Температура $u(x)$ в конкретной точке линейно зависит от температуры концов и от координаты точки, от x :

$$u(x) = u_1 + \frac{u_2 - u_1}{l} x \quad (4.27)$$

Тепло будет направляться от более нагретого к менее нагретому концу стержня. О положительном тепловом потоке говорят в том случае, когда тепло движется в сторону возрастания x .



Положительный тепловой поток Отрицательный тепловой поток

Рисунок 0.6– Поток тепла

Функция $u(x, t)$ (т.е. температура в сечении x в момент времени t) описывает процесс распространения тепла в рассматриваемом стержне.

Указанная функция описывается уравнением параболического типа

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + F(x, t) = c\rho \frac{\partial u}{\partial t}, \quad (4.28)$$

где $k(x)$ – коэффициент теплопроводности материала стержня, $F(x, t)$ – объёмная плотность выделения (поглощения) тепла, c – удельная теплопроводность, ρ – плотность материала стержня.

В случае, если стержень однороден, то k , c и ρ можно считать постоянными. В таком случае уравнение распространения тепла в рассматриваемом стержне выглядит так

$$u_t = a^2 u_{xx} + f(x, t), \quad (4.29)$$

где $a^2 = \frac{k}{c\rho}$ – коэффициент теплопроводности,

$$f(x, t) = \frac{F(x, t)}{c\rho}$$

Если источники тепла отсутствуют, $F(x, t) = 0$, то однородное уравнение теплопроводности имеет следующий вид

$$u_t = a^2 u_{xx}$$

В том случае, когда стержень не изолирован и происходит боковой теплообмен, то уравнение для $u(x, t)$ выглядит так

$$u_t = a^2 u_{xx} - \alpha u + f(x, t), \quad (4.30)$$

где $\alpha = \frac{h}{c\rho}$, h – коэффициент теплообмена,

$$f(x, t) = \alpha \theta(x, t) + \frac{F(x, t)}{c\rho}$$

– известная функция, $\theta(x, t)$ – температура окружающей среды.

Теплопроводность один из ведущих механизмов теплообмена, поэтому её детальная математическая формализация, а также всесторонний научный анализ представляется важным элементом дипломной работы и составляет предмет следующей главы.

4.6 Математическая модель теплопроводности

При решении задач, имеющих отношение к теплопроводности, возникает необходимость составить дифференциальное уравнение теплопроводности.

Дифференциальным уравнением принято называть математическую зависимость между физическими величинами, характеризующими изучаемое явление (эти физические величины являются функциями пространства и времени). Такое уравнение описывает протекание физического явления в любой точке тела в любой момент времени.

В дифференциальном уравнении теплопроводности выражена зависимость между температурой, временем и координатами элементарного объема.

4.7 Вывод уравнения теплопроводности

4.7.1 Поток тепла через элементарный объем

Вывод дифференциального уравнения можно произвести упрощенным методом.

Если имеется одномерное температурное поле (тепло распространяется в одном направлении, например, в направлении оси x), то термические коэффициенты можно считать независимыми от координат и времени.

В однородной и изотропной неограниченной пластине можно выделить элементарный параллелепипед, объем которого равен $dx dy dz$ (Рисунок 0.7- Поток тепла через элементарный объем). При этом количества тепла, вытекающего через левую грань $dy dz$ в параллелепипед в единицу времени, равно $q_x dy dz$, а количества тепла, вытекающее через противоположную грань в единицу времени, равно $q_{x+dx} dy dz$.

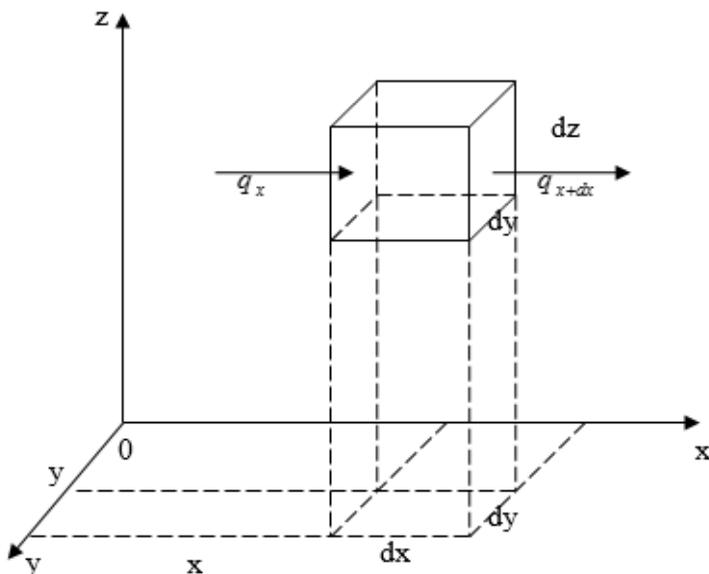


Рисунок 0.7- Поток тепла через элементарный объем

$$q_x dydz - q_{x+dx} dydz = c\gamma \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dz \quad (4.31)$$

Величина q_{x+dx} есть неизвестная функция x . Если ее разложить в ряд Тейлора и ограничиться двумя первыми членами ряда, то можно допустить, что

$$q_{x+dx} \approx q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} dx$$

В этом случае из равенства (4.31) следует

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} dx dy dz = c\gamma \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dz$$

С учетом уравнения теплопроводности уравнение имеет вид:

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} ,$$

$$c\gamma \frac{\partial T}{\partial \tau} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} ;$$

или

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} . \quad (4.32)$$

Уравнение (4.32) является дифференциальным уравнением теплопроводности для одномерного потока тепла. Если тепло распространяется по нормали к изометрическим поверхностям, то вектор q можно разложить на три составляющие по координатным осям. Аккумулированное элементарным объемом количество тепла будет равно сумме:

$$-\left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) dx dy dz .$$

В этом случае дифференциальное уравнение примет вид:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = a \nabla^2 T , \quad (4.33)$$

где $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

В некоторых случаях внутри тела есть источники тепла. Причем они могут быть положительными и отрицательными. Например, испарение влаги из материала при его нагревании можно считать отрицательным источником тепла.

Если удельная мощность (количество поглощаемого или выделяемого тепла в единицу времени и в единице объема тела)

этих источников равна ω (Вт/м³), то количество тепла, выделяемого в элементарном объеме в единицу времени, будет равно $\omega dx dy dz$; это необходимое количества тепла, чтобы выполнялось равенство (4.31).

После аналогичных преобразований дифференциальное уравнение теплопроводности с источниками тепла будет иметь вид

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \nabla^2 T + \frac{\omega}{c\gamma} . \quad (4.34)$$

4.7.2 Общий метод вывода уравнения теплопроводности

Дифференциальное уравнение (4.33) можно вывести с помощью формулы Остроградского-Гаусса.

Если в некоторой среде выделен объем V , ограниченный поверхностью S , а тепло распространяется в этой среде путем теплопроводности, тогда количество тепла, прошедшего через поверхность S в единицу времени, будет равно

$$\int_{(S)} \lambda \mathbf{grad} T \cdot dS = \int_{(S)} \lambda \cdot \mathbf{1}_n \cdot \mathbf{grad} T \cdot dS$$

(здесь интеграл берется по всей поверхности S). При отсутствии источников тепла этот тепловой поток вызовет изменение внутренней энергии среды в данном объеме в единицу времени на величину

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \int_{(V)} c\gamma T dv = \int_{(V)} c\gamma \frac{\partial T}{\partial \tau} dv$$

(интеграл берется по всему объему V).

В соответствии с законом сохранения энергии изменение внутренней энергии среды в объеме V будет равно потере тепла через поверхность S , ограничивающую данный объем, т. е.

$$\int_{(V)} c\gamma \frac{\partial T}{\partial \tau} dv = \int_{(S)} 1_n \lambda * \mathbf{grad} T * dS \quad (4.35)$$

При использовании преобразования Остроградского-Гаусса

$$\int_{(S)} 1_n \lambda * \mathbf{grad} T * dS = \int_{(V)} [\mathbf{div}(\lambda)] \mathbf{grad} T dv$$

равенство (4.35) примет следующий вид

$$\int_{(V)} c\gamma \frac{\partial T}{\partial \tau} dv = \int_{(V)} [\mathbf{div}(\lambda)] \mathbf{grad} T dv \quad (4.36)$$

а с учетом произвольности объема уравнение будет выглядеть так:

$$c\gamma \frac{\partial T}{\partial \tau} = \mathbf{div}(\lambda \mathbf{grad} T) \quad (4.37)$$

Дифференциальное уравнение теплопроводности можно вывести из (2.7), если коэффициент теплопроводности не зависит от температуры

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \nabla^2 T = a \mathbf{div}(\mathbf{grad} T) \quad (4.38)$$

4.8 Постановка краевой задачи

4.8.1 Начальные условия

Дифференциальное уравнение теплопроводности выявляет

связь между временными и пространственными изменениями температуры тела; оно математически описывает перемещение тепла внутри тела.

Для описания температурного поля в теле в любой момент времени (чтобы решить дифференциальное уравнение), необходимо иметь данные о распределении температуры внутри тела в начальный момент времени (начальное условие), о геометрической форме тела и закон взаимодействия между окружающей средой и поверхностью тела (граничное условие).

Краевыми условиями называется совокупность начального и граничного условий; начальное условие принято называть временным краевым условием, а граничное условие – пространственным краевым условием.

Начальное условие определяется заданием закона распределения температуры внутри тела в начальный момент времени, т. е.

$$T(x, y, z, 0) = f(x, y, z), \quad (4.39)$$

где $f(x, y, z)$ – известная функция.

Во многих задачах принимают равномерное распределение температуры в начальный момент времени; в этом случае

$$T(x, y, z, 0) = T_0 = \text{const} . \quad (4.40)$$

4.8.2 Граничные условия

Граничное условие может быть задано различными способами.

1. Граничное условие первого рода заключается в задании распределения температуры по поверхности тела в любой момент времени, т.е.

$$T_{\text{н}}(\tau) = f(\tau), \quad (4.41)$$

где $T_{\text{н}}(\tau)$ – температура на поверхности тела.

В частном случае $T_n(\tau) = T_c = \mathbf{const}$, т. е. температура на поверхности постоянна во время теплообмена. Этого можно достичь при искусственном поддержании постоянной температуры или при особых условиях теплообмена между окружающей средой и поверхностью тела.

2. Граничное условие второго рода состоит в задании плотности теплового потока для каждой точки поверхности тела как функции времени, т.е.

$$q_n(\tau) = f(\tau). \quad (4.42)$$

Простейший случай граничного условия второго рода состоит в постоянстве плотности теплового потока:

$$q_n(\tau) = q_c = \mathbf{const}. \quad (4.43)$$

Такой случай теплообмена имеет место при нагревании тел в высокотемпературных печах, где передача тепла в основном происходит при помощи излучения по закону Стефана – Больцмана, когда температура тела значительно меньше температуры излучающих поверхностей.

3. Граничное условие третьего рода характеризует закон конвективного теплообмена между поверхностью тела и окружающей средой при постоянном потоке тепла (стационарное температурное поле). В этом случае количества тепла, передаваемого в единицу времени с единицы площади поверхности тела в окружающую среду с температурой T_c в процессе охлаждения ($T_n > T_c$), прямо пропорционально разности температур между поверхностью тела и окружающей средой, т. е.

$$q_n = \alpha(T_n - T_c), \quad (4.44)$$

где α - коэффициент пропорциональности, называемый коэффициентом теплообмена (вт/м²*град). Для процесса нагревания тела можно написать аналогичное соотношение, поменяв местами T_n и T_c . Коэффициент теплообмена численно равен количеству тепла, отдаваемого (или получаемого) единицей площади поверхности тела в единицу времени при разности температур между поверхностью и окружающей средой в 10. Соотно-

шение (4.44) можно получить из закона теплопроводности Фурье, полагая, что при обтекании поверхности тела жидкостью или газом передача тепла от жидкости к телу вблизи его поверхности происходит по закону Фурье:

$$q_{\Pi} = -\lambda_{\text{ж}} \left(\frac{\partial T_{\text{ж}}}{\partial n} \right)_n \mathbf{1}_n = \frac{\lambda_{\text{ж}}(T_{\Pi} - T_c)}{\delta} = \alpha(T_{\Pi} - T_c) \mathbf{1}_{\Pi} \quad (4.45)$$

где $\lambda_{\text{ж}}$ – коэффициент теплопроводности жидкости, δ –

условная толщина пограничного слоя, $\alpha = \frac{\lambda_{\text{ж}}}{\delta}$.

4. Граничное условие четвертого рода соответствует теплообмену поверхности тела с окружающей средой (конвективный теплообмен тела с жидкостью) или теплообмену соприкасающихся твердых тел, когда температура соприкасающихся поверхностей одинакова. При обтекании твердого тела потоком жидкости (или газа) передача тепла от жидкости (газа) к поверхности тела в непосредственной близости к поверхности тела (ламинарный пограничный слой) происходит по закону теплопроводности (молекулярный перенос тепла), т. е. имеет место теплообмен, соответствующий граничному условию третьего рода

$$T_{\Pi}(\tau) = [T_c(\tau)]_{\Pi} \quad (4.46)$$

Кроме равенства температур, имеет место также равенство потоков тепла

$$-\lambda_c \left(\frac{\partial T_c}{\partial n} \right)_{\Pi} = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{\Pi} \quad (4.47)$$

Таким образом, при конвективном теплообмене твердого тела с жидкостью в случае стационарного температурного поля

$\left(\frac{\partial T}{\partial \tau} = 0\right)$ пользуются граничным условием третьего рода – соотношением (4.44), а в случае нестационарного температурного

поля $\left(\frac{\partial T}{\partial \tau} \neq 0\right)$ необходимо при точной формулировке задачи применять граничные условия четвертого рода [соотношение (4.46), (4.47)]. В случае нестационарного лучистого теплообмена необходимо применять граничные условия второго рода (соотношение (4.42)). При малых разнице температур, когда $[T_n(\tau) - T_c(\tau)] \rightarrow 0$, можно использовать граничное условие третьего рода. При этом величина α будет обозначать коэффициент лучистого теплообмена $[\alpha = \alpha(T) = \text{const}]$.

В совокупности рассмотренные уравнения, граничные и начальные условия однозначно определяют конкретную постановку задачи теплопроводности для простейшего диапазона условий.

Это позволит использовать результаты данного раздела как исходный материал для следующего раздела, который посвящён методам формального анализа соответствующих моделей.

4.9 Методы исследования моделей теплопроводности

4.9.1 О методах решения краевых задач

Существующая классификация методов решения краевых задач различает их по различным признакам. Например, по форме, в которой представляются результаты решений. Решение задачи может быть представлено в виде формулы, позволяющей по заданному значению аргумента получить значение искомой функции. В этом случае принято говорить, что решение получено аналитическим методом.

С помощью численных методов решение может быть представлено численными значениями функции в некоторых заданных численных значениях аргумента.

Если для нахождения аналитического решения на некотором этапе применяют численные методы, то в этом случае можно говорить о синтезе аналитических и численных методов.

Аналитические методы позволяют получить более наглядное решение, по которым легко проанализировать влияние всех факторов на результат.

Использование численных методов дает возможность решать сложные краевые задачи, недоступные для решения аналитическими методами. Однако это не принижает роли аналитических методов решения краевых задач теплопроводности, особенно в тех случаях, когда аналитическое решение может быть получено точнее и быстрее, чем численное.

Важным критерием для аналитических методов является возможность решения нелинейных краевых задач. Если метод разработан для решения нелинейных задач, то он применим и для решения линейных задач, обратное же часто невозможно.

Линейные задачи теории теплопроводности могут быть решены следующими методами:

I. Классические методы

1) метод разделения переменных (метод Фурье); 2) метод функций источников (функций Грина); 3) метод тепловых потенциалов;

II. Методы интегральных преобразований:

1) в бесконечных пределах; 2) в конечных пределах. При этом ядра интегральных преобразований выбираются различ-

ными (в зависимости от формы тела и граничных условий).

Нелинейные задачи теории теплопроводности могут быть решены следующими методами:

III. Вариационные методы:

1) Ритца; 2) Канторовича Л. В.; 3) Трэффцга; 4) Био; 5) Куранта; 6) Лейбензона.

IV. Методы линеаризации (сведение нелинейной краевой задачи к линейной):

1) методы подстановок (алгебраические, интегральные); 2) приемы линеаризации; 3) методы последовательных приближений; метод возмущений (метод малого параметра).

V. Проекционные методы:

1) коллокаций; 2) Бубнова-Галеркина; 3) моментов; 4) интегральные методы (интегрального теплового баланса, осреднения функциональных поправок).

VI. Методы сведения краевой задачи к уравнениям и задачам других типов:

1) приведение краевой задачи с нелинейными граничными условиями к эквивалентному нелинейному функциональному уравнению; 2) приведение краевой задачи с коэффициентами переноса, зависящими от температуры, к нелинейному интегральному уравнению; 3) приведение краевой задачи теплопроводности к краевой задаче для обыкновенного дифференциального уравнения.

Приведенная классификация методов является весьма условной, так как многие методы можно отнести не к единственной группе методов, а к нескольким. Существует также целый ряд методов, не описанных в данной классификации.

4.10 Метод разделения переменных

В классическом методе решения дифференциального уравнения теплопроводности необходимо найти совокупность частных решений T_n , удовлетворяющих уравнению и граничному условию, а затем по принципу наложения составить ряд этих решений:

$$T = C_1 T_1 + C_2 T_2 + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} C_n T_n \quad (4.48)$$

Коэффициенты C_n находятся из начального условия.

Это свойство наложения для бесконечного ряда нуждается в специальном обосновании, так как оно полностью справедливо только для конечной суммы. Иными словами, необходимо доказать равномерную сходимость ряда, полученного после дифференцирования ряда (4.48), а также законность почленного интегрирования ряда при определении коэффициентов C_n . Это обоснование содержится в монографиях по математической физике.

Частное решение T ищется в виде произведения двух функций, одна из которых $\theta(\tau)$ зависит только от времени τ , а другая $\vartheta(x, y, z)$ зависит только от координат,

$$T = C\theta(\tau)\vartheta(x, y, z), \quad (4.49)$$

где C – произвольная постоянная.

Если подставим решение (4.49) в уравнение (4.48), то получим

$$\theta'(\tau)\vartheta(x, y, z) = a\theta(\tau)\nabla^2\vartheta(x, y, z);$$

это равенство можно написать еще так:

$$\frac{\theta'(\tau)}{\theta(\tau)} = a \frac{\nabla^2\vartheta(x, y, z)}{\vartheta(x, y, z)}. \quad (4.50)$$

Равенство должно иметь место при любых значениях времени и координат. Это возможно только в том случае, если правая и левая части равенства равны некоторой постоянной величине D , т. е.

$$\frac{\theta'(\tau)}{\theta(\tau)} = D = \text{const} \quad (4.51)$$

$$\frac{a\nabla^2\vartheta(x, y, z)}{\vartheta(x, y, z)} = D = \text{const} \quad (4.52)$$

Если уравнение (3.4) проинтегрировать, то в результате уравнение примет вид

$$\theta(\tau) = e^{D\tau} \quad (4.53)$$

Постоянная интегрирования не обозначена, поскольку ее можно отнести к постоянной C .

Постоянная величина D выбирается из физических соображений. Для тепловых процессов, стремящихся к температурному равновесию, когда по истечению длительного промежутка времени ($\tau \rightarrow \infty$) должно установиться определенное распределение температуры, величина D не может быть положительной величиной, она будет только отрицательной. Если D есть величина положительная, то при длительном промежутке времени температура будет больше наперед заданной величины, т. е. стремиться к бесконечности, что противоречит сущности процесса.

Если температура тела есть периодическая функция времени, например, в случае распространения тепловых волн в теле, то величина D должна быть мнимой величиной, чтобы получить периодическую функцию времени (4.53).

В первом случае $D \leq 0$. Принимая D как произвольную постоянную по числовому значению, можно полагать, что

$$D = -ak^2 \quad (4.54)$$

где a – коэффициент температуропроводности (величина положительная), k – некоторая постоянная, которая определяется из граничных условий. Подставляя эти значения для D , получается:

$$\theta(\tau) = e^{-ak^2\tau} \quad (4.55)$$

$$\nabla^2\vartheta(x, y, z) + k^2\vartheta(x, y, z) = 0 \quad (4.56)$$

Дифференциальное уравнение (4.56) часто называют уравнением Покеля.

Применяя метод Фурье, уравнение теплопроводности можно свести к уравнению типа Покеля, решение которого определяется геометрической формой тела, начальным распределением температуры, а также условиями теплообмена тела с окружающей средой или окружающими телами.

Если при соответствующих заданных условиях известно решение уравнения (4.56), т. е. найдена функция $\vartheta(x, y, z)$, тогда частное решение уравнения теплопроводности можно представить так:

$$T = Ce^{-ak^2\tau}\vartheta(x, y, z) \quad (4.57)$$

Решение (4.57) удовлетворяет дифференциальному уравнению теплопроводности при любых значениях C и k , т. е. является частным решением. Следовательно, придавая постоянным C и k различные значения, можно получить бесчисленное множество частных решений.

По принципу наложения общее решение будет равно сумме частных решений согласно соотношению (4.48). Постоянные k определяются граничными условиями, а постоянные C – из начальных условий.

В простейших случаях, когда ϑ зависит только от одной координаты ξ (одномерные задачи, связанные с нахождением симметричного температурного поля в неограниченной пластине, цилиндре, шаре), решение уравнения (4.56) можно представить как сумму двух частных решений, $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$, т.е.

$$\vartheta(\xi) = \varphi(k\xi) + \psi(k\xi) \quad (4.58)$$

Это обусловлено тем, что общее решение всякого линейно-

го однородного дифференциального уравнения второго порядка

$$\vartheta'' + p(\xi)\vartheta' + q(\xi)\vartheta = 0, \quad (4.59)$$

можно представить в виде

$$\vartheta = C_1\vartheta_1 + C_2\vartheta_2, \quad (4.60)$$

где C_1 и C_2 - постоянные, а ϑ_1 и ϑ_2 являются линейно независимыми интегралами уравнения (3.12), т. е. такими интегралами, отношение которых не является постоянной величиной:

$$\frac{\vartheta_1}{\vartheta_2} \neq \text{Const}$$

Достаточно знать только одно линейное независимое решение, например ϑ_1 , тогда ϑ_2 находится по формуле:

$$\vartheta_2 = \vartheta_1 \int \vartheta_1^{-2} e^{-\int p d\xi} d\xi. \quad (4.61)$$

Вернемся теперь к анализу частного решения дифференциального уравнения теплопроводности. Согласно соотношению (3.11) частное решение (3.10) можно записать так:

$$T = C e^{-ak^2\tau} \varphi(k\xi) + D e^{-ak^2\tau} \psi(k\xi), \quad (4.62)$$

т. е. оно представляет собой сумму или линейную комбинацию двух собственных функций.

В общем случае величина k определяется из граничных условий, а постоянные C и D – из начального условия.

Частное решение непригодно для расчета температурного поля, так как из частного решения нельзя определить постоянные C и D . Например, в начальный момент времени ($\tau = 0$) температура может быть постоянной $T = T_0 = \text{Const}$, что не следует из частного решения (4.62).

Если положить $\tau = 0 (e^{-ak^2\tau} = 1)$, то по-

лучится, что постоянная T_0 должна быть равна переменной $C\varphi(k\xi) + D\psi(k\xi)$, чего не может быть. Поэтому для получения общего решения уравнения теплопроводности, удовлетворяющего и начальным условиям, берут сумму частных решений, в которых постоянные C и D имеют свои определенные значения. Температура в начальный момент времени может быть заданной функцией ξ . Тогда при помощи совокупности таких частных решений можно как угодно близко подойти к заданному распределению. Это осуществляется подбором подходящих значений C и D ; такой путь подбора постоянных C и D обычно называют удовлетворением решения начальному условию.

Таким образом, первое частное решение можно представить так:

$$T_1 = C_1 e^{-ak_1^2 \tau} \varphi(k_1 \xi) + D_1 e^{-ak_1^2 \tau} \psi(k_1 \xi),$$

второе частное решение

$$T_2 = C_2 e^{-ak_2^2 \tau} \varphi(k_2 \xi) + D_2 e^{-ak_2^2 \tau} \psi(k_2 \xi),$$

и т. д.

Общее решение будет иметь вид:

$$T = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \varphi(k_n \xi) e^{-ak_n^2 \tau} + \sum_{m=1}^{\infty} D_m \psi(k_m \xi) e^{-ak_m^2 \tau} \quad (4.63)$$

При этом необходимо, чтобы функция $T_0(\xi)$, описывающая начальное распределение температуры, могла быть разложена в ряд по собственным функциям:

$$T_0(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \varphi(k_n \xi) + \sum_{m=1}^{\infty} D_m \psi(k_m \xi)$$

Эту методику можно рассмотреть на конкретном примере. Дифференциальное уравнение теплопроводности для неогра

ниченной пластины имеет вид

$$\frac{\partial T(x, \tau)}{\partial \tau} = a \frac{\partial^2 T(x, \tau)}{\partial x^2} \quad (4.64)$$

Частное решение этого уравнения можно найти в виде произведения двух функций:

$$T = C\theta(\tau)\vartheta(x)$$

Тогда после подстановки его в дифференциальное уравнение:

$$\frac{\theta'(\tau)}{\theta(\tau)} = a \frac{\theta''(x)}{\theta(x)} = -ak^2 \quad (4.65)$$

Интегрирование уравнения

$$\frac{\theta'(\tau)}{\theta(\tau)} = -ak^2 = \text{const}$$

даст значение для функции $\theta(\tau)$, т. е. $\theta(\tau) = e^{-ak^2\tau}$.

Дифференциальное уравнение для функции $\vartheta(x)$ имеет вид

$$\vartheta''(x) = -k^2\vartheta(x) \quad (4.66)$$



Следовательно, функция $\vartheta(x)$ должна быть такова, чтобы ее вторая производная была равна самой функции, умноженной на некоторую величину $(-k^2)$. Легко показать, что такими функциями могут быть $\sin kx$ или $\cos kx$, а именно

$$\begin{aligned}\vartheta_1(x) = \sin kx, \quad \vartheta_1'(x) = k \cos kx, \quad \vartheta_1''(x) = -k^2 \sin kx = -k^2 \vartheta_1(x); \\ \vartheta_2(x) = \cos kx, \quad \vartheta_2'(x) = -k \sin kx, \quad \vartheta_2''(x) = -k^2 \cos kx = -k^2 \vartheta_2(x).\end{aligned}$$

Таким образом, $\sin kx$ и $\cos kx$ являются частными решениями уравнения (3.19), причем эти решения линейно независимы, так как

$$\frac{\vartheta_1(x)}{\vartheta_2(x)} = \frac{\sin kx}{\cos kx} \neq \text{Const}.$$

Общее решение уравнения (4.66) будет суммой частных решений:

$$\vartheta(x) = C\vartheta_1(x) + D\vartheta_2(x) = C \sin kx + D \cos kx, \quad (4.67)$$

где C и D - произвольные постоянные.

Второе частное решение $\vartheta_2(x) = \cos kx$ можно было получить также по формуле (4.61), зная первое решение $\vartheta_1(x) = \sin kx$, а именно



$$\vartheta_2(x) = \vartheta_1(x) \int \vartheta_1^{-2}(x) e^{-\int p dx} dx = \vartheta_1(x) \int \vartheta_1^{-2}(x) dx = \sin kx * \int \frac{dx}{\sin^2 kx} = -\frac{1}{k} \sin kx \operatorname{ctg} kx = -\frac{1}{k} \cos kx$$

(в этом случае $p(x)=0$). Общее решение будет иметь тот же вид:

$$\vartheta(x) = C\vartheta_1(x) + D'(\vartheta_2) = C \sin kx - \frac{D'}{k} \cos kx = C \sin kx + D \cos kx$$

где $D = -\frac{1}{k}D'$ - произвольная постоянная.

Частное решение дифференциального уравнения теплопроводности будет иметь вид

$$T(x, \tau) = C \sin kx e^{-ak^2\tau} + D \cos kx e^{-ak^2\tau}. \quad (4.68)$$

Постоянная k определяется из граничных, а постоянные C и D – из начальных условий; они принимают вполне определенные значения в зависимости от условий задачи.

Общее решение можно представить так:

$$T = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin k_n x \exp(-ak_n^2 \tau) + \sum_{m=1}^{\infty} D_m \cos k_m x \exp(-ak_m^2 \tau). \quad (4.69)$$



Рассмотренные здесь методы позволяют эффективно использовать модели самых различных объектов, в отношении кондуктивного теплообмена, эти объекты могут иметь как естественное, так и, искусственное происхождение. Сложность их структуры и организация (функционирование) также практически не ограничены. Однако все они могут быть адекватно описаны и изучены с выбранных в дипломной работе позиций

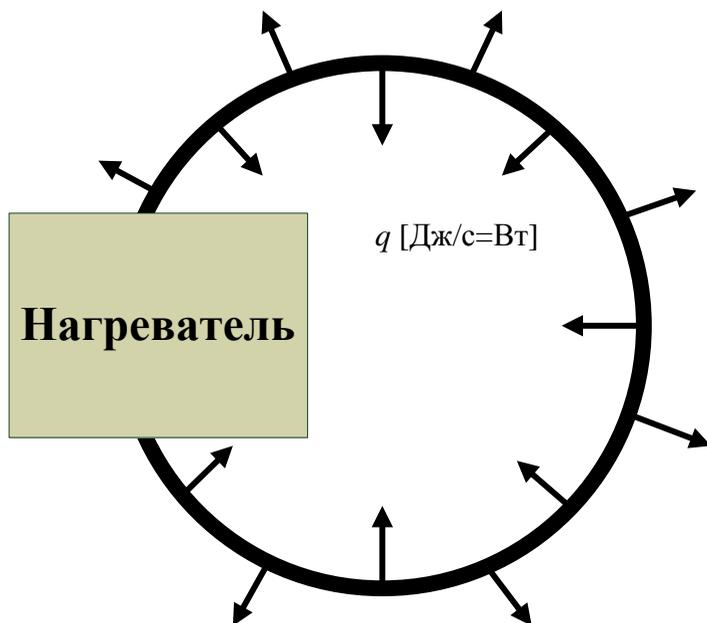
В следующем разделе рассмотрим две актуальные для техники и естествознания модели.

4.11 Практическое моделирование задач теплопроводности

В этом разделе последовательно рассмотрим несколько задач теплопроводности, постепенно усложняя постановки и таким образом приближаясь к реальным ситуациям, которые возникают при моделировании технических систем и технологических процессов.

4.11.1 Стационарное уравнение теплопроводности

В ряде приложений возникает ситуация, когда тепловой режим системы должен быть и обеспечивается неизменным (например, температура радиатора отопления в квартире поддерживается на постоянном уровне в течение некоторого промежутка времени). Схема системы и её эквивалент приведены на (Рисунок 0.8– Схема нагревателя).



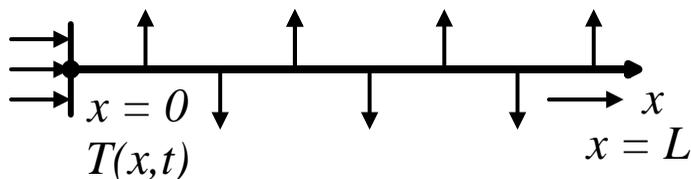


Рисунок 0.8– Схема нагревателя

Предположим для эквивалентной схемы справедливо уравнение теплопроводности (с физической точки зрения это означает, что направление циркуляции теплоносителя периодически меняется – два шага вперёд, один назад и т.д.)

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} - k^2 T(x, t) \quad (4.70)$$

При установившемся режиме:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = 0 \Rightarrow T(x, t) \neq T(t), T(x, t) = T(x) \quad (4.71)$$

Уравнение с частными производными становится обыкновенным дифференциальным:

$$a^2 \frac{d^2 T(x)}{dx^2} - k^2 T(x) = 0 \quad (4.72)$$

Для нахождения частного решения требуется знание двух констант (Рисунок 0.9– Общее решение стационарной задачи теплопроводности). Одна из них определяется граничным условием (тепловой поток на границе пропорционален градиенту температуры):

$$\left. \frac{dT(x)}{dx} \right|_{x=0} = -\frac{q}{\lambda^2},$$



(4.73)

а вторая из условия, что повышение температуры в нагревателе пропорционально тепловому потоку

$$T(0) - T(L) = \beta^2 q . \quad (4.74)$$

The screenshot shows the Maple V Release 4 interface. The command window contains the following text:

```
> dsolve(a^2*diff(T(x), x$2) - k^2*T(x) = 0, T(x));
```

The solution displayed is:

$$T(x) = _C1 e^{\left(\frac{kx}{a}\right)} + _C2 e^{\left(-\frac{kx}{a}\right)}$$

The status bar at the bottom indicates: Time: 0.0s, Bytes: 511K, Free: 2425291K.

Рисунок 0.9– Общее решение стационарной задачи теплопроводности (4.73)

Получить искомое частное решение (в общем виде) встроенными средствами Maple, не разбивая задачу на этапы и не используя прочие ухищрения не удаётся (Рисунок 0.10– Невозможность получить решение краевой задачи (4.72), (4.73), (4.74) стандартной процедурой Maple). Эти средства обеспечивают лишь автоматическое решение более простой, но малоинтересной с технической точки зрения краевой задачи (4.72), (4.73) и



$$T(0) = \beta^2 q . \quad (4.75)$$

The screenshot shows the Maple V Release 4 software interface. The title bar reads "Maple V Release 4 - [Demidov_M.V.mws]". The menu bar includes "File", "Edit", "View", "Insert", "Format", "Options", "Window", and "Help". The toolbar contains various icons for file operations, editing, and execution. The main window displays a command prompt with the following red text:

```
> dsolve ({a^2*diff (T (x) , x$2) -k^2*T (x)=0 ,D (T) (0) =  
-q/lambda^2 , T (0) -T (L)=beta^2*q} , T (x) ) ;  
>
```

The status bar at the bottom right indicates "Time: 0.1s", "Bytes: 1663K", and "Free: 2434819K".

Рисунок 0.10– Невозможность получить решение краевой задачи (4.72), (4.73), (4.74) стандартной процедурой Maple



The screenshot shows the Maple V Release 4 interface. The command window contains the following red text:

```
> dsolve({a^2*diff(T(x), x$2) - k^2*T(x) = 0, D(T)(0) =  
-q/lambda^2, T(0) = beta^2*q}, T(x));
```

The solution is displayed as a blue mathematical expression:

$$T(x) = -\frac{1}{2} \frac{q(-\beta^2 \lambda^2 k + a) e^{\left(\frac{kx}{a}\right)}}{k \lambda^2} + \frac{1}{2} \frac{q(\beta^2 \lambda^2 k + a) e^{\left(-\frac{kx}{a}\right)}}{k \lambda^2}$$

The status bar at the bottom right shows: Time: 0.1s, Bytes: 1663K, Free: 2453867K.

Рисунок 0.11– Решение краевой задачи (4.72), (4.73), (4.75)

Для нахождения частного решения задачи (4.72) – (4.74) средствами Maple сначала исключим из постановки неудобное граничное условие и рассмотрим результирующее однопараметрическое семейство решений (Рисунок 0.12). Параметр C_2 найдём, подставляя второе граничное условие в явную зависимость $T(x)$ с рис. 4.5. Результат вычислений показан на рис. 4.6.



The screenshot shows the Maple V Release 4 interface. The command entered is:

```
> TSol := x -> - (-k*lambda^2*_C2+q*a) /k/lambda^2*  
exp(k/a*x) + _C2*exp(-k/a*x) ;
```

The resulting output is:

$$TSol := x \rightarrow - \frac{(-k \lambda^2 _C2 + q a) e^{\left(\frac{kx}{a}\right)}}{k \lambda^2} + _C2 e^{\left(-\frac{kx}{a}\right)}$$

At the bottom of the window, the status bar shows: Time: 0.2s | Bytes: 1855K | Free: 2458691K

Рисунок 0.12– Однопараметрическое семейство решений задачи (4.72), (4.73)



The screenshot shows the Maple V Release 4 interface. The title bar reads "Maple V Release 4 - [Demidov_M.V..mws]". The menu bar includes "File", "Edit", "View", "Insert", "Format", "Options", "Window", and "Help". The toolbar contains various icons for file operations, editing, and navigation. The main workspace contains the following text:

```
> _C2 := solve (TSol (0) - TSol (L) = beta^2 * q, _C2) ;
```

$$_C2 := \frac{q \left(-a + e^{\left(\frac{Lk}{a} \right)} a - \beta^2 \lambda^2 k \right)}{k \lambda^2 \left(-2 + e^{\left(\frac{Lk}{a} \right)} + e^{\left(-\frac{Lk}{a} \right)} \right)}$$

The status bar at the bottom right indicates "Time: 0.2s", "Bytes: 1855K", and "Free: 2457559K".

Рисунок 0.13– Параметр решения рис. 4.5 C_2 , удовлетворяющий граничному условию (4.74)

Его подстановка в формулу рис. 4.5 даёт искомое частное решение краевой задачи (4.72) – (4.74) (см. рис. 4.7). Полученное решение в совокупности с набором разумных коэффициентов модели $a, k, L, \lambda, \beta, q$ используем далее для тестирования различных численных методов и их реализаций, приспособленных для решения краевых задач стационарной теплопроводности.

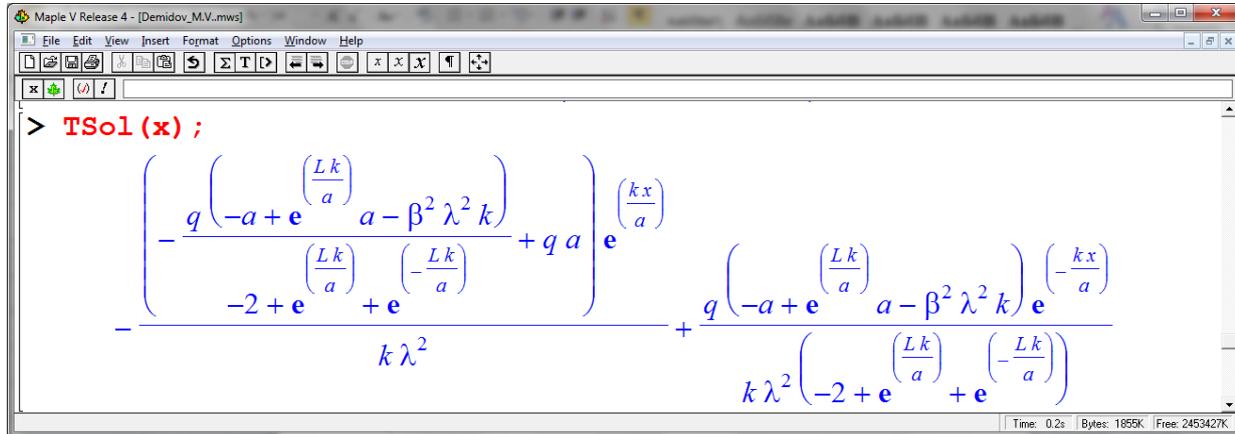


Рисунок 0.14– Частное решение краевой задачи (4.72) – (4.74)

При выбранных нами реалистичных значениях констант частное решение задачи отображено на (Рисунок 0.15).

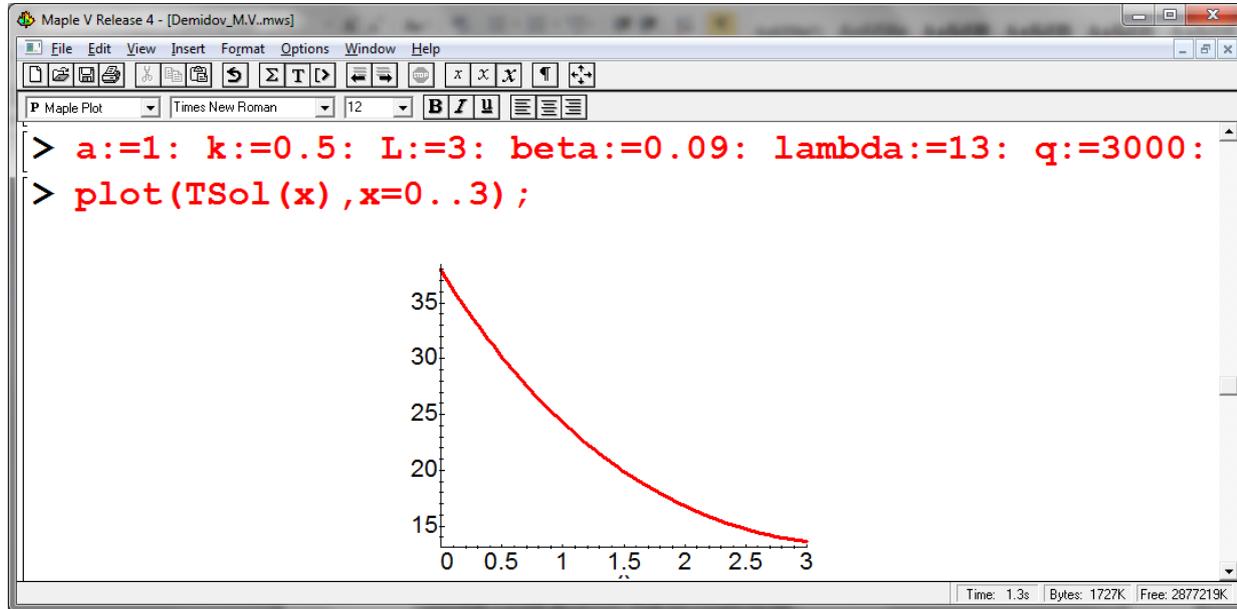


Рисунок 0.15– Решение краевой задачи (4.72) – (4.74)

В дальнейшем, чтобы постановку задачи сделать более удобной переформулируем второе граничное условие в терминах средней температуры контура:

$$\langle T \rangle = \int_0^L T(x) dx / \int_0^L dx = \frac{1}{L} \int_0^L T(x) dx . \quad (4.76)$$

Допустимость такой переформулировки задачи обеспечивается её линейностью. При выбранных коэффициентах модели $\langle T \rangle = 21,83$ (Рисунок 0.16).

Рисунок 0.16– Результат переформулировки дополнительных условий для уравнения (4.72)

Приведённое выше точное аналитическое решение задачи (4.72) – (4.74) будем дальше использовать как эталонное при изучении различных приближённых методов интегрирования этого дифференциального



уравнения. Для удобства сравнения получаемых результатов будем пользоваться таблицей решения $T(x)$, показанной на (



Рисунок 0.17)



The screenshot shows the Maple V Release 4 software interface. The window title is "Maple V Release 4 - [Demidov_M.V..mws]". The menu bar includes File, Edit, View, Insert, Format, Options, Window, and Help. The toolbar contains various icons for file operations, editing, and execution. The main workspace displays the following code and output:

```
> for x from 0 by 0.3 to 3 do evalf(TSol(x));od;
```

37.92913014
33.01119683
28.83740917
25.31368070
22.36057878
19.91153391
17.91133921
16.31490584
15.08624666
14.19766495
13.62913012

The status bar at the bottom indicates: Time: 1.5s, Bytes: 3903K, Free: 2860655K.



Рисунок 0.17 - Численные значения решения рис.4.10 в 11 узловых точках

4.11.2 Решение задачи с помощью рядов

Предположим, что решение нашей задачи представимо в виде ряда:

$$T(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i x^i \quad (4.77)$$

Тогда

$$\frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} = \sum_{i=0}^{\infty} i(i-1) \alpha_i x^{i-2} \quad (4.78)$$

Подставляя (4.77) и (4.78) в уравнение (4.72) получим рекуррентное соотношение:

$$\alpha_{i+2} = \frac{k^2}{(i+2)(i+1)} \alpha_i \quad (4.79)$$



Ряд (4.77) быстро сходится при $k^2 < 1$, а при $k^2 > 1$ начинает сходиться с i -го слагаемого. В результате можно записать решение как:

$$T(x) = T_{\text{чётн}}(x) + T_{\text{неч}}(x), \quad (4.80)$$

где

$$T_{\text{чётн}}(x) = \alpha_0 \left[1 + \frac{k^2}{2!} x^2 + \dots + \frac{k^{2n}}{(2n)!} x^{2n} \right], \quad (4.81)$$

$$T_{\text{неч}}(x) = \beta_0 \left[\frac{k}{1!} x + \frac{k^3}{3!} x^3 + \dots + \frac{k^{2n+1}}{(2n+1)!} x^{2n+1} \right], \quad (4.82)$$

а α_0 и β_0 – числовые коэффициенты, отвечающие частным постановкам задачи.

Нетрудно убедиться, что β_0 и α_0 – т.е. вполне соответствуют полученному ранее аналитическому решению (Рисунок 0.11).

Из граничных условий получаем $\beta_0 = \frac{-q}{\lambda^2 k}$, а $\alpha_0 = q \frac{\beta^2 - \frac{1}{k\lambda^2} \text{sh}(kL)}{1 - \text{ch}(kL)}$. Соответствующие численные зна-



чения α_0 и β_0 , а также сопоставление 2-х, 4-х и шестичленного решений в виде ряда с точным решением показаны на (



Рисунок

0.17).

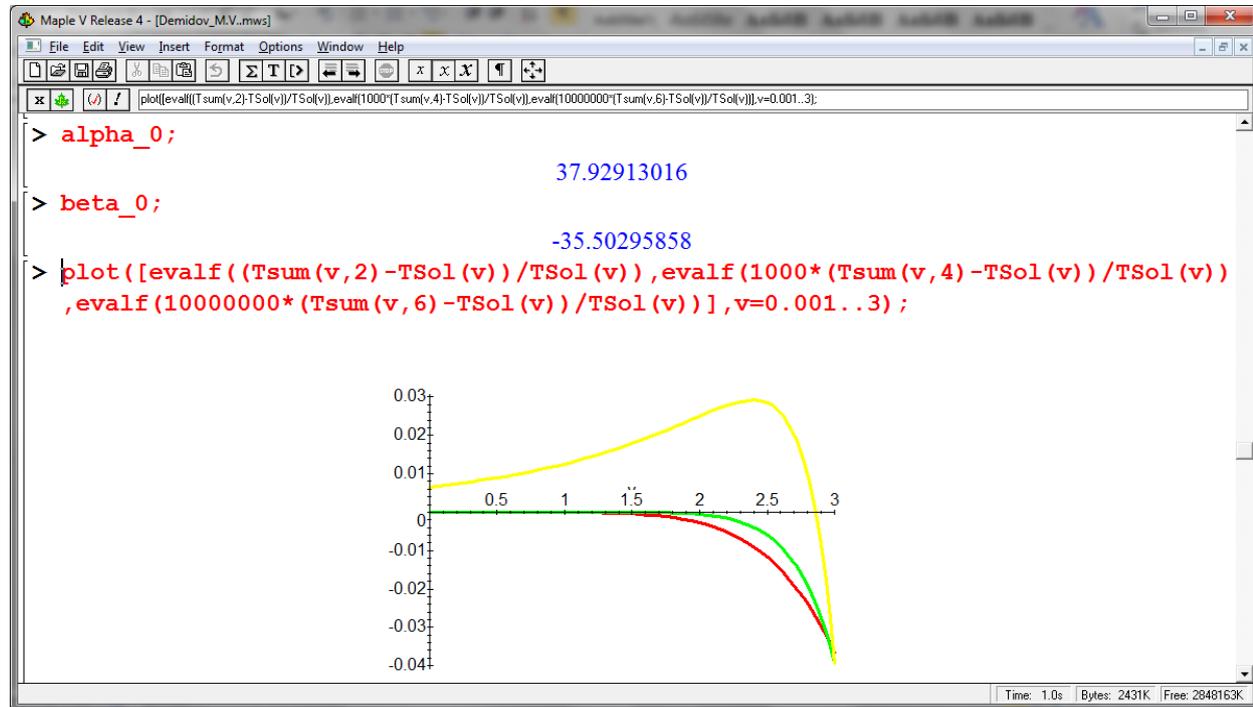


Рисунок 0.18– Сравнение решений в виде степенного ряда с аналитическим: красная кривая – относительная погрешность двучленного решения; зелёная – четырёхчленного решения, увеличенная в 10^3 раз; жёлтая –

шестичленного решения, увеличенная в 10^7 раз

Результат проведённого компьютерного эксперимента свидетельствует о простоте и одновременно высокой эффективности метода поиска решения в виде ряда при использовании арифметических и графических возможностей компьютера.

Метод Галёркина. Идея метода Галёркина состоит в поиске решения ДУ как линейной комбинации некоторых ортогональных функций, обеспечивающей минимальную невязку с точным решением. Под невязкой в этом методе подразумевается (если следовать нашим обозначениям) функционал

$$\int_0^L \left[(T)_{\text{прибл}}(x) - T(x) \right]^2 dx, \quad (4.83)$$

в котором $T(x)$ – соответственно приближённые и точные решения задачи.

В нашем случае достаточно в качестве системы базисных функций взять степенные, т.е. искать решение в виде степенного ряда:

$$T_{\text{прибл}}(x) = A + Bx + Cx^2 + Dx^3 + \dots. \quad (4.84)$$

Здесь мы сознательно используем отличные от формулы (4.77) обозначения, поскольку предполагаем решать соответствующую задачу средствами MatCAD. Впоследствии это не помешает нам сравнить результаты: достаточно лишь идентифицировать A как α_0 , B как β_0 и т.д.

В явном виде подлежащая минимизации невязка $\Phi(A, B, C, D)$ равна:



$$\Phi(A, B, C, D) = \int_0^L [(-Ak^2 + 2C) + (-Bk^2 + 6D)x - k^2Cx^2 - k^2Dx^3]^2 dx \rightarrow \min \quad (4.85)$$

В соответствии с граничными условиями имеем следующие ограничения:

$$\begin{aligned} \frac{dT(x)}{dx} \Big|_{x=0} &= -\frac{q}{\lambda^2} = B, \\ T(0) - T(L) &= \beta^2 q = -(BL + CL^2 + DL^3). \end{aligned} \quad (4.86)$$

Они позволяют априори исключить из рассмотрения B и ввести единственный множитель Лагранжа. В результате получается стандартная задача условной оптимизации, фрагменты алгоритма и результаты решения которой показаны на рис. (



Рисунок 0.17) и (Рисунок 0.18).

Рисунок 0.19– Решение оптимизационной задачи в методе Галёркина средствами MatCAD: целевая функция и её производные



Mathcad - [Demidov_M.V.]

Файл ПРАВКА Вид Вставка Формат Инструменты Символьные операции
Окно Справка

Normal Arial 10 B I U

Мой веб-узел Go = < > ≤ ≥ ≠ → ^ ∇ ⊕

Значения констант в модели:
 $a := 1$ $k := 0.5$ $L := 3$ $\beta := 0.09$ $\lambda := 13$ $q := 3000$ $B := \frac{q}{\lambda^2}$

Стартовые значения подгоночных параметров:
 $B = -17.751$ $A := 10$ $C := 10$ $\lambda\lambda := 0$ $D := -1$

Решение оптимизационной задачи встроенным алгоритмом:

Given

$$d\Phi_{dA}(A,B,C,D) = 0 \quad d\Phi_{dC}(A,B,C,D) + \lambda\lambda \cdot L = 0$$
$$d\Phi_{dD}(A,B,C,D) + \lambda\lambda \cdot L^2 = 0 \quad \left(C \cdot L + D \cdot L^2 + q \cdot \frac{\beta^2}{L} \right) - \frac{q}{\lambda^2} = 0$$
$$ACD\lambda\lambda := \text{Find}(A, C, D, \lambda\lambda)$$

$A := ACD\lambda\lambda_0$ $C := ACD\lambda\lambda_1$ $D := ACD\lambda\lambda_2$ $\lambda\lambda := ACD\lambda\lambda_3$

$xx := 0, 0.01.. 3$ $A = 38.024$ $B = -17.751$ $C = 4.204$ $D = -0.329$ $\lambda\lambda = -0.18$



Рисунок 0.20– Решение оптимизационной задачи в методе Галёркина средствами MatCAD: числовое и графическое отображение

О точности полученного таким методом результата позволяет судить показанное на рис. 4.14 его сравнение с точным решением. Хорошо видно, что даже 4 первые слагаемые отражают это точное решение с погрешностью менее 1 %.



Mathcad - [Demidov_M.V.]

Файл Правка Вид Вставка Формат Инструменты Символьные операции Окно Справка

Normal Arial 10 **B** *I* U $\frac{1}{x}$ $\frac{d}{dx}$ \int \sum \prod \lim \lim_{\rightarrow} \lim_{\leftarrow} ∇ f

Мой веб-узел Go = < > ≤ ≥ ≠ → ^ √ ⊕

Точное решение задачи:

$$\text{Texact}(x) := \frac{\left[q \left(a - \exp\left(L \cdot \frac{k}{a} \right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2 \right) + q \cdot a \right] \cdot \exp\left(x \cdot \frac{k}{a} \right)}{k \cdot \lambda^2} - q \left(a - \exp\left(L \cdot \frac{k}{a} \right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \frac{\exp\left(-x \cdot \frac{k}{a} \right)}{\left(k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \left(-2 + \exp\left(L \cdot \frac{k}{a} \right) + \exp\left(-L \cdot \frac{k}{a} \right) \right)}$$

Сравнение решения методом Гапёркина с точным:

Относительное отличие приближённого решения от точного:

$$\frac{(A+B \cdot xx+C \cdot xx^2+D \cdot xx^3 - \text{Texact}(xx))}{\text{Texact}(xx)}$$



Рисунок 0.21– Погрешность решения методом Галёркина

Аналогичный результат получается также **методом коллокации** состоящем в минимизации невязки не на всей области решения $0 \leq x \leq L$, а лишь в фиксированных её N точках. При этом вместо функционала (4.83) рассматривается дискретный:

$$\sum_{i=0}^N \left| \left[T \right]_{\text{прибл}} \left(\frac{L}{N} i \right) - T \left(\frac{L}{N} i \right) \right| . \quad (4.87)$$

Результат соответствующего компьютерного эксперимента показан на (Рисунок 0.21 – 4.25). В силу ограничений пакета MathCAD здесь используется приближенное численное дифференцирование, что делает модель еще более «дискретной» по сравнению с предыдущей. Однако согласие с аналитическим решением также оказывается хорошим, если число узловых точек при вычислении невязки N выбрать 10 и более.



Mathcad - [Demidov_M.V.2.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 B I U x^2 x_2

$\frac{d}{dx}$ $\frac{d^n}{dx^n}$ ∞ \int_a^b $\sum_{n=1}^{\infty}$ $\prod_{n=1}^{\infty}$ \int \sum_n \prod_n $\lim_{x \rightarrow a}$ $\lim_{x \rightarrow a^+}$ $\lim_{x \rightarrow a^-}$ ∇, f

Целевая функция и её производные по параметрам подгонки:

$N := 10$ $k := 0.5$ $L := 3$

$$\Phi(A, B, C, D) := \sum_{i=0}^N \left[(-A \cdot k^2 + 2 \cdot C) + (-B \cdot k^2 + 6 \cdot D) \cdot \left(L \cdot \frac{i}{N} \right) - k^2 \cdot C \cdot \left(L \cdot \frac{i}{N} \right)^2 - k^2 \cdot D \cdot \left(L \cdot \frac{i}{N} \right)^3 \right]^2$$

$$d\Phi_{dA}(A, B, C, D) := \frac{\Phi(1.005A, B, C, D) - \Phi(0.995A, B, C, D)}{0.01 \cdot A}$$

$$d\Phi_{dB}(A, B, C, D) := \frac{\Phi(A, 1.005B, C, D) - \Phi(A, 0.995B, C, D)}{0.01 \cdot B}$$

$$d\Phi_{dC}(A, B, C, D) := \frac{\Phi(A, B, 1.005C, D) - \Phi(A, B, 0.995C, D)}{0.01 \cdot C}$$

$$d\Phi_{dD}(A, B, C, D) := \frac{\Phi(A, B, C, 1.005D) - \Phi(A, B, C, 0.995D)}{0.01 \cdot D}$$

Значения констант в модели:

$a := 1$ $k := 0.5$ $L := 3$ $\beta := 0.09$ $\lambda := 13$ $q := 3000$ $B := \frac{-q}{\lambda^2}$

Стартовые значения подгоночных параметров:

$B := -17.751$ $A := 10$ $C := 10$ $\lambda\lambda := 0$ $D := -1$

Решение оптимизационной задачи встроенным алгоритмом:

Given

$$d\Phi_{dA}(A, B, C, D) = 0 \quad d\Phi_{dC}(A, B, C, D) + \lambda\lambda \cdot L = 0 \quad d\Phi_{dD}(A, B, C, D) + \lambda\lambda \cdot L^2 = 0$$

$$ACD\lambda\lambda := \text{Find}(A, C, D, \lambda\lambda)$$

$A := ACD\lambda\lambda_0$ $C := ACD\lambda\lambda_1$ $D := ACD\lambda\lambda_2$ $\lambda\lambda := ACD\lambda\lambda_3$

$xx := 0, 0.01 \dots 3$ $A = 37.559$ $B = -17.751$ $C = 4.216$ $D = -0.333$ $\lambda\lambda = -0.923$

$$\left(C \cdot L + D \cdot L^2 + q \cdot \frac{\beta^2}{xx} \right) - \frac{q}{xx} = 0$$

$xx := 0, 0.03 \dots 3^2$

$A + B \cdot xx + C \cdot xx^2 + D \cdot xx^3$

37.559
37.03



Рисунок 0.22-Рисунок 4.15 – Решение оптимизационной задачи методом коллокации средствами MatCAD: целевая функция, её производные, решение при $N = 10$

Как показывает сравнение данных (рис. 4.23 - 4.25) даже при трех узловых точках ($N = 2$) относительная погрешность приближенного решения не превышает 16 %. При $N = 10$ и 30, она снижается до 3.5 % и 1.6 % соответственно.



Mathcad - [Demidov_M.V.2.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 B I U

$\frac{d}{dx}$ $\frac{d^n}{dx^n}$ ∞ \int_a^b $\sum_{n=1}^{\infty}$ $\prod_{n=1}^{\infty}$ \int \sum_n \prod_n $\lim_{x \rightarrow a}$ $\lim_{x \rightarrow \pm 0}$ $\lim_{x \rightarrow \pm \infty}$ ∇f

Точное решение

$$T_{\text{exact}}(x) = \frac{q \cdot \left[\frac{a - \exp\left(L \cdot \frac{k}{a}\right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2}{-2 + \exp\left(L \cdot \frac{k}{a}\right) + \exp\left(-L \cdot \frac{k}{a}\right)} + q \cdot a \right] \cdot \exp\left(x \cdot \frac{k}{a}\right)}{k \cdot \lambda^2} - q \cdot \left(a - \exp\left(L \cdot \frac{k}{a}\right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \frac{\exp\left(-x \cdot \frac{k}{a}\right)}{\left(k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \left(-2 + \exp\left(L \cdot \frac{k}{a}\right) + \exp\left(-L \cdot \frac{k}{a}\right) \right)}$$

N = 2

Сравнение решения методом Галёркина с

$A+B \cdot xx+C \cdot xx^2+D \cdot xx^3$
 $T_{\text{exact}}(xx)$

Относительное отличие приближённого решения от точного:

$\frac{(A+B \cdot xx+C \cdot xx^2+D \cdot xx^3 - T_{\text{exact}}(xx))}{T_{\text{exact}}(xx)}$



Рисунок 0.23– Погрешность решения методом коллокации при $N = 2$



Mathcad - [Demidov_M.V.2.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 B I U

$\frac{d}{dx}$ $\frac{d^n}{dx^n}$ ∞ \int_a^b $\sum_{n=1}^N$ $\prod_{n=1}^N$ \int \sum_n \prod_n $\lim_{x \rightarrow a}$ $\lim_{x \rightarrow a^+}$ $\lim_{x \rightarrow a^-}$ $\nabla_x f$

Точное решение

$$T_{\text{exact}}(x) := \frac{-q \left[\frac{a - \exp\left(L \cdot \frac{k}{a}\right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2}{-2 + \exp\left(L \cdot \frac{k}{a}\right) + \exp\left(-L \cdot \frac{k}{a}\right)} + q \cdot a \right] \cdot \exp\left(x \cdot \frac{k}{a}\right)}{k \cdot \lambda^2} - q \cdot \left(a - \exp\left(L \cdot \frac{k}{a}\right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \frac{\exp\left(-x \cdot \frac{k}{a}\right)}{\left(k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \left(-2 + \exp\left(L \cdot \frac{k}{a}\right) + \exp\left(-L \cdot \frac{k}{a}\right) \right)}$$

Сравнение решения методом Галёркина с

$A+B \cdot xx+C \cdot xx^2+D \cdot xx^3$
 $T_{\text{exact}}(xx)$

Относительное отличие приближенного решения от точного:

$$\frac{(A+B \cdot xx+C \cdot xx^2+D \cdot xx^3 - T_{\text{exact}}(xx))}{T_{\text{exact}}(xx)}$$



Рисунок 0.24– Погрешность решения методом коллокации при $N = 10$



Mathcad - [Demidov_M.V.2.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 B I U

$\frac{d}{dx}$ $\frac{d^2}{dx^2}$ ∞ \int_a^b $\sum_{i=1}^n$ $\prod_{i=1}^n$ \int \sum \prod $\lim_{x \rightarrow a}$ $\lim_{x \rightarrow a^+}$ $\lim_{x \rightarrow a^-}$ $\nabla_x f$

Точное решение N = 30

$$T_{\text{exact}}(x) := \frac{\left[q \frac{\left(a - \exp\left(L \cdot \frac{k}{a} \right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2 \right)}{\left(-2 + \exp\left(L \cdot \frac{k}{a} \right) + \exp\left(-L \cdot \frac{k}{a} \right) \right)} + q \cdot a \right] \cdot \exp\left(x \cdot \frac{k}{a} \right)}{k \cdot \lambda^2} - q \cdot \left(a - \exp\left(L \cdot \frac{k}{a} \right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \frac{\exp\left(-x \cdot \frac{k}{a} \right)}{\left(k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \left(-2 + \exp\left(L \cdot \frac{k}{a} \right) + \exp\left(-L \cdot \frac{k}{a} \right) \right)}$$

Сравнение решения методом Галёркина с

$A+B \cdot xx+C \cdot xx^2+D \cdot xx^3$
 $T_{\text{exact}}(xx)$

Относительное отличие приближённого решения от точного:

$$\frac{(A+B \cdot xx+C \cdot xx^2+D \cdot xx^3 - T_{\text{exact}}(xx))}{T_{\text{exact}}(xx)}$$

Рисунок 0.25– Погрешность решения методом коллокации при $N = 30$

Важно подчеркнуть, что решения в виде рядов, полученные здесь классическим способом, а также методами Галеркина и коллокации очень близки между собой, несмотря на различия в технике отыскания коэффициентов разложения.

Метод прогонки принципиально отличается от описанных выше методов разложения в ряд, являясь существенно численным. Он нацелен на отыскание числовых характеристик решения в некоторых выбранных точках области его определения. Совокупность этих точек образует *сетку*, которая может быть однородной или неоднородной и при этом более или менее плотно покрывающей всю область определения решения.

При проецировании области определения решения на сетку (дискретизации) соответственно приходится отказаться от понятия производной, заменяя его т.н. *конечной разностью*. Соответственно исходной дифференциальное уравнение (4.72) проецируется на конечно-разностный аналог

$$a^2 \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} - k^2 T_i = 0, \quad i = 0, \dots, N, \quad (4.88)$$

где Δx – шаг дискретизации по пространству, равный в нашем случае $\frac{L}{N}$. В матричном виде система (4.16) выглядит следующим образом:

$$\begin{pmatrix}
 -\frac{1}{\Delta x} & \frac{1}{\Delta x} & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{a^2}{\Delta x^2} & -\frac{2a^2}{\Delta x^2} - k^2 & \frac{a^2}{\Delta x^2} & 0 & 0 \\
 0 & \frac{a^2}{\Delta x^2} & -\frac{2a^2}{\Delta x^2} - k^2 & \frac{a^2}{\Delta x^2} & 0 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1
 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ \dots \\ T_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -q/\lambda^2 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 13.629 \end{pmatrix}$$

(4.89)

Отличие первого и последнего уравнений (4.89) от прочих в том, что они отражают граничные условия (второго и первого рода соответственно), а не собственно механизм теплопроводности. Первое из уравнений (4.89) отражает закон Фурье, последнее – знание температуры на правой границе.

Для нахождения узловых значений T_i воспользуемся следующим алгоритмом *прогонки* (является высокоэффективной модификацией метода Гаусса для трёхдиагональных матриц). Вследствие разреженности и ленточной структуры трёхдиагональная матрица размером N может быть диагонализирована и/или обращена при помощи $\sim N$ арифметических действий, в то время как случай общего положения требует $\sim N^3$ действий.

Идея метода состоит в догадке, что искомые переменные связаны рекуррентно, причем линейно. Соответственно алгоритм состоит из двух этапов: на первом (т.н. *прямой ход* прогонки) отыскиваются коэффициенты рекуррентных линейных связей, а на втором (*обратном ходе*) – собственно вектор решения задачи.

Существенным требованием к матрице в (4.89), призванным обеспечить устойчивость вычислений выступает диагональное доминирование, т.е. в каждой строке абсолютная величина диагональных элементов должна превосходить сумму абсолютных величин элементов недиагональных.

Здесь мы сначала вычислим вспомогательные коэффициенты:

$$\alpha_1 = 1 ,$$



$$\beta_1 = \frac{\Delta x q}{\lambda^2},$$
$$\alpha_{i+1} = -\frac{a^2}{\Delta x^2} \left[-\frac{2a^2}{\Delta x^2} - k^2 + \frac{a^2}{\Delta x^2} \alpha_i \right], \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (4.90)$$
$$\beta_{i+1} = \frac{\left[-\frac{a^2}{\Delta x^2} \beta_i - \frac{q}{\lambda^2} * \delta_{1,i} \right]}{\square} \left[-\frac{2a^2}{\Delta x^2} - k^2 + \frac{a^2}{\Delta x^2} \alpha_i \right], \quad i = 1, \dots, N-1,$$

где $\delta_{1,i} = 1$ при $i = 1$ и $\delta_{1,i} = 0$ при $i \neq 1$ – символ Кронекера.

Обратный ход прогонки осуществим согласно алгоритму:

$$T_N = 13.629$$
$$T_i = \alpha_{i+1} T_{i+1} \beta_{i+1}, \quad i = N-1, \dots, 0 \quad (4.91)$$

Реализация алгоритма (4.25) - (4.26) средствами Excel показана на рис. 4.26-4.27. Для удобства на листе исходных данных введены внутренние переменные (**Рисунок 0.22**).



Microsoft Excel - Демидов М. Прогонка.xls

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Данные Окно Справка

Arial Cyr 10 Ж К Ч

Параметры модели:

	A	B
a		
a2_dx2		
dx		
k		
kk		
L		
Lamda		
N		
q		
TL		
	коэффициент теплопроводности a =	1
6	Коэффициент теплоотдачи k =	0,5
7	Пространственный размер задачи L =	3
8	Тепловой поток на левой границе q =	3000
9	Параметр теплопроводности Lamda =	13
10	Температура на правой границе TL =	13,629
11	Число счетных ячеек N =	10
12	Размер счетной ячейки dx =	0,3
13	Скорость передачи энергии теплопроводностью $(a/dx)^2 =$	11,11111
14	Скорость передачи энергии теплоотдачей $k^2 =$	0,25

Исходные данные / Прогонка / Лист3 /



Рисунок 0.26– Программная реализация метода прогонки при $N = 10$ в Excel: форма исходных данных

Приведенные на (



Рисунок 0.27) результаты свидетельствуют, что при выбранной мелкости разбиения расчетной области погрешность составляет $\sim 30\%$. Данное обстоятельство объясняется накоплением ошибки при обратном ходе вследствие слабого доминирования диагонали в матрице (4.89) при выбранных параметрах задачи.



Microsoft Excel - Демидов М. Прогонка.xls

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Данные Окно Справка

Введите вопрос

133%

Arial Cyr 10

Имя	A	B	C	D	E	F	G	H	I
7		Прямой	ход	прогонки		Обратный	ход	Эталон	Погрешность
8									
9	i	Коэффициенты alpha	Коэффициенты beta	Символ Кронекера	x	T	T точно	%	
10	0					0	49,295	37,559	31,2468722
11	1	1	5,325443787	1		0,3	43,9696	32,6041	34,8588149
12	2	0,97799511	6,770735377	0		0,6	38,0358	28,3542	34,1450804
13	3	0,957391401	6,482243829	0		0,9	32,9579	24,7553	33,1345101
14	4	0,938871399	6,08599333	0		1,2	28,6214	21,7534	31,5721956
15	5	0,922825402	5,616309243	0		1,5	24,929	19,2946	29,2019167
16	6	0,909359916	5,107246502	0		1,8	21,7975	17,325	25,8154504
17	7	0,898359528	4,588143556	0		2,1	19,1564	15,7905	21,3158219
18	8	0,889568541	4,08146817	0		2,4	16,9464	14,6374	15,7747541
19	9	0,88266593	3,602572899	0		2,7	15,1176	13,8115	9,45671463
20	10	0,877320679	3,160611702	0		3	13,629	13,259	2,79055736

Интегрирование КЗ ОДУ прогонкой

— Решение прогонкой
— Точное решение

Погрешность метода прогонки

— Относительная погрешность, %

Исходные данные Прогонка Лист3

Рисунок 0.27– Результаты и погрешность численного интегрирования задачи (4.72) – (4.74) прогонкой при $N = 10$ в Excel

Другим регулярным подходом к решению краевой задачи (4.72)-(4.74) является *метод конечных элементов* (МКЭ). В его основе лежит идея минимизировать функционал вариационной задачи на совокупности функций, каждая из которых определена на своей подобласти.

Область, где ищется решение, разбивается на конечное число подобластей – т.н. *элементов*. В каждом элементе выбирается вид аппроксимирующей функции, чаще всего линейный. За пределами элемента аппроксимирующая функция обнуляется. Значения функций на границах элементов полагаются искомым решением задачи. Коэффициенты аппроксимирующих функций определяются, исходя из совпадения значений соседних функций на границах элементов. Затем через значения функций в узлах элементов выражаются коэффициенты аппроксимирующих функций. Получается *система линейных алгебраических уравнений* (СЛАУ), числом уравнений отвечающая числу неизвестных значений в узлах. Очевидно, число узлов пропорционально числу элементов. Поскольку каждый из элементов связан лишь с несколькими соседними, СЛАУ получается разреженной, что облегчает её решение.

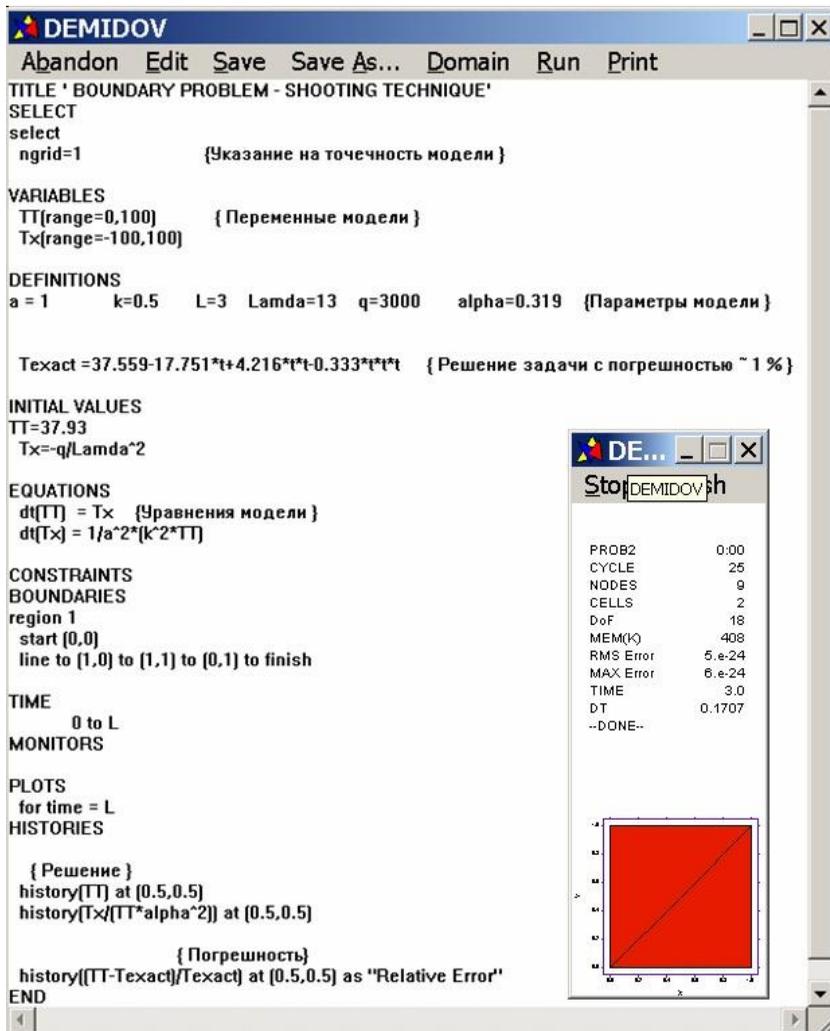
Реализовать метод конечных элементов сложнее, чем конечно-разностный, однако, он обладает рядом важных преимуществ: расчетная область может иметь произвольную форму, а грубость сетки допускает непосредственную увязку с необходимым локальным разрешением.

Изначально распространению МКЭ препятствовала невозможность автоматизировать разбиение расчетной области на элементы с почти правильной формой и максимально близкой (для соседних) мерой. Впоследствии решение этой проблемы найдено *триангуляцией Делоне*, следствием чего стали многочисленные конечноэлементные САПР – FlexPDE, ANSYS, NASTRAN и др.

Получаем решение нашей задачи (4.72)-(4.74) средствами конечноэлементного пакета FlexPDE. На (Рисунок 0.28) приведен код программы на внутреннем языке пакета, а на (рис. 4.29) – результаты вычислений. Здесь следует отметить, что составление подобных рис. 4.21 вычислительных инструкций не сильно усложняется для пространственно многомерных постановок и реали-

стичной геометрии модели.

В целях продемонстрировать возможности этого пакета воспользуемся методом пристрелки. При этом задачу будем считать точечной, а встроенную переменную t будем считать координатой. По известной теореме уравнение второго порядка (4.72) сводится к системе двух уравнений первого порядка. Нахождение частного решения требует знания двух дополнительных условий. В нашем случае заданы краевые. Однако мы переформулируем задачу в постановку Коши – с двумя начальными условиями слева. Одно из них известно – это левое краевое условие исходной задачи. Второе недостающее условие подберем *методом пристрелки*, т.е. подставляя различные варианты, добьемся выполнения известного краевого условия справа.



DEMIDOV

Abandon Edit Save Save As... Domain Run Print

TITLE ' BOUNDARY PROBLEM - SHOOTING TECHNIQUE'

SELECT

ngrid=1 {Указание на точечность модели }

VARIABLES

TT(range=0,100) { Переменные модели }

Tx(range=-100,100)

DEFINITIONS

a = 1 k=0.5 L=3 Lamda=13 q=3000 alpha=0.319 {Параметры модели }

Texact =37.559-17.751*t+4.216*t*t-0.333*t*t*t { Решение задачи с погрешностью ~ 1 % }

INITIAL VALUES

TT=37.93

Tx=-q/Lamda*2

EQUATIONS

dt(TT) = Tx {Уравнения модели }

dt(Tx) = 1/a*2*(k*2*TT)

CONSTRAINTS

BOUNDARIES

region 1

start (0,0)

line to (1,0) to (1,1) to (0,1) to finish

TIME

0 to L

MONITORS

PLOTS

for time = L

HISTORIES

{ Решение }

history(TT) at (0.5,0.5)

history(Tx/(TT*alpha^2)) at (0.5,0.5)

{ Погрешность }

history((TT-Texact)/Texact) at (0.5,0.5) as "Relative Error"

END

DE...

Stop DEMIDOV.h

PROB2	0:00
CYCLE	25
NODES	9
CELLS	2
DoF	18
MEM(K)	408
RMS Error	5. e-24
MAX Error	6. e-24
TIME	3.0
DT	0.1707
--DONE--	

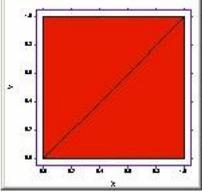


Рисунок 0.28– Код программы и вид конечных элементов для интегрирования краевой задачи (4.72)–(4.74) методом пристрелки в пакете FlexPDE

Результаты соответствующих расчетов и их погрешность по сравнению с решением в виде четырехчленного ряда показаны на (Рисунок 0.29) Эти данные весьма положительно характеризуют как метод пристрелки, так и инструментальную среду FlexPDE.

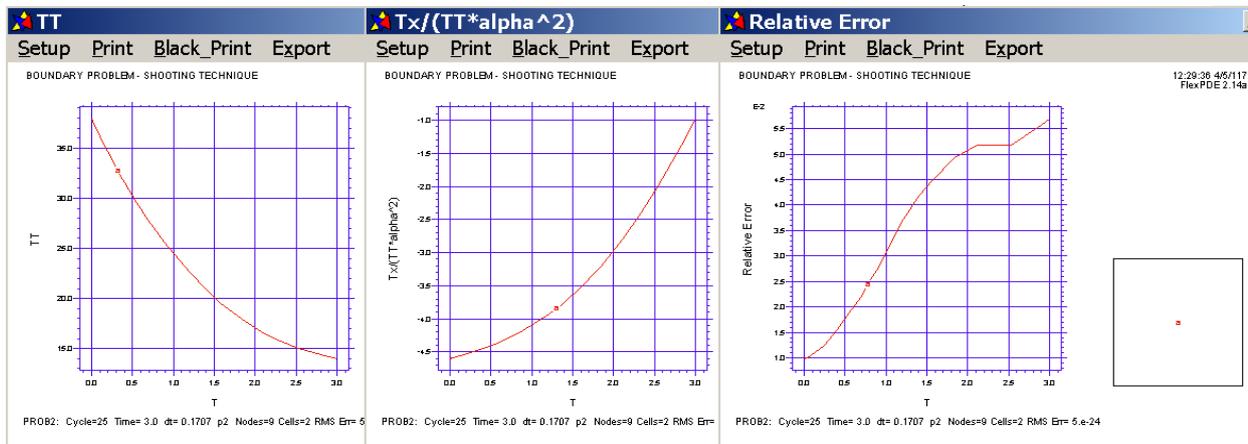


Рисунок 0.29– Результат и погрешность интегрирования краевой задачи (4.72)-(4.74) методом пристрелки в пакете FlexPDE

Практически интересной альтернативой описанным выше регулярным подходам при решении задачи (4.72)-(4.74) является *метод статистического имитационного моделирования*, известный как *метод Монте-Карло*. В основе метода лежит теория случайных процессов и статистическое осреднение множества однотипных испытаний.

Применительно к краевым задачам стационарной теплопроводности с граничными условиями первого рода модификация метода называется *алгоритмом случайных блужданий* и состоит в следующем. Расчетная



область разбивается на одинаковые расчетные ячейки правильной формы – отрезки, квадраты, кубы и т.д. Затем последовательно из каждой узловой точки разыгрывается N траекторий случайного блуждания: из узловой точки осуществляется переход в одну из соседних, причем с равной (при $k = 0$) вероятностью. Блуждание повторяется до тех пор, пока траектория не достигает одной из граничных точек. По достижении границы каждая такая траектория приносит соответствующее граничное значение в стартовый узел.

Результат N блужданий *осредняется* и принимается за *наиболее вероятное решение задачи* в соответствующем узле. Метод очевидным образом обобщается на неизотропную среду, теплоотдачу, а также на более сложные граничные условия.

Решение задачи (4.72)-(4.74) методом случайных блужданий показано на (рис. 4.30-4.31). В проведенном расчете краевые условия использованы 1-го рода (по результатам предыдущего анализа модели), а вероятность блуждания в сторону более горячей стенки выбрана меньшей, чем в противоположную, на величину отвечающую соотношению коэффициентов теплоотдачи и теплопроводности ячейки (см. алгоритм 4.23).



```
Maple V Release 4 - [Demidov_M.V.2.mws]
File Edit View Insert Format Options Window Help
P Maple Plot Times New Roman 12 B I U
> restart;
> with(stats): N:=10: N_traj:=100: k:=0.5: a:=1: L:=3: dx:=L/N:
> T_left:=37.93: T_right:=13.63: N_rand:=32000:
> for i from 1 by 1 to N-1 do with(stats): T[i]:=0: for j from 1 by 1 to N_traj
do m:=i; for n from 1 by 1 while (m > 0) and (m < N) do with(stats): die1 :=
rand(1..N_rand): rnd:=1.0/N_rand*die1(): if (rnd < 1/2-(k^2/(a^2/dx^2))*3)
then m:=m-1 else m:=m+1 fi: od: if (m = N) then T[i]:=T[i]+T_right fi: if (m
= 0) then T[i]:=T[i]+T_left fi: od: T[i]:=T[i]/N_traj; od:
> T[0]:=T_left: T[N]:=T_right:
> for i from 0 by 1 to N do evalf(T[i]) od;
37.93
32.34100000
26.99500000
23.35000000
21.89200000
17.27500000
17.27500000
16.54600000
14.35900000
13.63000000
13.63
Time: 46.2s Bytes: 16892K Free: 2097151K
```



Рисунок 0.30 – Алгоритм вероятностного поиска решения (4.72)-(4.74) при $N = 10$ в пакете Maple

Как свидетельствуют данные (



Рисунок 0.31) метод демонстрирует приемлемую точность (которая не сильно ухудшается с усложнением геометрии задачи и ее размерности) даже на небольшой ~ 100 траекторий статистике.

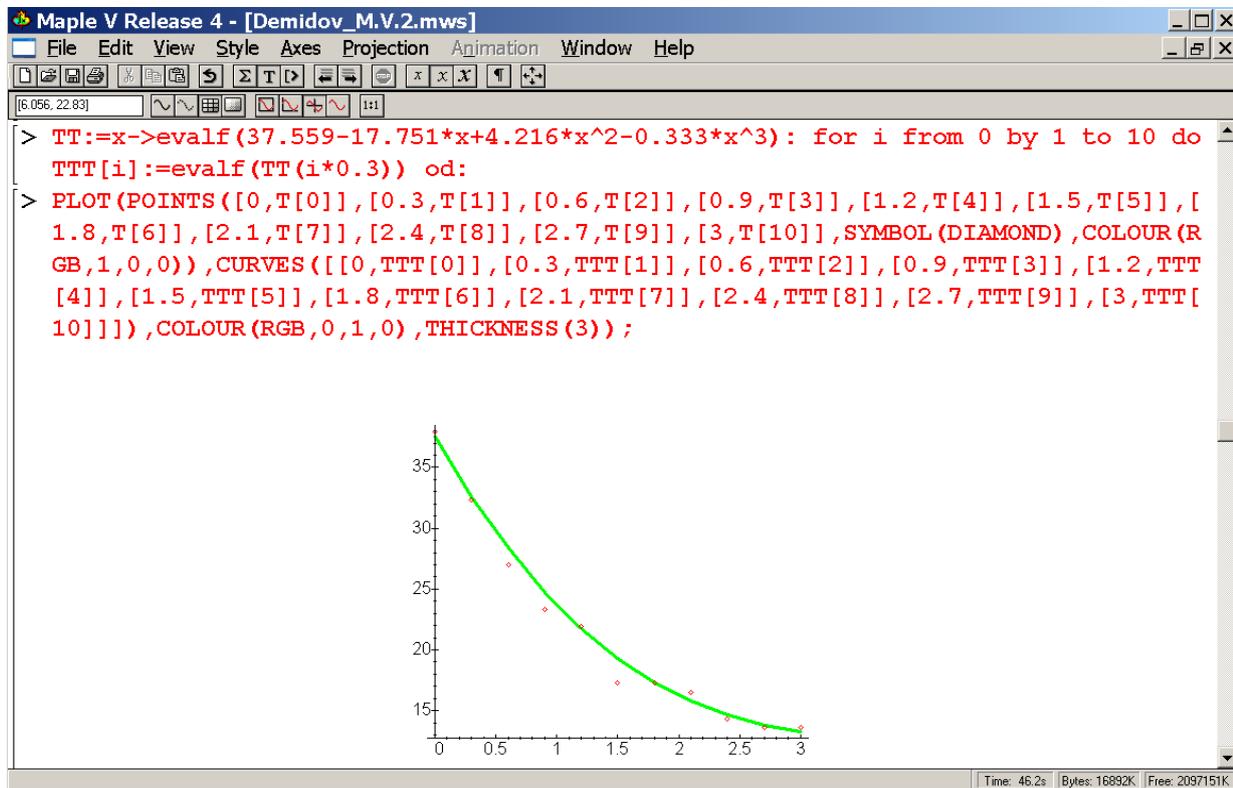


Рисунок 0.31– Результаты и погрешность вероятностного метода решения (4.3)-(4.5) при $N = 10$ в Maple

4.12 Нестационарный вариант моделей в теплопроводности

Рассмотрим численное интегрирование нестационарной задачи (4.70)-(4.74) с $T(x, 0) = 0$ в качестве начального условия. Осуществим его тремя наиболее употребительными способами: методом сеток (конечных разностей), методом прямых (дискретизацией задачи только по одной – пространственной переменной) и методом конечных элементов. Во всех случаях временной интервал распространим до т.н. времени установления – момента, когда численное решение выйдет на стационарное в рамках заданной погрешности значение. Полученные решения затем сопоставим с уже известным нам решением стационарной задачи (4.72)-(4.74), Описанная техника является разновидностью метода инвариантного погружения.

4.12.1 Реализация и тестирование сеточного алгоритма

Для выбранных нами параметров задачи имеем модель нагрева:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} &= \alpha^2 \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} - k^2 T(x, t), & T(x, 0) &= 0, \\ \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} &= -\frac{q}{\chi^2}, & \frac{\partial T(L, t)}{\partial x} &= -\alpha^2 T(L, t), \end{aligned}$$

(4.92)

где α^2 – некоторый эффективный коэффициент теплоотдачи на правой границе ($x = L$) или в конце контура. Возьмем зна-

чение $\alpha^2 = -\frac{\partial \ln T(L, t)}{\partial x}$ из полученного ранее аналитического решения (см. рис. 4.7, 4.8) равным 0,1017.

При задании видеоизмененных по сравнению с исходной постановкой граничных условий в (4.92) использованы законы теплопроводности *Фурье* (тепловой поток направлен навстречу, а его плотность пропорциональна градиенту температуры) и теплового баланса.

Проинтегрируем это уравнение численно в Excel. Достоверность результата будем контролировать, сопоставляя полученную табличную функцию двух переменных уже известным решением для *установившегося температурного режима*. Такое полученное

в предыдущем параграфе решение, отвечающее $t \rightarrow \infty$ и соот-

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = 0$$

ветственно $\frac{\partial T}{\partial t}$, называют *асимптотическим*. Физический асимптотического решения заключается в том, что в стационарном режиме теплосодержание контура остается неизменным, т.е. уходящий тепловой поток в точности равен поступающему. Можно доказать, что для выхода на асимптотическое решение или для достижения стационарных условий теплообмена требует-

ся время t порядка $(2 \div 3) \cdot \frac{x^2}{\alpha^2} (2 \div 3)$.

По сравнению с ОДУ дискретизация УЧП сложнее: во-первых, сетка становится многомерной, и, во-вторых, оказывается, что для обеспечения устойчивости вычислений между густотой дискретизации задачи по отдельным переменным требуется соблюдать вполне определенные соотношения. В основе ранжирования независимых переменных при дискретизации УЧП лежат глубинные свойства этих уравнений, отражающие *причинно-следственные связи* в так называемые *неточечных* или *распределенных* системах. Суть этого заключается в том, что *невозможно создать алгоритм, позволяющий вычислять следствие до причины*.

Для задачи (4.92) сконструируем двумерную сетку $x \times t$ с ячейками равного размера $\Delta x \times \Delta t$, как показано на рис. 3.7, ограничившись числом узлов по пространству $i_{\max} = 10$.

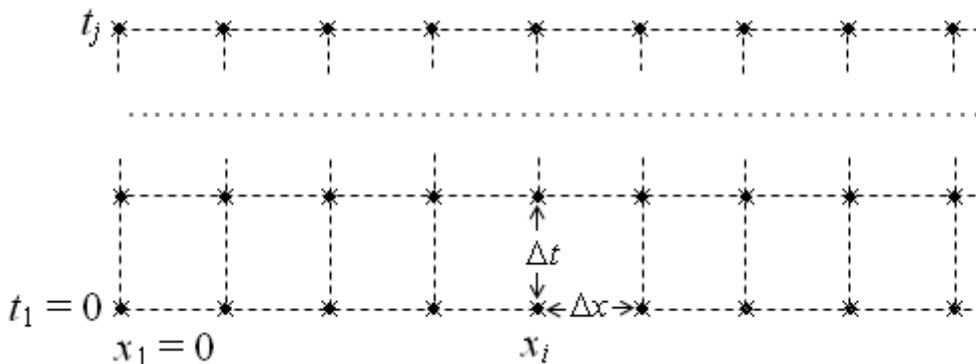


Рисунок 0.32– Сетка для численного интегрирования одномерного уравнения теплопроводности

Фактическая величина пространственного разрешения в нашей модели составляет $\Delta x = \frac{L}{i_{\max}}$, а пространственное положение i -й узловой точки определяется соотношением

$$x_i = (i - 1)\Delta x, \quad i = 0 \div i_{\max} \quad (4.93)$$

Аналогично определяются узловые значения времени

$$t_j = (j - 1)\Delta t, \quad j = 0 \div j_{\max} \quad (4.94)$$

Величину Δt в уравнении (4.94) следует выбрать такой, чтобы удовлетворить соотношению причинности

$$\Delta t < \frac{x^2}{a^2} \cdot \Delta x^2. \quad (4.95)$$

Смысл неравенства (4.95) заключается в том, что прогноз теплового режима пластины можно распространять только на временной интервал, соответствующий перераспределению тепла в пределах элементарных ячеек, которые формируют суммарное тепловое поле. Несоблюдение этого условия эквивалентно разби-

ению непрерывной среды на элементарные, не взаимодействующие между собой объемы – в противоречие природе теплопроводности. Практически нарушение (4.95), приводит к быстрому «раскачиванию» решения и переполнению разрядной сетки ЭВМ – т.н. *болтанке*.

Поскольку n -кратное увеличение пространственного разрешения или равнозначное измельчение пространственной компоненты сетки требует квадратичного $\sim n^2$ измельчения ее временной компоненты (см. критерий (4.95)), общее число узлов возрастает как $\sim n^3$. Соответственно резко увеличивается объем таблицы $T(x, t)$ и время ее вычисления. Отмеченное обстоятельство, характеризуемое как *проклятие размерности*, препятствует применению слишком мелких сеток при решении УЧП.

Отличительной особенностью алгоритмов интегрирования краевых задач для ДУ, в том числе УЧП, является их *нерегулярность*: значения искомых функций во внутренних точках расчетной области и соответственно сетки определяются *по универсальным формулам* (они конструируются дискретизацией ДУ), а на границе используются особые *краевые конечно-разностные соотношения*, получаемые дискретизацией граничных условий.



Для задачи (Z1) эволюционное отображение следует из

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} = a^2 \frac{T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j}{\Delta x^2} - k^2 T_i^j, \quad i = 1 \div (i_{\max} - 1 = 9)$$

(4.96)

и имеет вид (воспользуемся наиболее простой явной схемой интегрирования по времени):

$$T_i^{j+1} = \left(1 - \left(2 \frac{a^2}{\Delta x^2} + k^2\right) \Delta t\right) T_i^j + \frac{a^2 \Delta t}{\Delta x^2} (T_{i+1}^j + T_{i-1}^j),$$

$i = 1 \div (i_{\max} - 1 = 9).$

(4.97)

На левой ($x = 0$) и правой ($x = L$) границах имеем:

$$T_0^{j+1} - T_1^{j+1} = \left(\frac{q}{\lambda^2}\right) \cdot \Delta x \quad \text{и} \quad T_{i_{\max}}^{j+1} - T_{i_{\max}-1}^{j+1} = -\alpha^2 \Delta x T_{i_{\max}}^{j+1}$$

(4.98)

Схеме (4.98) соответствуют явные выражения для пересчета температуры на краях в следующий $j + 1$ -й момент времени:



$$T_0^{j+1} = T_1^{j+1} + \left(q / \lambda^2 \right) \cdot \Delta x \quad \text{и} \quad T_{i_{\max}}^{j+1} = \left(1 + \alpha^2 \Delta x \right)^{-1} T_{i_{\max}-1}^{j+1} \quad (4.99)$$

Значение температуры в узловых точках в последующий момент времени определяется сначала для всех внутренних узлов – со 2-го по 9-й, а затем в крайних (1-м и 10-м узлах). Замечательно, что Excel автоматически пересчитывает содержимое ячеек – по мере поступления необходимой для расчета информации. В результате отпадает необходимость в дополнительных программистских ухищрениях, и интегрирование одномерных УЧП сводится, как и интегрирование ОДУ, к удлинению расчетной области вдоль маршевой переменной при помощи мыши. Компьютерная реализация модели показана на (рис. 4.33-4.34), а результат интегрирования задачи (4.92) с оценкой погрешности – на (рис. 4.35-4.36.)



Microsoft Excel - Демидов М. Сетка.xls

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Данные Окно Справка

Arial Cyr 10 Ж К Ч

B18 fx

	A	B
3	Параметры модели:	
4		
5	Кэффициент температуропроводности $a =$	1
6	Кэффициент теплоотдачи $k =$	0,5
7	Пространственный размер задачи $L =$	3
8	Тепловой поток на левой границе $q =$	3000
9	Параметр теплопроводности $\text{Lamda} =$	13
10	Параметр $\text{Alpha} =$	0,319
11	Число счетных ячеек $N =$	10
12	Размер счетной ячейки $dx =$	0,3
13	Скорость передачи энергии теплопроводностью $(a/dx)^2 =$	11,11111
14	Скорость передачи энергии теплоотдачей $k^2 =$	0,25
15	Шаг интегрирования по времени $dt =$	0,02

Исходные данные / Конечно-разностная схема / Графики



Рисунок 0.33 – Исходные данные в задаче (4.92) для интегрирования
методом сеток в Excel



Microsoft Excel - Демидов М. Сетка.xls

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Данные Окно Справка

Введите вопрос

Arial Cyr 10 Ж К Ч

C3 $f = (1 - (2 * a^2 / dx^2 + k^2) * dt) * C2 + a^2 / dx^2 * dt * (D2 + B2)$

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	t	x0	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10
2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0,02	5,3254	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0,04	6,5089	1,1834	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	0,06	7,4234	2,098	0,26298	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0,08	8,1886	2,8631	0,611	0,05844	0	0	0	0	0	0	0
7	0,1	8,8572	3,5318	0,98563	0,16795	0,0129869	0	0	0	0	0	0
8	0,12	9,4572	4,1317	1,3648	0,31438	0,0444729	0,00289	0	0	0	0	0
9	0,14	10,005	4,6796	1,73943	0,48626	0,0949888	0,01147	0,00064	0	0	0	0
10	0,16	10,512	5,1863	2,10563	0,67536	0,1629031	0,02757	0,0029	0,000143	0	0	0
11	0,18	10,985	5,6592	2,46185	0,87594	0,2458932	0,05202	0,00776	0,000723	3,2E-05	0	0
12	0,2	11,429	6,1038	2,80764	1,08398	0,341592	0,08501	0,01599	0,002129	0,00018	7E-06	6,83E-06
13	0,22	11,85	6,5242	3,14305	1,29662	0,4478395	0,12626	0,02817	0,004765	0,00057	4,5E-05	4,37E-05
14	0,24	12,249	6,9237	3,46839	1,51184	0,5627567	0,1753	0,04463	0,00901	0,00138	0,00016	0,000157
15	0,26	12,63	7,3047	3,7841	1,72816	0,6847467	0,23148	0,06553	0,015185	0,0028	0,00043	0,000419

Исходные данные / Конечно-разностная схема / Графики /



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
993	19,82	41,517	36,192	31,6831	27,8894	24,725466	22,1201	20,0147	18,36171	17,124	16,2738	15,79166
994	19,84	41,518	36,192	31,6836	27,8899	24,725963	22,1206	20,0151	18,36218	17,1245	16,2742	15,7921
995	19,86	41,518	36,193	31,6841	27,8904	24,726458	22,1211	20,0156	18,36266	17,125	16,2747	15,79254
996	19,88	41,519	36,193	31,6846	27,8909	24,72695	22,1216	20,0161	18,36313	17,1254	16,2751	15,79297
997	19,9	41,519	36,194	31,6851	27,8914	24,72744	22,1221	20,0166	18,36359	17,1259	16,2755	15,7934
998	19,92	41,52	36,194	31,6856	27,8919	24,727926	22,1225	20,017	18,36406	17,1263	16,276	15,79383
999	19,94	41,52	36,195	31,6861	27,8924	24,72841	22,123	20,0175	18,36452	17,1268	16,2764	15,79426
1000	19,96	41,521	36,195	31,6866	27,8929	24,728891	22,1235	20,018	18,36498	17,1272	16,2769	15,79468
1001	19,98	41,521	36,196	31,6871	27,8933	24,729369	22,124	20,0184	18,36543	17,1277	16,2773	15,7951
1002	20	41,522	36,196	31,6875	27,8938	24,729845	22,1244	20,0189	18,36589	17,1281	16,2777	15,79552
1003												
1004	x	0	0,3	0,6	0,9	1,2	1,5	1,8	2,1	2,4	2,7	3
1005	Т стац.	37,559	32,664	28,4742	24,9353	21,993416	19,5946	17,685	16,21055	15,1174	14,3515	13,859
1006												
1007	dT/T стац	0,1055	0,1081	0,11285	0,11865	0,1244204	0,12911	0,13197	0,132959	0,13301	0,13422	0,13973

Рисунок 0.34– Реализация сеточного алгоритма для задачи (4.20) в Excel

Как свидетельствуют результаты интегрирования на (рис. 4.35–4.36) сложность алгоритма не велика, а точность вполне приемлемая. Это обстоятельство позволяет рекомендовать данный метод для решения одномерных нестационарных задач теплопроводности.

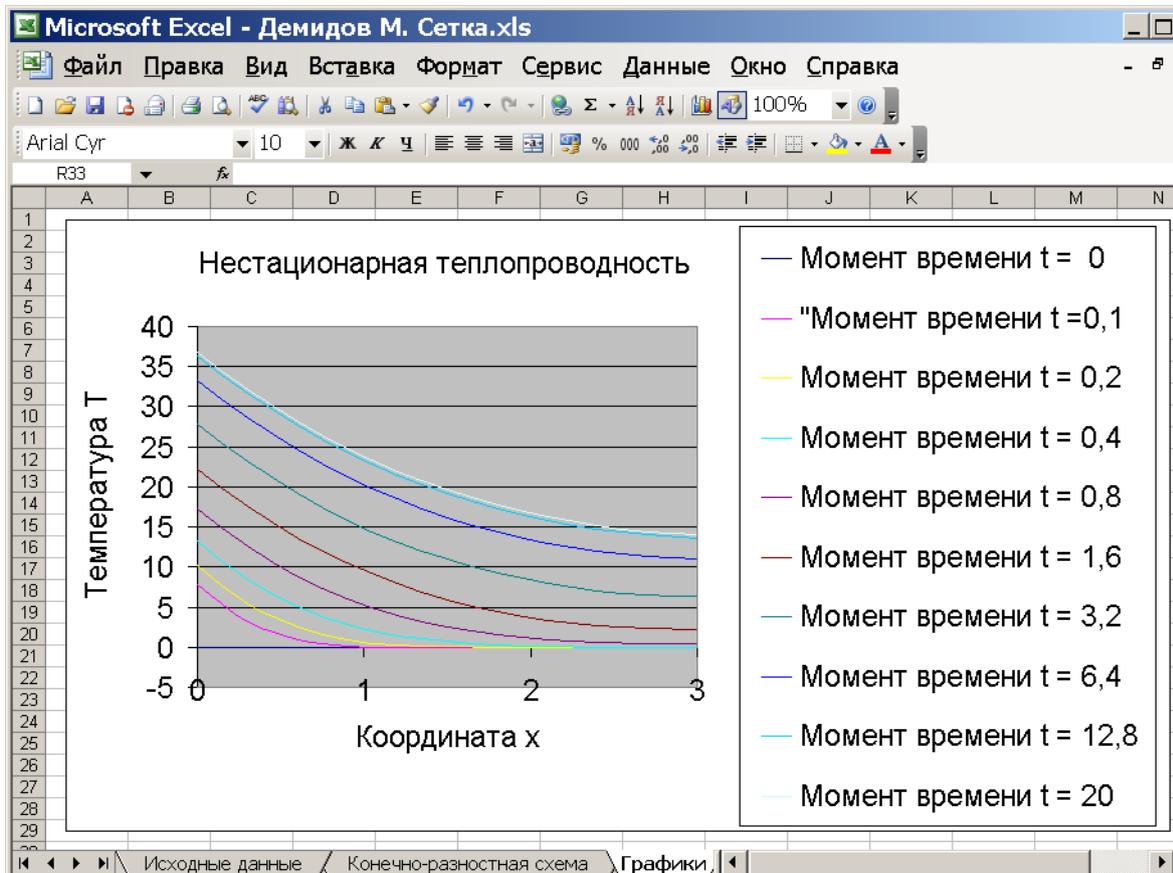




Рисунок 0.35– Выход решения задачи (4.20) на установившийся режим

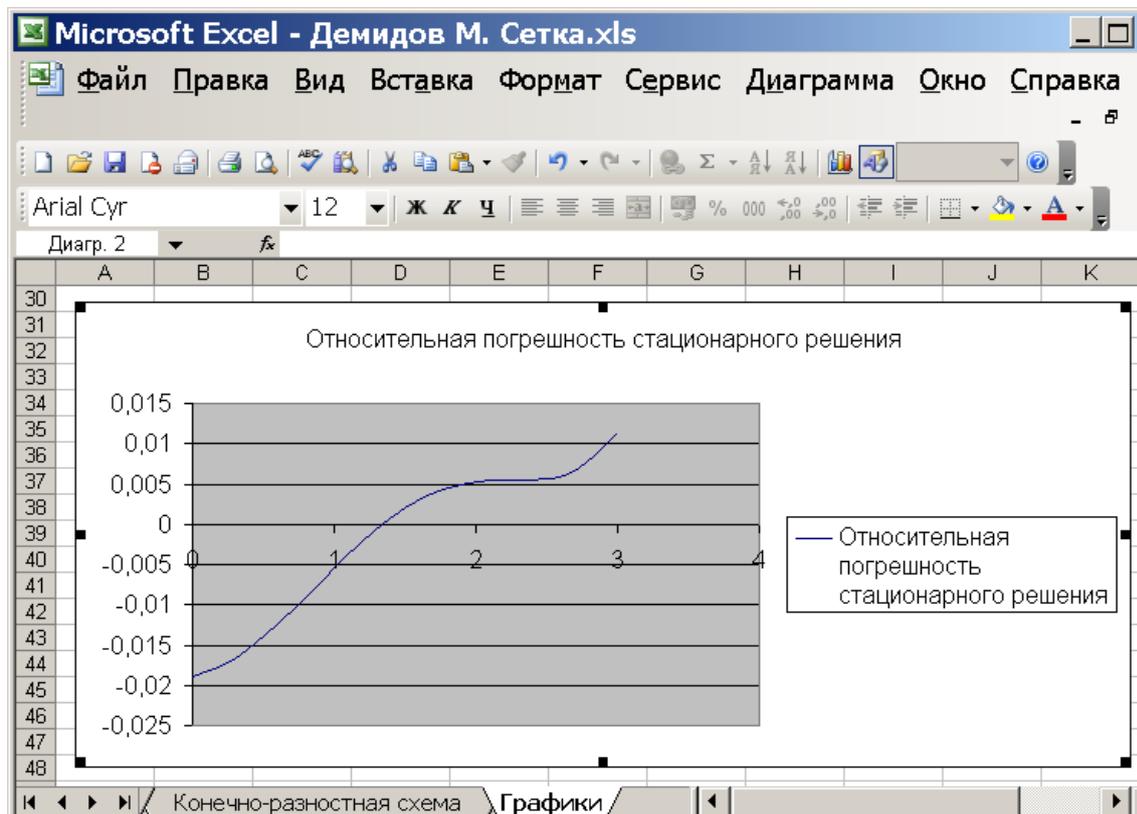




Рисунок 0.36– Ошибка интегрирования задачи (4.92) в установившемся режиме

4.12.2 Интегрирование задачи методом прямых

Идея этого метода состоит в дискретизации задачи лишь по пространственной переменной, после чего полученные дифференциально-разностные уравнения интегрируются как система обыкновенных дифференциальных уравнений высокого (равного числу узловых по пространству точек M) порядка. Преимуществом подхода выступает возможность использовать высокоэффективные алгоритмы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений, характеризующиеся высоким порядком аппроксимации (до пятого включительно) по времени. В нашем случае воспользуемся встроенным интегратором MathCAD. Соответствующая программа, результаты вычислений и погрешность приведены на (рис. 4.37-4.38).



Mathcad - [Демидов М.В. Метод прямых.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 **B** *I* U $\frac{1}{x}$ $\frac{d}{dx}$ ∞ \int_a^b $\sum_{n=1}^{\infty}$ $\prod_{n=1}^{\infty}$ \int \sum \prod $\lim_{a \rightarrow b}$ $\lim_{a^+ \rightarrow b^+}$ $\lim_{a^- \rightarrow b^-}$ $\nabla_x f$

Числовые параметры модели

$a := 1$ $k := 0.5$ $L := 3$ $\lambda := 13$ $q := 3000$ $\alpha := 0.319$ $\beta := 0.09$ $T_{max} := 20$
 $Spacepts := 10$ $Timepts := 1000$

Формулировка задачи на языке MathCAD

Given

$$T_t(x,t) = a^2 \cdot T_{xx}(x,t) - k^2 \cdot T(x,t)$$
$$T(x,0) = 0$$
$$T_x(0,t) = \frac{-q}{\lambda^2} \quad T_x(L,t) = -\alpha^2 \cdot T(L,t)$$
$$Temp := Pdsolve \left[T, x, \begin{pmatrix} 0 \\ L \end{pmatrix}, t, \begin{pmatrix} 0 \\ T_{max} \end{pmatrix}, Spacepts, Timepts \right]$$



Рисунок 0.37– Применение метода прямых для интегрирования задачи (4.92)
средствами MathCAD

Представленный результат свидетельствует во высоком качестве встроенного в MathCAD интегратора уравнений с частными производными и крайнее удобство программирования подобных задач, что позволяет рекомендовать пакет для широкого применения в численных исследованиях свойств параболических задач математической физики.



Mathcad - [Демидов М.В. Метод прямых.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 B I U

Решение задачи методом прямых и погрешность установившегося решения

Точное решение задачи:

$$T_{exact}(x) := \frac{\left[q \frac{\left(a - \exp\left(L \frac{k}{a} \right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2 \right)}{\left(-2 + \exp\left(L \frac{k}{a} \right) + \exp\left(-L \frac{k}{a} \right) \right)} + q \cdot a \right] \cdot \exp\left(x \frac{k}{a} \right)}{k \cdot \lambda^2} - q \left(a - \exp\left(L \frac{k}{a} \right) \cdot a + \beta^2 \cdot k \cdot \lambda^2 \right) \frac{\exp\left(-x \frac{k}{a} \right)}{\left(k \cdot \lambda^2 \right) \cdot \left(-2 + \exp\left(L \frac{k}{a} \right) + \exp\left(-L \frac{k}{a} \right) \right)}$$

$x := \hat{0}, \hat{0}, \hat{1}, \dots, \hat{L}$

Temp(x, 0)
Temp(x, 0.2)
Temp(x, 0.4)
Temp(x, 0.8)
Temp(x, 1.6)
Temp(x, 3.2)
Temp(x, 6.4)
Temp(x, 12.8)
Temp(x, 20)

$\frac{Temp(x, 20) - T_{exact}(x)}{T_{exact}(x)}$



Рисунок 0.38— Результат и погрешность интегрирования задачи (4.20)
средствами MathCAD

4.12.3 Конечно-элементный алгоритм

Реализация модели (4.92) методом установления в конечноэлементном пакете FlexPDE показана на (рис. 4.39-4.42). В данном случае решалась двумерная задача с однородным вдоль оси ординат тепловым полем. Пришлось также выбрать соизмеримые длину и ширину расчетной области, чтобы число почти правильных треугольных элементов разбиения не оказалось чрезмерным (свободно распространяемая версия пакета имеет существенные ограничения по числу КЭ).



```
Demidov_1.PDE
Abandon Edit Save Save As... Domain Run Print
TITLE { Demidov_1.pde }
'Stationar Heat Conductivity by Relaxation Method'
{Стационарная задача теплопроводности методом установления}

SELECT
  errlim= 1e-2

VARIABLES
  temp

DEFINITIONS
  Lx= 3          Ly= 1.5          lamda = 13          q = 3000
  tempini= 0    a = 1            k=0.5            alpha=0.319
  fluxd_x0= -q/lamda^2
  fluxd_xL= -alpha^2*temp
  fluxd_y=0

INITIAL VALUES
  temp= tempini

EQUATIONS
  dt(temp)= div[a^2*grad(temp)]-k^2*temp

BOUNDARIES
region 1
  start [0,0] natural(temp)=1 line to [Lx,0] natural(temp)=fluxd_xL line to [Lx,Ly] natural(temp)=0 line to [0,Ly]
  natural(temp)=fluxd_x0 line to finish

TIME
  0 to 20

PLOTS
  for t= 0.2, 0.4, 0.8, 1.6, 3.2, 6.4, 12.8, 20
```

Рисунок 0.39– Программа конечно-элементного интегрирования задачи (4.20) средствами FlexPDE

Результаты выполненных расчетов свидетельствуют, что решать данную пространственно одномерную задачу таким способом не рационально: пришлось освоить весьма неординарный синтаксис макроязыка FlexPDE, а точность решения оказалась меньшей по сравнению с альтернативными методами.

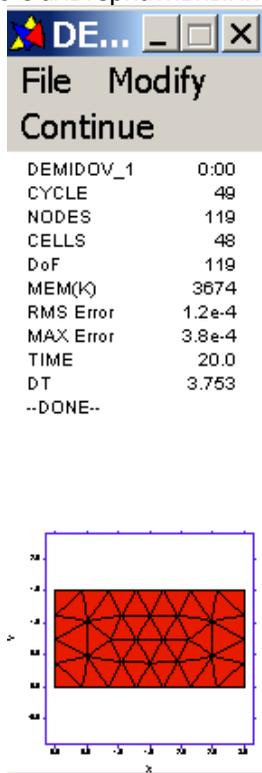


Рисунок 0.40– Расчетная область задачи (4.92) в пакете FlexPDE

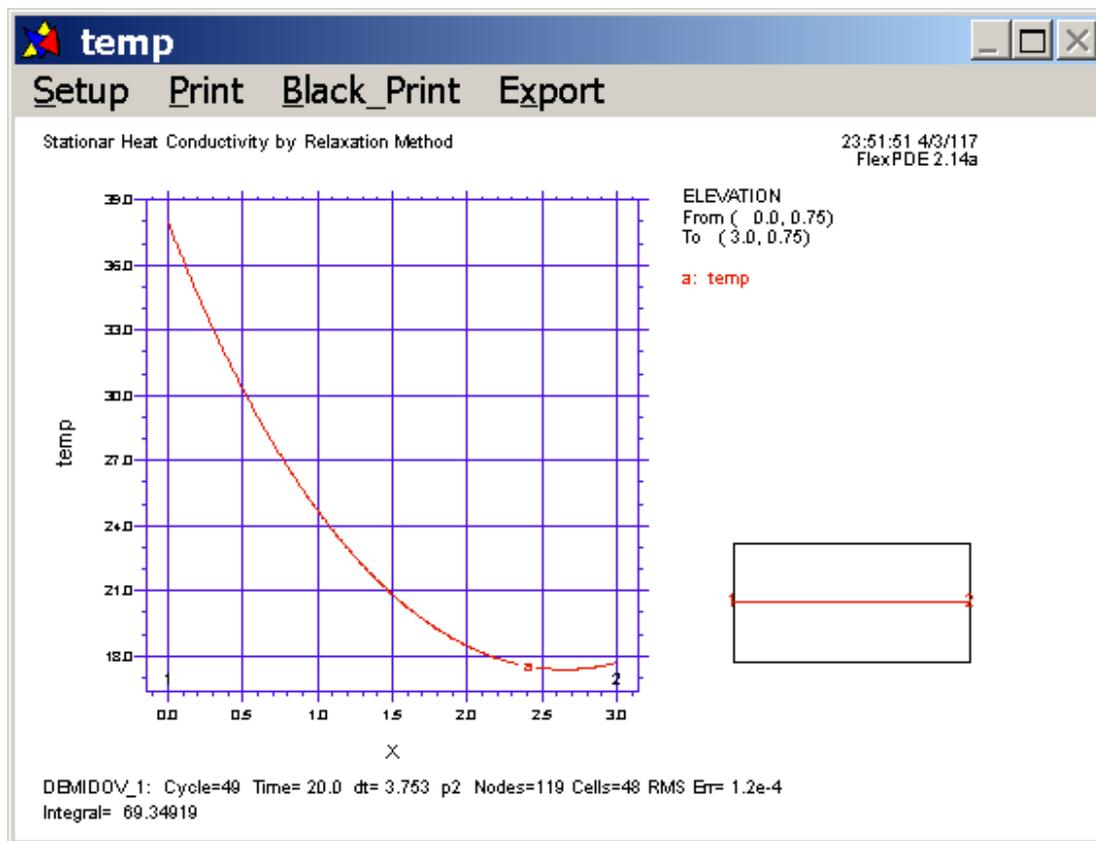




Рисунок 0.41– Установившееся решение задачи (4.92) средствами FlexPDE

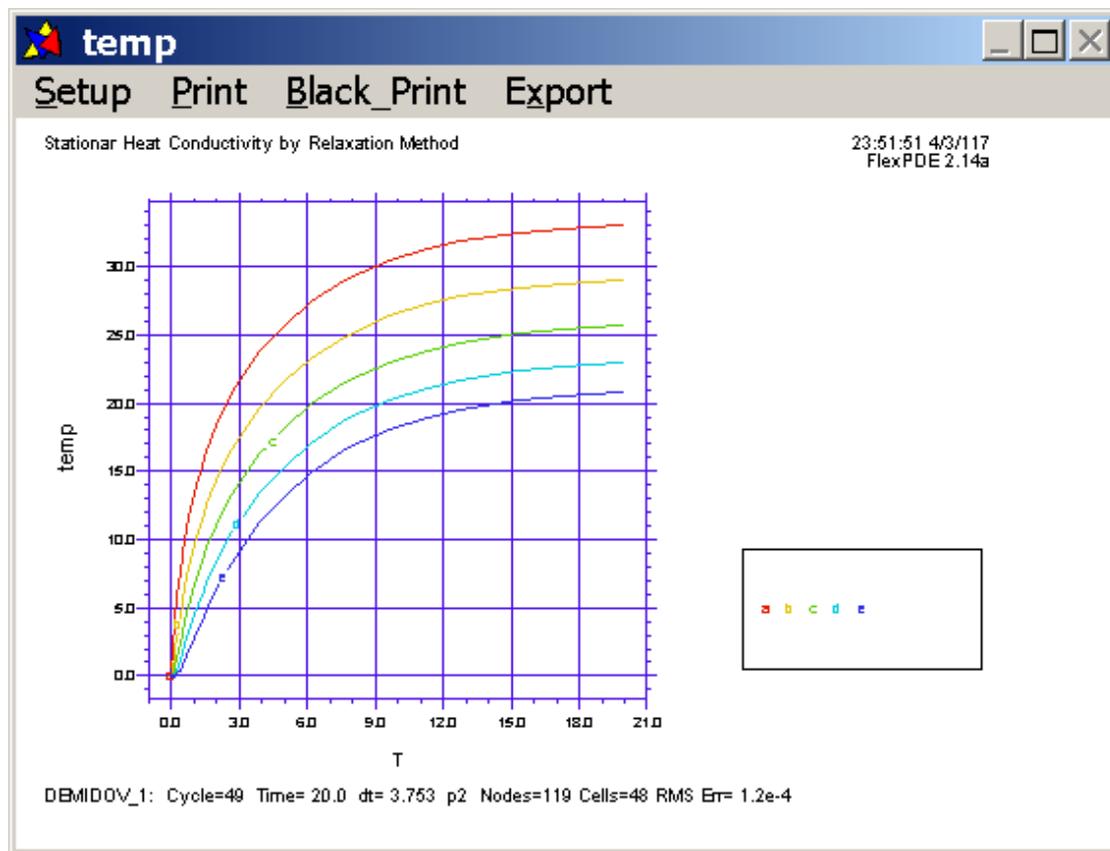


Рисунок 0.42— Динамика температуры на расстоянии $0.1 L$, $0.2 L$, $0.3 L$, $0.4 L$ и $0.5 L$ от источника в задаче (4.92), рассчитанная средствами FlexPDE

4.13 Сопоставление методов и средств моделирования в задачах теплопроводности

При решении практических задач теплопроводности важно правильно выбрать метод, исходя из комплекса противоречивых требований: 1) результативности; 2) сложности реализации; 3) обеспеченности средствами автоматизации вычислений (пакетами прикладных программ, библиотеками и т.п.); 4) потребности в вычислительных ресурсах (числе элементарных арифметических действий); 5) точности; 6) легкости и информативности представления результатов математического анализа задачи; 7) универсальности (возможности варьирования постановки задачи без кардинального изменения реализующих программных кодов. Выбирая перечисленные характеристики методов в качестве компонентов некоторого характеризующего вектора $\mathbf{P} = (P_1, P_2, \dots, P_7)$, можно сравнивать эти методы в контексте иерархии предъявляемых к решению и процессу его получения целей $\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2, \dots, Q_7)^T$. Для выявления оптимального метода следует ранжировать множество сравниваемых методов $M = \{M_1, M_2, \dots, M_N\}$ на основе иерархии частных целей Q_1, Q_2, \dots, Q_7 . Максимизации, очевидно, подлежит целевая функция $(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \rightarrow \max$.

Методу, имеющему однозначно лучший показатель будем присваивать больший ранг, а при неразличимых частных достоинствах нескольких методов всем им присваивать средние ранги. Результат ранжирования использованных выше методов решения задач одномерной теплопроводности приведен в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Сравнительная характеристика методов интегрирования в одномерно задаче теплопроводности

№	Метод	Характеристика	Результативность	Сложность реализации	Обеспеченность CAD	Ресурсоемкость	Точность	Средства отображения	Универсальность	Равновзвешенный итог
1	Аналитический		5.5	9	7.5	9.5	10	5.5	1	48
2	Рядов		5.5	9	7.5	9.5	8	5.5	3	48
3	Галеркина		5.5	6	7.5	6.5	8	5.5	6	45
4	Коллокации		5.5	6	7.5	6.5	5	5.5	6	42
5	Прогонки		5.5	3	2.5	8	2	5.5	3	29,5
6	Пристрелки		5.5	3	2.5	5	5	5.5	3	29,5
7	Монте-Карло		5.5	9	2.5	1	2	5.5	6	31,5
8	Сеток		5.5	3	2.5	3	5	5.5	8.5	33
9	Конечных эл-в		5.5	1	7.5	3	2	5.5	10	34,5
10	Прямых		5.5	6	7.5	3	8	5.5	8.5	44

Отметим, что данные таблице 4.2 отражают личный опыт и профессиональные навыки дипломанта, а более объективный результат позволяет получить экспертный опрос в профессиональной среде. Тем не менее при необходимости решать подобные

задачи автор проекта будет на данном этапе пользоваться именно приведенными в этой таблице данными. Если все критерии качества считать равноправными, для рассмотренной задачи иерархию приспособленности методов отрадает последний столбец.

4.14 Астрофизическое приложение результатов: тепловая модель звезды

Рассмотрим задачу из астрофизики. Имеется звезда радиуса $R = 10^5$ км с температурой поверхности $T(R) = 10^4$ К. Требуется оценить распределение температуры в недрах этой звезды, а также описать процесс ее рождения в результате запуска неуправляемой термоядерной реакции по действием гравитационных сил.

При решении задачи будем использовать результаты предыдущего анализа моделей и методов теплопроводности. В качестве тепловой модели звезды используем уравнение, отражающее нелинейную теплопроводность звездной среды и происходящие в ее толще конвективные процессы (более горячие глубинные слои расширяются, разуплотняются и всплывают, а на их место опускаются внешние – более холодные и плотные слои):



$$\frac{\partial(x^2 T(x,t))}{\partial t} = a^2 \frac{\partial}{\partial x} \left((x^2 T(x,t))^3 \cdot \frac{\partial(x^2 T(x,t))}{\partial x} \right) - b^2 \frac{\partial(x^2 T(x,t))^2}{\partial x}, \quad (4.100)$$

где x – расстояние от центра звезды, a^2 и b^2 – коэффициенты теплопроводности и конвекции соответственно.

В установившемся режиме это уравнение принимает вид:

$$a^2 \frac{\partial}{\partial x} \left((x^2 T(x))^3 \cdot \frac{\partial(x^2 T(x))}{\partial x} \right) - b^2 \frac{\partial(x^2 T(x))^2}{\partial x} = 0, \quad (4.101)$$

а естественным граничным условием при $x = 0$ представляется $x^2 T(0) = 0$.

Решением (4.93) служит (Рисунок 0.43):

$$T(x) = \frac{\frac{1}{2^{\frac{3}{2}} b}}{a x^{-\frac{3}{2}}} \quad (4.102)$$



Здесь параметры a и b отвечают за установившееся распределение температуры. В уравнении (4.100) эти параметры определяют также время переходного процесса – от момента начала энерговыделения до выхода на стационарный режим.



Maple V Release 4

File Edit View Insert Format Options Window Help

dsolve(a^2*z(x)^3*diff(z(x),x)-b^2*z(x)^2=0,z(x));

Demidov_M.V.3.mws

```
> restart;
```

```
> dsolve(a^2*diff(z(x)^3*diff(z(x),x),x)-b^2*diff(z(x)^2,x)=0,z(x));
```

$$z(x) = 0, x = \frac{1}{2} \frac{a^2 z(x)^2}{b^2} - \frac{1}{2} \frac{C1 a^4 \ln(b^2 z(x)^2 + C1 a^2)}{b^4} - C2$$

```
> dsolve(a^2*z(x)^3*diff(z(x),x)-b^2*z(x)^2=0,z(x));
```

$$z(x) = 0, z(x)^2 = \frac{2 x b^2 + C1 a^2}{a^2}$$

```
> dsolve({a^2*z(x)^3*diff(z(x),x)-b^2*z(x)^2=0,z(0)=0},z(x));
```

$$z(x) = 0, z(x) = \frac{\sqrt{2} \sqrt{x b^2}}{a}, z(x) = -\frac{\sqrt{2} \sqrt{x b^2}}{a}$$

Time: 0.3s | Bytes: 1919K | Free: 2097151K



Рисунок 0.43– Распределение температуры в недрах звезды согласно модели (4.101)

Для численного анализа переходного процесса воспользуемся методом прямых, реализованным в пакете MathCAD. Кроме того, чтобы сократить объем вычислений, откажемся от инициализации модели (4.100) реалистичными коэффициентами. Выберем, например, $a = b = R = 1$, $T(1, \infty) = 10$, а коэффициент лучистых потерь с поверхности $\epsilon = 0.1$. Также, во избежание сингулярности в центре звезды ядерный тепловой поток q зададим на условной границе ядра при $x = R/10$:

$$q(R/10) = q(R) = 4(R)^2 (T^4(R)). \quad (4.103)$$

Запуск реакций в ядре звезды опишем известной термоактивационной зависимостью.

$$q\left(\frac{R}{10}, t\right) = q\left(\frac{R}{10}, t \rightarrow \infty\right) e^{-\frac{\Delta t}{\tau}}, \quad (4.104)$$

в которой Δt – время запуска ядерной реакции.

Результаты численного исследования этой модели показаны на (рис. 4.44-4.45).



Числовые параметры модели

$a := 1$ $b := 1$ $Rad := 1$ $\sigma := 0.1$ $T_{surf} := 10$ $\Delta t := 10^{-3}$ $t_{max} := 7$

$Spacepts := 10$ $Timepts := 100000$

+

Формулировка задачи на языке MathCAD

Given

$$xxT_x(x, t) = a^2 \cdot \left(3 \cdot xxT(x, t)^2 \cdot xxT_x(x, t)^2 + xxT(x, t)^3 \cdot xxT_{xx}(x, t) \right) - 2 \cdot b^2 \cdot xxT(x, t) \cdot xxT_x(x, t)$$

$$xxT(x, 0) = 0 \quad xxT_x(Rad, t) = -4 \cdot \pi \cdot \sigma \cdot xxT(Rad, t)^4 \quad xxT_x(0.1 \cdot Rad, t) = 4 \cdot \pi \cdot Rad^2 \cdot \sigma \cdot T_{surf}^4 \cdot \exp\left(\frac{-\Delta t}{t + 10^{-6}}\right)$$

$$xT := \text{Pdesolve}\left[xxT, x, \left(\begin{matrix} 0.1 \cdot Rad \\ Rad \end{matrix}\right), t, \left(\begin{matrix} 0 \\ t_{max} \end{matrix}\right), Spacepts, Timepts\right]$$

Решение задачи методом прямых и погрешность установившегося решения

$x := 0.1 \cdot Rad, 0.11 \cdot Rad \dots Rad$

$$\underline{xT(x, 0)} \cdot x^{-2}$$

$$\underline{xT(x, t_{max} \cdot 0.005)} \cdot x^{-2}$$

$$\underline{xT(x, t_{max} \cdot 0.016)} \cdot x^{-2}$$

$$\underline{xT(x, t_{max} \cdot 0.6)} \cdot x^{-2}$$

$$\underline{xT(x, t_{max} \cdot 0.8)} \cdot x^{-2}$$

$$\underline{xT(x, t_{max})} \cdot x^{-2}$$

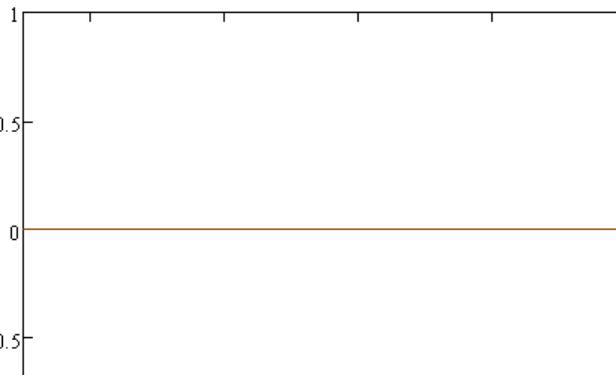


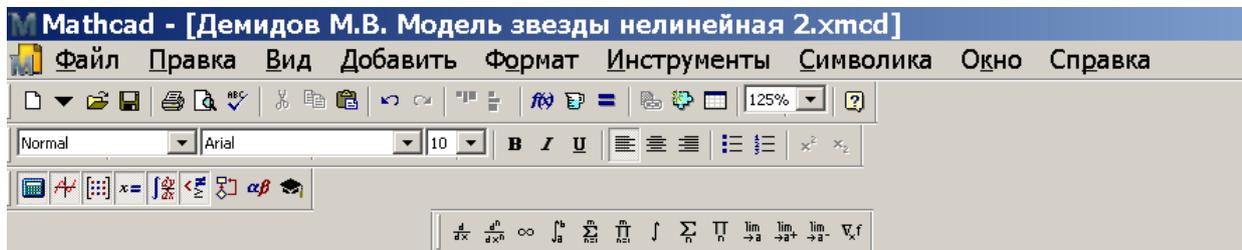


Рисунок 0.44– Программная реализация переформулированной модели (4.100), (4.102)-(4.104) и результаты ее интегрирования

Представленные на (Рисунок 0.44) данные свидетельствуют о невозможности проинтегрировать уравнения (4.100), (4.102)-(4.104) явным по времени методом. Это обусловлено сочетанием нелинейности уравнений и нулевого начального условия. Обойти проблему позволяет переформулировка задачи на близкую – в которой условие Неймана на левой границе заменяется на условие Дирихле. Соответствующее преобразование модели показано на (



Рисунок 0.45).



Числовые параметры модели

$a := 1$ $b := 1$ $Rad := 1$ $\sigma := 0.1$ $T_{surf} := 10$ $\Delta t := 10^{-4}$ $t_{max} := 7$ $Spacepts := 5$ $Timepts := 100000$

Формулировка задачи на языке MathCAD

Given

$$xxT(x, t) = a^2 \left(3 \cdot xxT(x, t)^2 \cdot xxT_x(x, t)^2 + xxT(x, t)^3 \cdot xxT_{xx}(x, t) \right) - 2 \cdot b^2 \cdot xxT(x, t) \cdot xxT_x(x, t)$$

$$xxT(x, 0) = 10^{-5} \quad xxT_x(Rad, t) = -4 \cdot \pi \cdot \sigma \cdot xxT(Rad, t)^4 \quad xxT(0.1 \cdot Rad, t) = \sqrt{\frac{2}{1000}} \cdot T_{surf} \cdot \exp\left(\frac{-\Delta t}{t + 10^{-6}}\right)$$

$$xT := \text{Pdsolve}\left[xxT, x, \begin{pmatrix} 0.1 \cdot Rad \\ Rad \end{pmatrix}, t, \begin{pmatrix} 0 \\ t_{max} \end{pmatrix}, Spacepts, Timepts\right]$$

Решение задачи методом прямых и погрешность установившегося решения

$x := 0.1 \cdot Rad, 0.11 \cdot Rad \dots Rad$

- $\underline{xxT(x, t_{max} \cdot 0.2 \cdot 0.001)} \cdot x^{-2}$
- $\underline{xxT(x, t_{max} \cdot 0.2)} \cdot x^{-2}$
- $\underline{xxT(x, t_{max} \cdot 0.4)} \cdot x^{-2}$
- $\underline{xxT(x, t_{max} \cdot 0.6)} \cdot x^{-2}$
- $\underline{xxT(x, t_{max} \cdot 0.8)} \cdot x^{-2}$

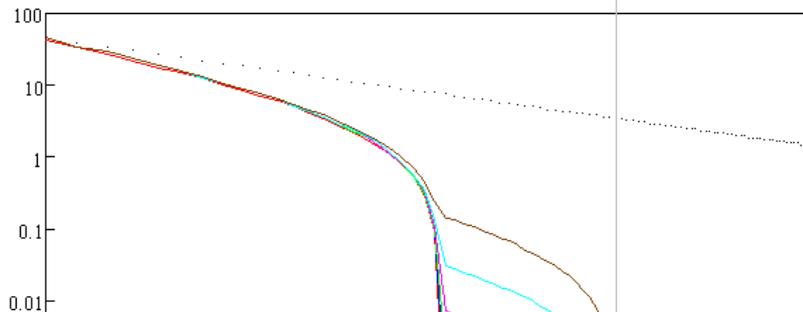




Рисунок 0.45— Рождение звезды согласно переформулированной модели (4.100), (4.102)-(4.104)

Однако и в этом случае возможности встроенного интегратора MathCAD оказываются недостаточными. При допустимом программой измельчении временного шага и огрублении пространственного (в соответствии с критерием Куранта) все равно не удастся рассмотреть эволюцию прогрева звезды до выхода на стационарный режим – счетная неустойчивость развивается раньше. Тем не менее результаты численного анализа позволяют разрешить оба механизма установления теплового стационара: нелинейную теплопроводность и конвекцию. Этот результат (



Рисунок 0.45) наводит на мысль о возможности при выбранных для расчета параметрах модели расщепить ее по физическим процессам – на модель теплопроводности и модель конвекции, которые исследовать отдельно, а затем более или менее аккуратно «срастить».

В заключение параграфа отметим, что при определенных сочетаниях числовых коэффициентов (например, при $b = 2^{-1/2}$) уравнение (4.28) имеет автомодельные решения типа «бегущей волны», что согласуется с результатами численного анализа (

Рисунок 0.45).

Таким образом, рассмотренные в данном параграфе методы аналитического и численного анализа уравнения теплопроводности вкупе с техникой трансформации моделей позволяют решать различные, в т.ч. многомерные и нелинейные задачи теплопроводности, интересные для науки и техники.

Список первоисточников к параграфу 4.10

1. Беляев Н.М., Рядно А.А. Метод нестационарной теплопроводности. М. Высшая школа. 1978. 328с.
2. Лыков А.В. Теория теплопроводности. М. Высшая школа. 1967. 600с.
3. Патанкар С.В. Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах. М. Издательство МЭИ, 2003. 312с.
4. Пискунов Н.С. Дифференциальное и интегральное исчисления (том II). М. Интеграл-пресс. 2002. 410с.
5. Рихтмайер Р. Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. М. Издательство Мир. 1972. 380с.
6. Сабитов К.Б. Уравнения математической физики. М. Высшая школа. 2003. 255с.
7. Форсайт Дж., Вазов В. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных. М. Иностранная литература. 1963. 488с.
8. Юшков П.П. Приближенное решение задач нестационарной теплопроводности методом конечных разностей. Труды Института энергетики АН БССР (выпуск 6.). 1958. 203с.
9. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов многомерных задач математической физики. Новосибирск. Наука. 1967. 195с.
10. http://e-lib.gasu.ru/eposobia/metody/R_1_3.html

4.15 Тепловая и экологическая модели двигателя внутреннего сгорания

Выбранная для реализации в рамках исследовательской работы *математическая модель* состоит из двух суб-моделей – термодинамической и термохимической. При помощи первой производится классический термодинамический анализ рабочего процесса, определяются его энергетические параметры, включая экономичность. Полученные данные затем используются в качестве исходных при проведении термохимического расчета.

4.15.1 Модель теплофизических процессов в ДВС

Для аппроксимации реального цикла в тепловой суб-модели используется цикл *Тринклера*: считается, что часть топлива сгорает при постоянном объеме, а остаток – при постоянном давлении. Особенностью расчетного алгоритма является вычисление взаимно согласованных температуры и давления в конце цикла с показателем политропы расширения. Обозначая индексом "0" исходное состояние рабочего тела, индексами "1", "2", "3" и "4" – состояние рабочего тела по окончании фаз сжатия, сгорания при постоянном объеме, сгорания при постоянном давлении и расширения соответственно, алгоритм тепловой суб-модели удобно представить в виде набора элементарных алгоритмов, отвечающих отдельным стадиям процесса.

Отвечающие такой аппроксимации реального цикла *индикаторные кривые* – зависимости давления и температуры в КС от угла поворота коленвала φ показаны на рис. 3.6, а-б.

Здесь следует отметить, что в данная модель в качестве первичной стадии содержит процедуру расчета эквивалентного элементного состава топливной смеси.

Определение элементного состава топливной смеси. Элементный состав топлива – C^p , H^p и O^p [массовых %] задается для каждого топливного компонента – жидкого или отдельно. Затем вычисляется общее массовое содержание каждого из этих элементов в топливной смеси на основании закона материального баланса.

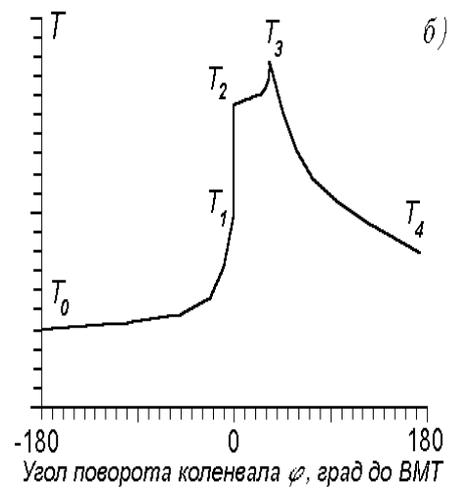
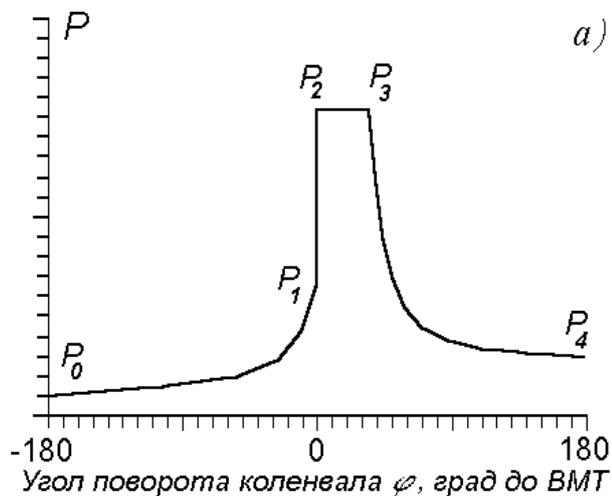


Рисунок 4.46. Модель изменения параметров рабочего тела в ДВС: а – давления, б – температуры

Информационная поддержка модели предусматривает наличие в БД топлив сведений о соответствующих параметрах основных промышленных и ряда перспективных топлив, а также возможность наполнения и редактирования БД.

Сжатие. Параметры рабочего тела в начале сжатия обозначаются P_0 [атм] и T_0 [K], Их численные значения служат начальными данными расчета и выбираются соответственно конкретной конструкции. Параметры рабочего тела в конце сжатия задаются явными выражениями

$$P_1 = P_0 \varepsilon^k, \quad (4.105)$$

$$T_1 = T_0 \varepsilon^{k-1}, \quad (4.106)$$

где ε – степень сжатия, k – усредненный показатель политропы этой стадии.

Горение. Вычисления параметров цикла на этом этапе начинаются с определения состава продуктов сгорания. Процесс предполагается идущим до конца, а неполнота сгорания, имеющая место в действительности, учитывается введением коэффициента потерь тепла ξ . При полном сгорании состав продуктов – CO_2 и H_2O определяется по формулам

$$M_{\text{CO}_2} = \frac{C^P}{12}, M_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{H^P}{2}, M_{\text{N}_2} = 0.79 \cdot AL_0, M_{\text{O}_2} = 0.21 \cdot A(A-1)L_0, \quad (4.107)$$

где M – мольное содержание элемента в 1 кг топлива; L_0 – количество воздуха, необходимое для сгорания 1 кг топлива; A – коэффициент избытка воздуха. Общее количество продуктов сгорания M_2 дается соотношениями

$$M_2 = AL_0 + \frac{H^P}{4} + \frac{O^P}{32}, L_0 = \frac{C^P / 12 + H^P / 4 + O^P / 32}{0.21} \quad (4.108)$$

[моль/кг],

Уравнение сгорания является формой закона сохранения энергии для условий выделения скрытой химической теплоты в заряде. Оно имеет вид

$$\phi \frac{\Delta H}{M_1} + C_V \Big|_{T_0}^{T_1} \cdot (T_1 - T_0) + R \cdot (\lambda T_1 - \mu T_0) = \mu C_P \Big|_{T_0}^{T_3} \cdot (T_3 - T_0) \quad (4.109)$$

где ΔH – теплота сгорания топлива (низшая теплотворная способность); C_V – молярная теплоемкость свежего заряда при постоянном объеме; C_P – молярная теплоемкость заряда при постоянном давлении; λ – степень повышения давления; $\mu = M_2/M_1$ – коэффициент молекулярного изменения; ϕ – коэффициент использования теплоты, запасенной в топливе; $R = 1.985$ кал/моль·К – универсальная газовая постоянная. Величина M_1 равна αL_0 для дизелей, $\alpha L_0 + 1/m\pi$ – для карбюраторных и $\alpha L_0 + 1$ – для газовых двигателей.



Уравнение (4.109) допускает аппроксимацию

$$\frac{1}{\mu} \left\{ \frac{\phi \Delta H}{M_1} + (4.7 + 0.6 \cdot 10^{-3} T_1)(T_1 - T_0) + 1.985 \cdot (\lambda T_1 - \mu T_0) \right\} = (T_3 - T_0) \times$$
$$\times \left\{ 1.985 + \frac{9.2 \cdot M_{CO_2} + 5.7 \cdot M_{H_2O} + 5.1 \cdot M_{N_2} + 5.5 \cdot M_{O_2}}{M_2} + (0.8 \cdot M_{CO_2} + \right.$$
$$\left. + 1.2 \cdot M_{H_2O} + 0.4 \cdot M_{N_2} + 0.4 \cdot M_{O_2}) \cdot \frac{10^{-3}}{M_2} \cdot T_3 \right\}, \quad (4.110)$$

в которой учтена зависимость теплоемкости заряда от состава смеси и температуры. Приведение слагаемых в (3.6) позволяет записать это уравнение в следующей форме

$$(a + bT_3)(T_3 - T_0) = c, \quad (4.111)$$

где



$$a = 1.985 + \frac{9.2 \cdot M_{C_2O} + 5.7 \cdot M_{H_2O} + 5.1 \cdot M_{N_2} + 5.5 \cdot M_{O_2}}{M_2},$$

$$b = (0.8 \cdot M_{CO_2} + 1.2 \cdot M_{H_2O} + 0.4 \cdot M_{N_2} + 0.4 \cdot M_{O_2}) \cdot \frac{10^{-3}}{M_2},$$

$$c = \frac{1}{\mu} \left\{ \frac{\phi \Delta H}{M_1} + (4.7 + 0.6 \cdot 10^{-3} T_1)(T_1 - T_0) + 1.985 \cdot (\lambda T_1 - \mu T_0) \right\}.$$

Корнями уравнения (3.7) служат

$$T_3 = \frac{(bT_0 - a) \pm \sqrt{(bT_0 - a)^2 + 4b(aT_0 + c)}}{2b}, \quad (4.112)$$

но физически осмысленным является лишь один из них – попадающий в интервал температур 0–3000 К.

Температура в момент перехода условий горения от постоянства объема к постоянству давления T_2 находится при помощи интерполяционной формулы

$$T_2 = \frac{\lambda_{\max} - \lambda + (\lambda - 1) / \mu}{\lambda_{\max} - 1} \lambda T_1, \quad (4.113)$$

где λ_{\max} – максимальная степень повышения давления. Величина λ_{\max} определяется в данной работе из уравнения энергетического баланса (3.5) с учетом факта, что при взрывном тепловыделении в заряде



$$T_2 = T_3 = \lambda_{\max} / \mu \cdot T_1 . \quad (4.114)$$

Явное выражение для наибольшей степени повышения давления имеет вид

$$\lambda_{\max} = \frac{\mu}{T_1} \frac{\beta T_0 - \alpha + \sqrt{(\beta T_0 - \alpha)^2 + 4\beta(\alpha T_0 + \gamma / \mu)}}{2\beta} , \quad (4.115)$$

где

$$\alpha = \frac{9.2 \cdot M_{C_2O} + 5.7 \cdot M_{H_2O} + 5.1 \cdot M_{N_2} + 5.5 \cdot M_{O_2}}{M_2} ,$$

$$\beta = (0.8 \cdot M_{CO_2} + 1.2 \cdot M_{H_2O} + 0.4 \cdot M_{N_2} + 0.4 \cdot M_{O_2}) \cdot \frac{10^{-3}}{M_2} ,$$

$$\gamma = \frac{\phi \Delta H}{M_1} + (4.7 + 0.6 \cdot 10^{-3} T_1)(T_1 - T_0) .$$

Приближение (4.113) учитывает отличия состава и свойств рабочего тела на этапах горения при постоянном объеме и давлении: его использование позволяет получать истинные значения величины в предельных случаях $P_2/P_1=1$ и $P_2/P_1 = \lambda_{max}$, а также гладко интерполировать в промежуточной области с весом, пропорциональным удаленности от этих пределов.

Давление газов в конце сгорания, следовательно, в течении фазы горения при постоянном давлении, определяется соотношением

$$P_3 = P_2 = \lambda P_1 . \quad (4.116)$$

Расширение. Степень предварительного расширения вычисляется согласно уравнению

$$\rho = \frac{\mu T_3}{\lambda T_1} . \quad (4.117)$$

В конце расширения рабочее тело характеризуется параметрами:

$$P_4 = P_3 \left(\frac{\rho}{\varepsilon}\right)^n , T_4 = T_3 \left(\frac{\rho}{\varepsilon}\right)^{n-1} , \quad (4.118)$$

где n – показатель политропы на этапе расширения. Его величина определяется при помощи алгоритма, позволяющего достаточно корректно учитывать тепловыделение в химических реакциях (догорание) и потери тепла в стенки КС на этапе расширения рабочего тела (см. рис. 4.46, стадия 3-4). Для этого показатель политропы расширения выбирается из условия согласования величин: теплоты, выделяющейся при догорании топлива $Q_{дог} = (1-\xi)\Delta H/M_A$, радиационно-конвективных потерь тепла рабочим телом в течение стадии 3-4 – $Q_{пот}^{3-4}$, энтальпии газа в точках 3 и 4 цикла – H_3 и H_4 и совершаемой на этом этапе работы $A = n(P_3 V_3 - P_4 V_4)/(n - 1)$. Практический алгоритм вычисления энергетически согласованного показателя политропы заключается в дополнении уравнений (13.77) уравнением первого начала термодинамики для этапа 3-4

$$H_4 - H_3 = Q_{дог} - Q_{пот}^{3-4} - A \quad (4.119)$$

и последующем разрешении совместных уравнений (4.118)-

(4.119) относительно P_4 , T_4 и n . Входящие в (4.119) значения энthalпии вычисляются как функции температуры в предположении, что рабочее тело на этапе 3-4 состоит из продуктов полного сгорания подведенного топлива.

Вообще, допускается произвольно выбирать n из интервала 1.20–1.25. При этом алгоритм вычислений становится явным, однако физическая обоснованность модели и достоверность вычислений снижаются.

Схему расчета параметров рабочего цикла ДВС при помощи уравнений (4.105)-(4.119) удобно представить в виде табл. 4.3.

Независимой переменной функций, собранных в таблице, служит мгновенный объем камеры сгорания V . Связь этой величины с углом поворота коленвала φ задается формулой

$$V = \{(\varepsilon - 1)^{-1} + 1/2 \cdot (1 - \cos \varphi + \theta/2 \cdot \sin^2 \varphi)\} \cdot (\varepsilon - 1) V_{\min}, \quad (4.120)$$

где θ – отношение радиуса кривошипа к длине шатуна.

Величина объема V^* , соответствующая окончанию стадии видимого тепловыделения, равна

$$V^* = \rho V_{\min}, \quad (4.121)$$

а эквивалентный V^* угол φ^* определяется из уравнения (4.120).



Таблица 4.3

Алгоритм расчета индикаторных кривых по методике (4.105)-(4.119)

Обозначение стадии	Начальный объем заря- да	Конечный объем за- ряда	P	T
0 → 1	V_{\max}	$V_{\min} - \Delta V/2$	$P_0(V_{\max}/V)^k$	$T_0(V_{\max}/V)^{k-1}$
1 → 2	$V_{\min} - \Delta V/2$	$V_{\min} + \Delta V/2$	$(P_1 + P_2)/2 + (P_2 - P_1)(V - V_{\min})/\Delta V$	$(T_1 + T_2)/2 + (T_2 - T_1)(V - V_{\min})/\Delta V$
2 → 3	$V_{\min} + \Delta V/2$	V^*	$P_2 = P_3$	$T_2 + (T_3 - T_2) \{ V - (V_{\min} + \Delta V/2) \} / \{ V^* - (V_{\min} + \Delta V/2) \}$
3 → 4	V^*	V_{\max}	$P_3(V_{\max}/V)^n$	$T_3(V_{\min}/V)^{n-1}$

Примечание: В таблице использованы обозначения: V_{\min} и $V_{\max} = \varepsilon V_{\min}$ – объем КС при нахождении поршня в верхней и нижней мертвых точках соответственно; V^* – объем КС в момент окончания видимого тепловыделения; k и n – показатель политропы сжатия и расширения; прочие обозначения соответствуют принятым в технической термодинамике.

Моделирование энергетических показателей. Рассчитываемые параметры рабочего цикла ДВС можно разбить на две группы – интегральные и мгновенные. Интегральные – к ним относятся *среднеиндикаторное давление, мощность, удельный расход топлива* – характеризуют совокупную энергетическую эффективность цикла, а мгновенные – *максимальные давление и температура, а также максимальный темп их нарастания, длительность видимого сгорания* и др. – особенности организации рабочего процесса, ответственные за напряженность эксплуатационного режима. Эти характеристики, в частности, позволяют выбрать оптимальные способы функционирования и управления ДВС в каждом конкретном случае.

Интегральные показатели цикла. При определении энергетических показателей рабочего цикла ДВС в качестве базовой характеристики используется величина среднеиндикаторного давления

$$\langle P \rangle = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi i} P(\varphi) \left[\sin \varphi + \frac{\Theta}{2} \sin 2\varphi \right] d\varphi, \quad (4.122)$$

где $i = 1$ для двухтактного и $i = 2$ для четырехтактного двигателя. Эта величина является интегральной по отношению к мгновенным показателям $P(\varphi)$, вычисляемым непосредственно в рамках кинетической и газодинамической ИММ, поэтому там ее вычисление производится численно после интегрирования соответствующих дифференциальных уравнений. В используемой термодинамической модели значение среднеиндикаторного давления дается формулой

$$\langle P \rangle = \frac{P_2}{\varepsilon - 1} \left\{ \lambda(\rho - 1) + \frac{\lambda\rho}{k-1} \left[1 - \left(\frac{\rho}{\varepsilon} \right)^{k-1} \right] - \frac{1}{n-1} \left(1 - \frac{1}{\varepsilon^{n-1}} \right) \right\} \quad (4.123)$$

На основе $\langle P \rangle$ определяется действительное среднеиндикаторное давление как

$$P_{\text{инд}} = \langle P \rangle \eta, \quad (4.124)$$

где η коэффициент полноты индикаторной диаграммы ($\eta = 0.9 \dots 0.97$).

Индикаторная $N_{\text{инд}}$, эффективная $N_{\text{эфф}}$ мощность двигателя определяются по формулам

$$N_{\text{инд}} = \frac{P_{\text{инд}} V K \Omega}{300 \cdot i}, \quad N_{\text{эфф}} = N_{\text{инд}} \eta_{\text{мех}}, \quad (4.125)$$

где $\eta_{\text{мех}}$ – механический КПД.

Удельный расход топлива $g_{\text{инд}}$ [г/л.с.·ч] определяется по формуле

$$g_{\text{инд}} = 5.36 \cdot 10^6 / (\alpha L_0 P_{\text{инд}}). \quad (4.126)$$

4.15.2 Модель термохимических процессов в ДВС

Моделирование экологических показателей в разработанной КЛР основывается на представлениях термохимии и трехзонной неоднородности топливно-воздушной смеси. Совокупный показатель вредности выхлопных газов – приведенный удельный выброс E (усл. г/кг топл.) вычисляется как взвешенная с учетом относительной агрессивности A_i сумма удельных выбросов e_i (г/кг топл.) химических компонентов

$$E = \sum A_i e_i. \quad (4.127)$$

Использованные в расчетах агрессивности A_i нормированы по CO ($A_{\text{CO}} = 1$) и составляют соответственно: $A_{\text{CH}} = 3.16$, $A_{\text{NOx}} = 41.1$, $A_{\text{SOx}} = 22$, $A_{\text{Pb}} = 22400$, $A_{\text{TC}} = 200-300$ в зависимости от сорта топлива.

Известно, что рассчитываемые в предположении однородности состава, концентрации продуктов сгорания оказываются заниженными. Это касается как продуктов неполного сгорания – CO, C_xH_y , так и побочных продуктов окисления NO_x. Объяснение данного факта видится в том, что выход этих продуктов в реальных ДВС в большей степени определяется неоднородностью топливно-воздушной смеси, нежели гомогенными процессами окисления.

Для проверки этой гипотезы предположение об однородности заряда было заменено на предположение о существовании в нем трех внутренне однородных зон: 1) зоны с номинальным ко-

коэффициентом избытка воздуха $\alpha_1 = \alpha$, в которой сгорает x -я часть топлива ($0 < x < 1$); 2) зоны с коэффициентом избытка воздуха $\alpha_2 = 0.7$, где сгорает $1/2(1-x)$ доля топлива; и 3) зоны с коэффициентом избытка воздуха $\alpha_3 = 2\alpha - 0.7$, где сгорает остаток топлива. Итоговая концентрация i -го компонента в ОГ рассчитывается по формуле

$$\langle c_i \rangle = 1/2(1-x) c_i^{0.7} + x c_i^\alpha + 1/2(1-x) c_i^{2\alpha - 0.7}, \quad (4.128)$$

где верхний индекс при c_i соответствует локальному коэффициенту избытка воздуха. В расчетах для аппроксимации x используется зависимость

$$x = \text{th}(\tau_{\text{ch}} / \tau_{\text{gd}}), \quad (4.129)$$

в которой τ_{ch} и τ_{gd} являются характерными временами химического окисления заряда и газодинамического перемешивания. Внесение описанной коррективы в дипломную разработку значительно улучшило согласие рассчитываемых величин c_i с известными из эксперимента данными.

Определение дымности ОГ в рамках модели производится методом оценки сверху. Суть метода составляют два максимизирующих предположения: 1) вся масса образующихся в КС углерода и серы конденсируется в форме сферических ТЧ одинакового размера; 2) размер этих ТЧ соответствует наибольшей поглощающей способности взвеси в видимой области спектра при заданной массовой доле ТЧ в ОГ. В таких предположениях для коэффициента ослабления света выхлопными газами K справедлива формула

$$K \sim G_{\text{ТЧ}} / 2\lambda = 10^6 G_{\text{ТЧ}} [\text{м}^{-1}], \quad (4.130)$$

где $G_{\text{ТЧ}} = C_{\text{C}} + C_{\text{S}}$ – объемная доля ТЧ в ОГ. Пересчет значения в принятые при экологической диагностике единицы дымности D [%] производится согласно формуле

$$D = [1 - e^{-0.43K}] \cdot 100\%. \quad (4.131)$$

Возможны различные подходы к определению химического состава рабочего тела и, в частности, ОГ. Однако основу любой суб-модели химического равновесия составляют следующие предположения: 1) система реагирующих веществ консервативна; 2) газовая фаза суть идеальна, т.е. ее состояние описывается уравнением Менделеева – Клапейрона; 3) жидкая и твердая фазы представляют собой чистые вещества или идеальные рас-

творы, удельные объемы которых ничтожны по сравнению с удельным объемом газовой фазы; 4) молярные теплоемкости компонентов c_p не зависят от температуры. Методы формирования конкретных суб-моделей термохимии можно разделить на две группы. В первую входят расчетные схемы, основанные на минимизации совокупного изобарно-изотермического потенциала для физико-химической системы с реакциями и фазовыми переходами, а во вторую – алгоритмы решения систем уравнений термодинамического равновесия, материального баланса и состояния (эти уравнения суть следствие уравнений термохимического потенциала типа *Гиббса – Гельмгольца*).

В работе выбран первый подход, основанный на определении химического и в общем случае фазового состава рабочего тела путем решения следующей системы алгебраических уравнений

$$\Phi_i - \frac{\Delta H_i}{T} - R \ln k_i - R \ln \frac{RT}{V} + \sum_{j=1}^J \xi_{ji} \Psi_j = 0, \quad i = 1, \dots, I, \quad (4.132)$$

$$\sum_{i=1}^I \xi_{ji} k_i = b_j, \quad j = 1, \dots, J \quad (4.133)$$

совместно с *уравнением состояния газа*. В уравнениях (4.132)-(4.133) k_i – равновесное количество i -го химического компонента в КС, $k = \sum k_i$; ξ_{ij} – число атомов j -го элемента в i -м компоненте; b_j – молярное содержание j -го элемента в КС; Φ_i и ΔH_i – соответственно приведенная энергия *Гиббса* и теплота образования i -го компонента из простых веществ в стандартных условиях; Ψ_j – множители *Лагранжа*.

При расчете химического состава выхлопных газов в термохимической суб-модели учтены следующие вещества: N_2 , O_2 – основные компоненты воздуха; CO_2 , H_2O – продукты полного сгорания углеводородных топлив; CO , CH_3 , C_2H_4 – продукты неполного сгорания углеводородов; N_2O , NO , N_2O_3 , NO_2 , N_2O_5 – побочные продукты окисления азота в КС; SO , SO_2 , SO_3 – продукты окисления серасодержащих примесей в топливе; твердые частицы (ТЧ) $S_{тв}$ и $S_{тв}$. Входящие в состав бензинов свинецсодержащие антидетонаторы в силу специфики негативного воздействия на окружающую среду непосредственно включаются в состав выхлопа, ми-

ная термохимический расчетный модуль.

Существенным преимуществом данного подхода перед аналогичной однозонной моделью является возможность оценивать концентрации большего числа вредных веществ в выхлопе. Это достигается наличием в ее составе суб-модели для определения концентрационных коридоров в отношении особо опасных углеводородов, образующихся в процессе горения заряда. Поскольку механизмы образования большинства таких веществ не изучены и соответствующие кинетические данные недоступны, оценка граничных значений для их концентраций строится, исходя из оптимальных условий их образования и наилучших/наихудших условий ликвидации при догорании. Учитываемые в расчетах токсичности ОГ вещества, а также используемые термохимические схемы и данные приведены в табл. 4.4.



Таблица 4.4

Исходные данные для термодинамического моделирования состава ОГ
теплового двигателя

Схема реакции: $A+B+C \leftrightarrow D+E+F$	Константа равновесия реакции K_k
$CO + 0.5 O_2 \leftrightarrow CO_2$	$\exp[0.5 \cdot (137/T - 41.4 - 3.2\Delta) / R]$
$C_{1.5}H_{2.5} + 2.125 O_2 \leftrightarrow 1.5 CO_2 + 1.25 H_2O$	$\exp[(256.5/T - 18.6 - 1.03\Delta) / R]$
$C_{ТВ} + O_2 \leftrightarrow CO_2$	$\exp[0.5 \cdot (137.4/T - 41.4 - 3.2\Delta) / R]$
$S_{ТВ} + O_2 \leftrightarrow SO_2$	$\exp[(256.5/T - 18.6 - 1.03\Delta) / R]$
$NO_2 \leftrightarrow 0.5N_2 + O_2$	$\exp[(16.2/T + 28.8 + 3.6\Delta) / R]$

Примечание: в таблице $\Delta = \ln 7/298 - 1 + 298/T$





4.15.2.1 Программная реализация и функционирование компьютерной лабораторной работы по моделированию рабочего процесса в ДВС

Реализующая описанные в предыдущем разделе модели и алгоритмы компьютерная программа составлена на языке Delphi и представляет собой совокупность кодов и данных, показанную на (

Рисунок 0.47)

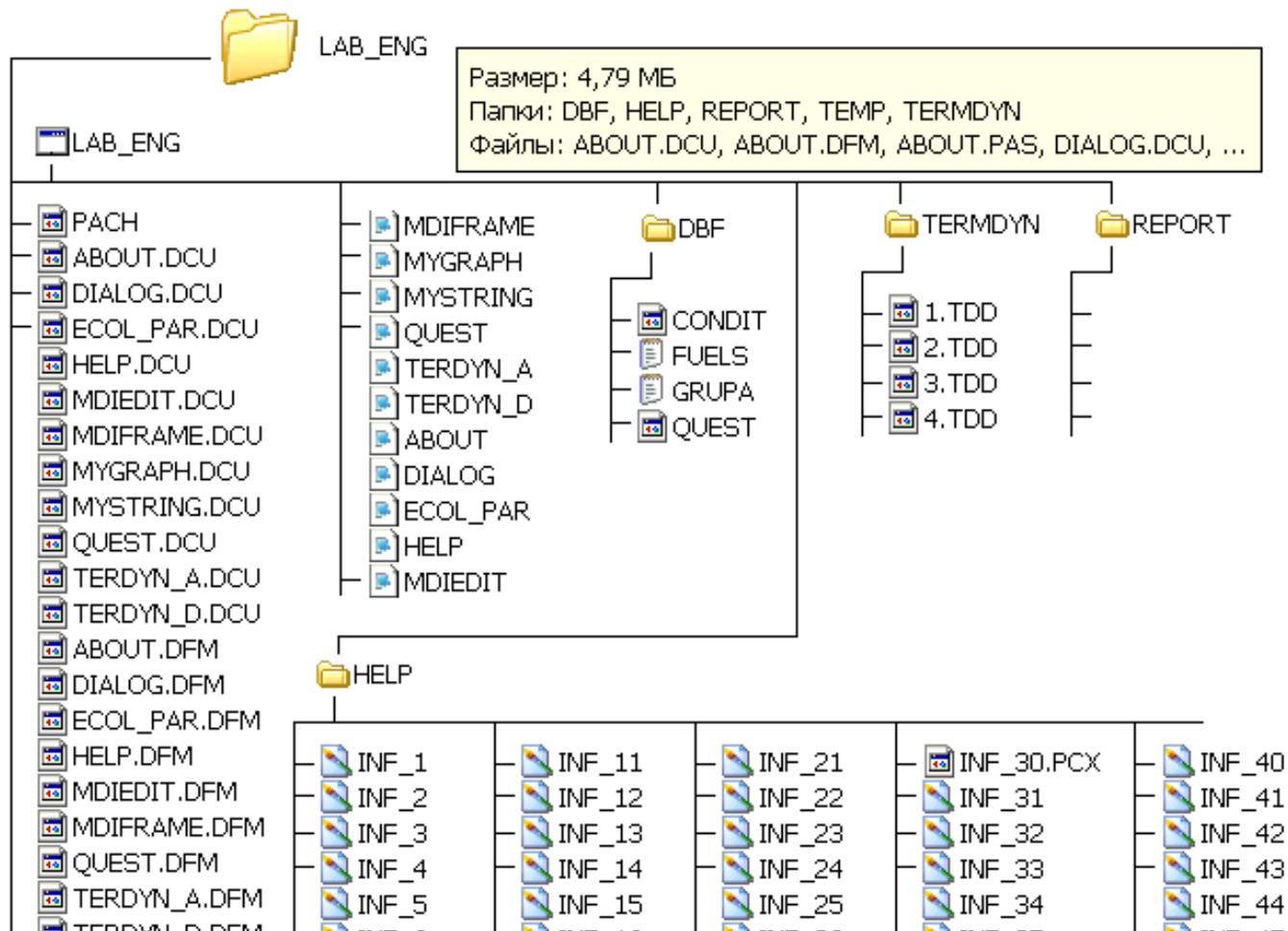


Рисунок 0.47. Структура и состав программной реализации моделей дипломной работы

Особенности интерфейса, регистрационной и справочной подсистем показаны на рис. 4.48–4.51.

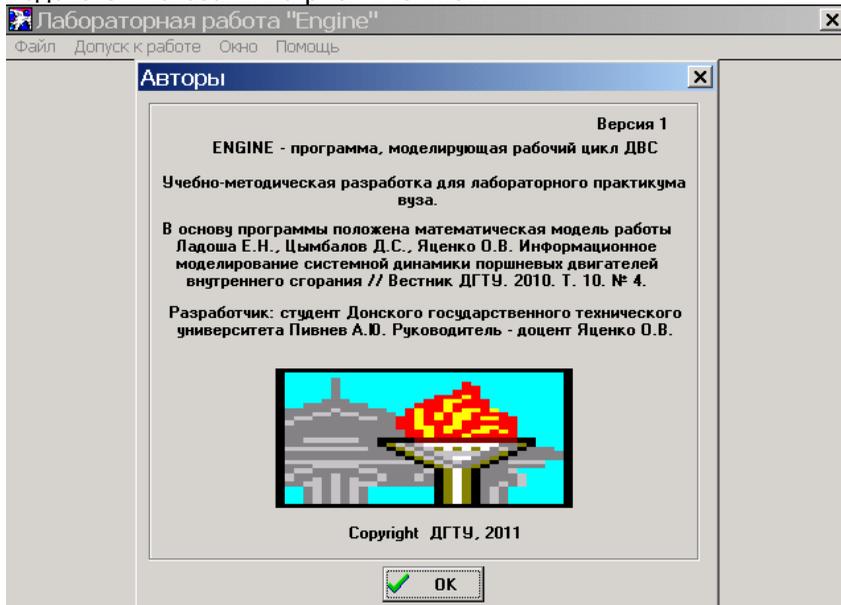


Рисунок 0.48. Вид информационного окна реализованной модели КЛР

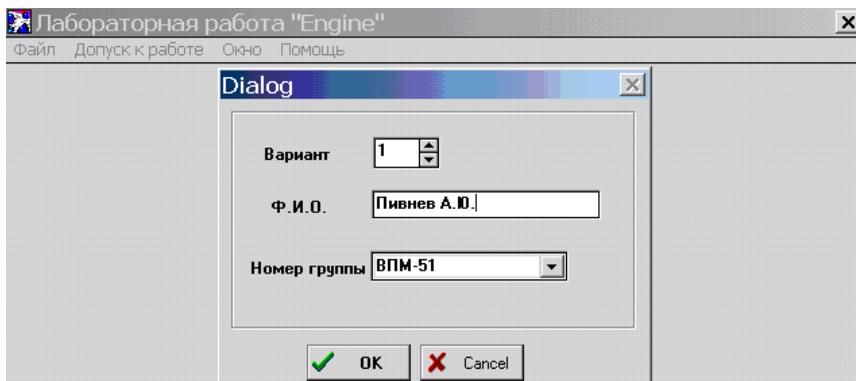


Рисунок 0.49 Вид окна регистрации студента – исполнителя КЛР

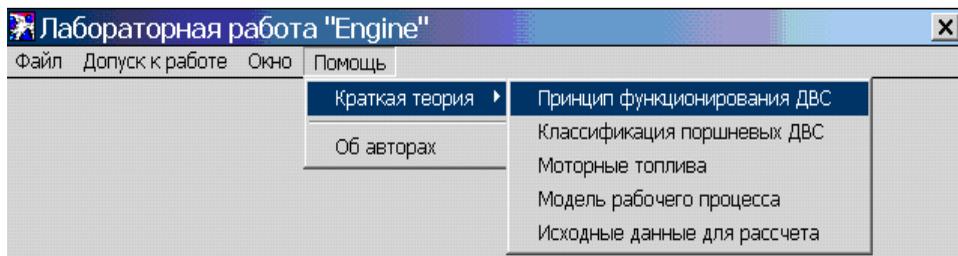


Рисунок 0.50 Структура справочно-информационного модуля

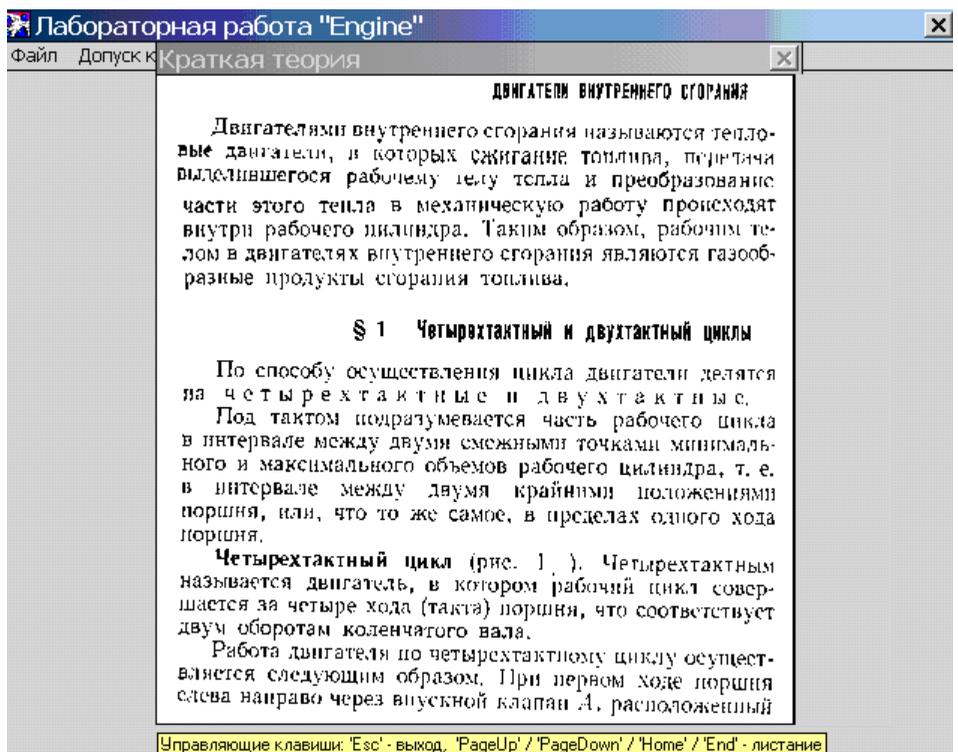


Рисунок 0.51 Пример представления справочной информации в КЛР

Реализация функций тестирования и непосредственно расчетов энергетических и токсических характеристик ДВС показана на (рис. 4.52–4.57). Число зачетных тем и характер вопросов может изменяться преподавателем. Система КЛР *ENGINE* позволяет

в значительной степени автоматизировать динамическую актуализацию контента. От обслуживающего систему преподавателя требуется лишь редактировать содержание соответствующих специализированных файлов и папок согласно технической документации к КЛР.

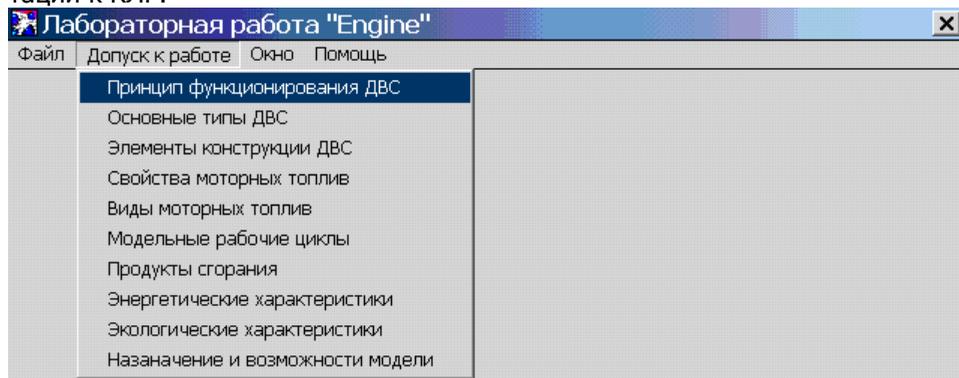


Рисунок 0.52 Содержание тестового модуля КЛР *ENGINE*

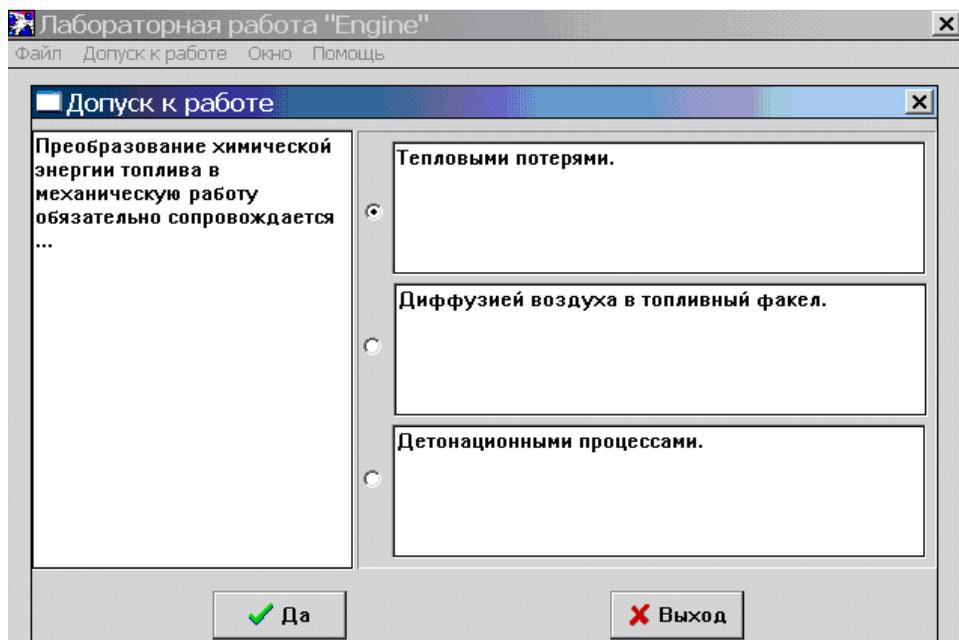
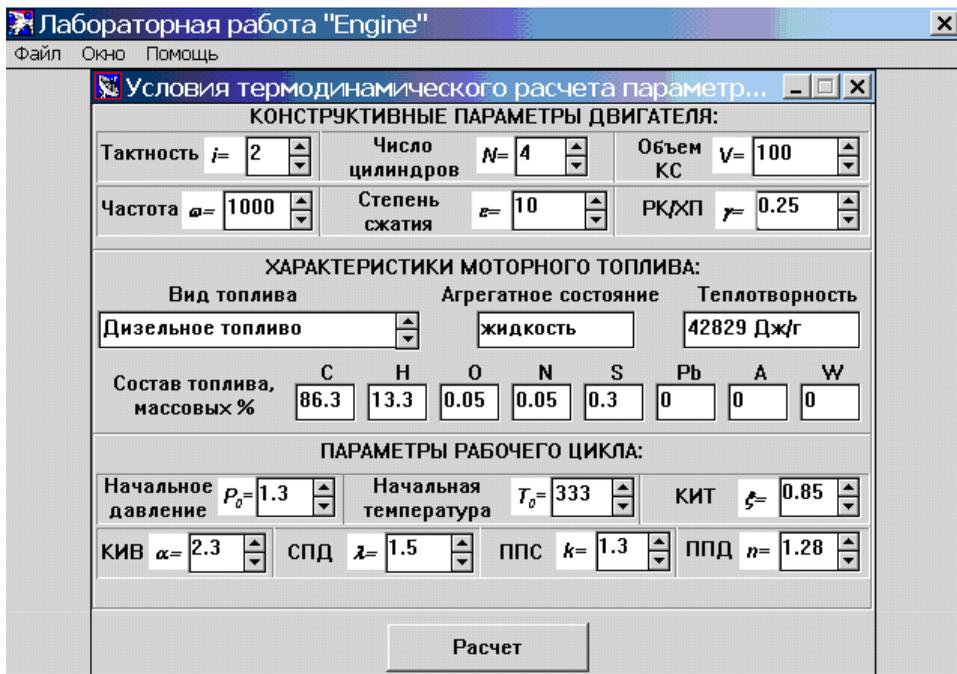


Рисунок 0.53. Вид формы тестирования студентов в процессе функционирования КЛР *ENGINE*



Рисунок 0.54. Окно имитации рабочего процесса ДВС после успешного прохождения тестирования



Условия термодинамического расчета параметр...

КОНСТРУКТИВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ДВИГАТЕЛЯ:

Тактность $i =$	2	Число цилиндров $N =$	4	Объем КС $V =$	100
Частота $\omega =$	1000	Степень сжатия $\varepsilon =$	10	РК/ХП $\gamma =$	0.25

ХАРАКТЕРИСТИКИ МОТОРНОГО ТОПЛИВА:

Вид топлива	Агрегатное состояние	Теплотворность						
Дизельное топливо	жидкость	42829 Дж/г						
Состав топлива, массовых %	C	H	O	N	S	Pb	A	W
	86.3	13.3	0.05	0.05	0.3	0	0	0

ПАРАМЕТРЫ РАБОЧЕГО ЦИКЛА:

Начальное давление $P_0 =$	1.3	Начальная температура $T_0 =$	333	КИТ $\xi =$	0.85		
КИВ $\alpha =$	2.3	СПД $\lambda =$	1.5	ППС $k =$	1.3	ППД $n =$	1.28

Расчет

Рисунок 0.55 - Вид формы с условиями вычислительного эксперимента в КЛР *ENGINE*

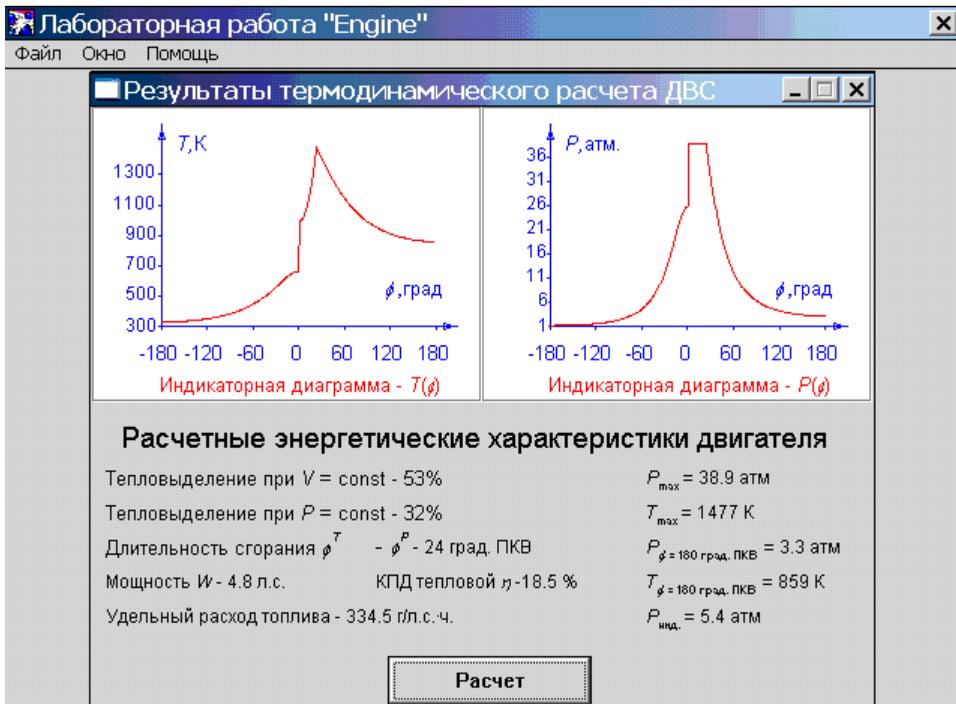


Рисунок 0.56. Результаты теплофизического моделирования в КЛР *ENGINE*

Лабораторная работа "Engine"

Файл Окно Помощь

Расчет экологических характеристик

Вещество	Химическая формула	Содержание вещества в ОГ,
Оксид углерода	CO	0
Углеводороды	C _n H _m	0
Оксиды азота	N _x O _y	0.0009
Оксиды серы	SO _x	0.008
Соединения свинца	PbO, PbCN	
Углекислый газ	CO ₂	6.0694
Водяной пар	H ₂ O	5.6123
Кислород	O ₂	11.5251
Азот	N ₂	76.7842
Углерод сажи	Ств	0
Сера зольная	Ств	0

Отчет

Рисунок 0.57. Результаты термохимического моделирования в КЛР *ENGINE*

На основании выполненных тестируемым действий с различными модулями КЛР формируется итоговый отчет с формальной оценкой по пятибальной системе. Поскольку критерии оценивания предметных знаний студента могут варьироваться преподавателем, в *ENGINE* предусмотрено их редактирование.

Типичный вид отчета показан на (Рисунок 0.57).

Лабораторная работа "Engine" - [Untitled]

Файл Редактирование Свойство Окно Помощь

Группа - ВПМ-51

Ф.И.О - Пивнев А.Ю.

Номер варианта - 1

УСЛОВИЯ РАСЧЕТА

Тактность двигателя: 2

Число цилиндров: 4

Рабочий объем КС одного цилиндра: 100 куб.см.

Частота вращения коленвала: 1000 об./мин.

Степень сжатия: 10

Отношение радиуса кривошипа к длине шатуна: 0.25

Давление во впускном коллекторе: 1.3 атм.

Температура газов в начале сжатия: 333 К

Коэффициент использования теплоты: 0.85

Коэффициент избытка воздуха: 2.3

Степень повышения давления: 1.5

Показатель политропы сжатия: 1.3

Показатель политропы расширения: 1.28

РАСЧЕТНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДВИГАТЕЛЯ

 Тепловыделение при $V = \text{const}$ - 53 %

 Тепловыделение при $P = \text{const}$ - 32%

Длительность сгорания - 24 град. ПКВ

Мощность - 4.8 л.с.

КПД тепловой - 18.5 %

Удельный расход топлива - 334.5 г/л.с.·ч.

 $T_{\text{max}} = 1477 \text{ K}$
 P при $\varphi_i = 180$ град. ПКВ = 3.3 атм

 T при $\varphi_i = 180$ град. ПКВ = 859 К

Ринд. = 5.4 атм

Оценка - 4

Рисунок 0.58. Форма отчета в КЛР ENGINE

Об имитационных возможностях дипломной разработки позволяют судить результаты отладочного вычислительного эксперимента, собранные в табл. 4. Для сравнения в ней выделены жирным шрифтом две колонки: в левой приводятся результаты моделирования термо-физико-химических параметров рабочего тела ДВС в рамках модели однородного заряда. Такая мо-

дель использовалась, в частности, в одной из программ-тренажеров, послуживших прототипами данной КЛР. Сопоставление выделенных векторов (параметров рабочего цикла) в табл. 4.5-4.8 позволяет заключить, что неоднородность топливно-воздушной смеси существенно влияет на токсические характеристики отработавших газов, в то время как силовые параметры хорошо воспроизводятся однозонной моделью.

В табл. 4.5-4.7 приведены результаты выполненных при помощи *ENGINE* расчетов для трех режимов двигателя ВАЗ 2108: скорость вращения коленвала составляет 1000, 2000 и 4000 мин⁻¹, коэффициент избытка воздуха $\alpha = 1$.



Таблица 4.5

Параметры рабочего процесса при $\omega = 1000 \text{ мин}^{-1}$: тактность двигателя – 4; число цилиндров – 4; рабочий объем камеры сгорания, см^3 – 400; степень сжатия – 10; отношение радиуса кривошипа к длине шатуна – 0.25; давление в начале такта сжатия, атм – 1.0; температура в начале такта сжатия, К – 300; диаметр цилиндра, см – 8; ход поршня, см – 8

Коэффициент избытка воздуха α , доля объема ε	1 0.8	0.7, 0.2	1.3, 0.2	Среднее значение
Среднеиндикаторное давление, Атм	5.93	5.91	1.34	5.47
Индикаторная мощность, кВт	16	15.9	3.6	14.8
Угол поворота коленвала при максимальном давлении в КС, град. ПКВ после ВМТ	19	10	5	16.7



Максиальное давлени- е, Атм	59	73	29	57.4
Угол поворота ко- ленвала при макси- мальной скорости нарастания давления в КС, град. ПКВ после ВМТ	16	9	-13	12.4
Макс. скорость нарастания давления в КС, Атм/град. ПКВ	6.95	9.44	0.67	6.57
Угол поворота ко- ленвала при макси- мальной средней температуре заряда, град. ПКВ после ВМТ	25	10	23	23.3
Максимальная сред- няя температура ра- бочего тела, К	2240	2193	925	2103
Угол поворота ко-	16	7	-10	12.5



ленвала при максимальной скорости нарастания температуры заряда, град. ПКВ после ВМТ				
Максимальная скорость нарастания температуры заряда, К/град. ПКВ	290	299	9	263
Доля теплоты цикла, выделившаяся до ВМТ	0.054	0.028	0.23	0.094
Доля теплоты цикла, выделившаяся до момента, когда давление в КС максимально	0.88	0.98	0.33	0.84
Доля теплоты цикла, выделившаяся до момента, температу-	0.99	0.99	0.80	0.97



ра заряда макси- мальна				
----------------------------	--	--	--	--



Таблица 4.6

Параметры рабочего процесса при $\omega = 2000 \text{ мин}^{-1}$

Коэффициент избытка воздуха α , доля объема ε	1 0.8	0.7, 0.2	1.3, 0.2	Среднее значение
Среднеиндикаторное давление, Атм	6.47	5.82	1.31	5.89
Индикаторная мощность, кВт	34	31.4	7.1	31
Угол поворота коленвала при максимальном давлении в КС, град. ПКВ после ВМТ	12	5	4	10.5
Максиальное давление, Атм	69	77	31	66
Угол поворота коленвала при максимальной скорости	-13	2	-11	-11.3



нарастания давления в КС, град. ПКВ после ВМТ				
Макс. скорость нарастания давления в КС, Атм/град. ПКВ	11.8	9.8	8.5	11.3
Угол поворота коленвала при максимальной средней температуре заряда, град. ПКВ после ВМТ	23	6	18	20.8
Максимальная средняя температура рабочего тела, К	2306	2175	942	2157
Угол поворота коленвала при максимальной скорости нарастания температуры заряда, град. ПКВ после ВМТ	-13	2	-11	-11.3



Максимальная скорость нарастания температуры заряда, К/град. ПКВ	373	276	13	327.3
Доля теплоты цикла, выделившаяся до ВМТ	0.089	0.22	0.36	0.13
Доля теплоты цикла, выделившаяся до момента, когда давление в КС максимально	0.82	0.97	0.44	0.80
Доля теплоты цикла, выделившаяся до момента, температура заряда максимальна	0.99	0.98	0.76	0.98

Приведенные в табл. 4.5-4.7 данные удовлетворительно согласуются с известными теоретическими положениями и экспериментальными фактами.

Определенные в рамках моделей КЛР *ENGINE* токсические характеристики рассматриваемого двигателя сведены в табл. 4.4. Следует отметить, что рабочая версия модели позволяет оценивать содержание NO в отработавших газах *с неприемлемо большой погрешностью, и приоритетным направлением ее совершенствования является детализация химического блока, ответственного за кинетику внутрицилиндрового азота.* Кроме того, несмотря на надежность расчетной кинетики угарного газа и углеводородов, необходимо развивать и этот компонент модели для надежного воспроизводства особо токсичных полиароматических соединений CH.



Таблица 4.7

Параметры рабочего процесса при $\omega = 4000 \text{ мин}^{-1}$

Коэффициент избытка воздуха α , доля объема ε	1 0.8	0.7, 0.2	1.3, 0.2	Среднее значение
Среднеиндикаторное давление, Атм	5.86	5.67	1.59	5.41
Индикаторная мощность, кВт	63	61	17	58.2
Угол поворота коленвала при максимальном давлении в КС, град. ПКВ после ВМТ	15	2	5	12.7
Максиальное давление, Атм	68.7	78.4	32.7	66.1
Угол поворота коленвала при максимальной скорости нарастания давления	10	-9	-12	6



в КС, град. ПКВ после ВМТ				
Макс. скорость нарастания давления в КС, Атм/град. ПКВ	5.75	8.09	8.98	8.71
Угол поворота коленвала при максимальной средней температуре заряда, град. ПКВ после ВМТ	15	2	22	14.4
Максимальная средняя температура рабочего тела, К	2265	2135	1009	2126
Угол поворота коленвала при максимальной скорости нарастания температуры заряда, град. ПКВ после ВМТ	10	-9	-12	6
Максимальная ско-	204	225	14	187



рость нарастания температуры заряда, К/град. ПКВ				
Доля теплоты цикла, выделившаяся до ВМТ	0.12	0.59	0.36	0.19
Доля теплоты цикла, выделившаяся до момента, когда давление в КС максимально	0.98	0.97	0.45	0.93
Доля теплоты цикла, выделившаяся до момента, температура заряда максимальна	0.99	0.98	0.85	0.98

Таблица 4.8
Содержание токсичных
компонентов в отработав-
ших газах, отн. ед. или
мольных долей

Частота вращения ко- ленвала, мин- 1, Веще- ство	1000	2000	4000
[C _x H _y]	0.013	0.014	0.013
[CO]	0.0077	0.0076	0.0078
[NO]	0.0099	0.014	0.017

Как пример использования разработки для оценки качества городской воздушной среды приведем на рис. 4.59-4.60 результаты моделирования концентрационного поля выхлопных газов автотранспорта вдоль магистрали с интенсивным движением и сложным рельефом. Из-за отсутствия точных данных о плотности транспортного потока и надежных знаний токсических характеристиках единичного транспортного средства при расчете использовались расчетные (средствами КЛР *ENGINE*) значения для усредненной автотранспортной единицы типа автомобиль ГАЗ-«Газель». Это обстоятельство не сильно снижает ценность приведенных оценок благодаря возможности перенормировать результаты на уточненные параметры токсичности и плотности транспортного потока. В качестве зоны загазованности автотранспортными выхлопами выбирался участок «пл. Гагарина – пл. Ленина» пр-та Нагибина в г. Ростов н/Д. Рассеивание выхлопа проводилось по формулам известной методики ОНД-86. Схема и начальные условия расчетов показаны на рис. 4.59.

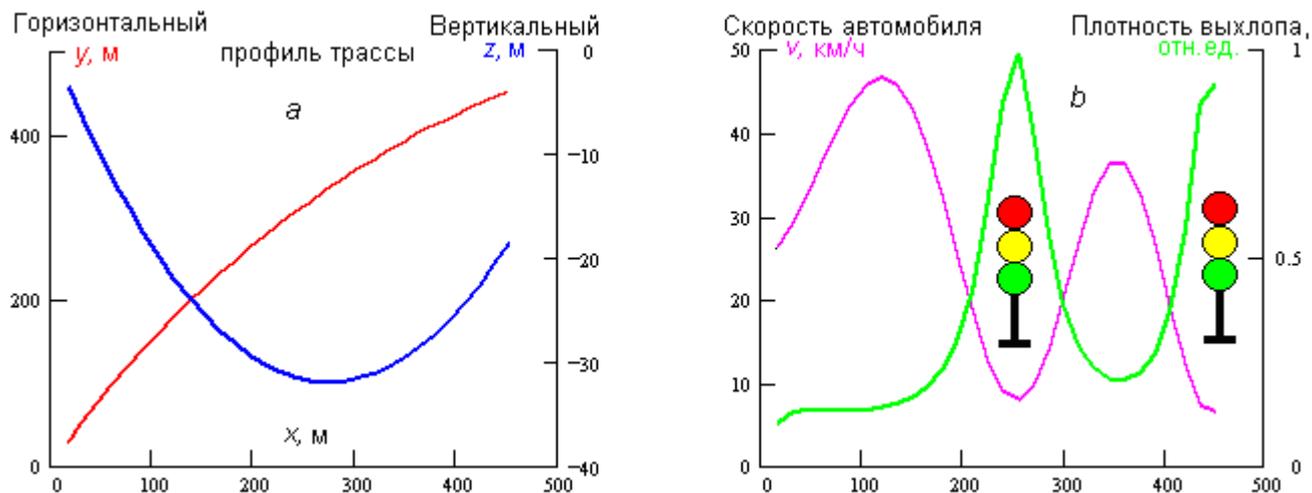


Рис. 4.59. Начальные условия в расчетах рассеивания выхлопных газов автотранспорта

Результаты вычислений, отображенные на рис. 4.60, свидетельствуют о пригодности дипломной разработки для проведения оценки масштаба и уровня загрязнения городской воздушной среды. В застойных зонах (светофоры и углубления рельефа) концентрация токсичных веществ выше, чем на ровной открытой местности, где автомобили движутся без остановки.

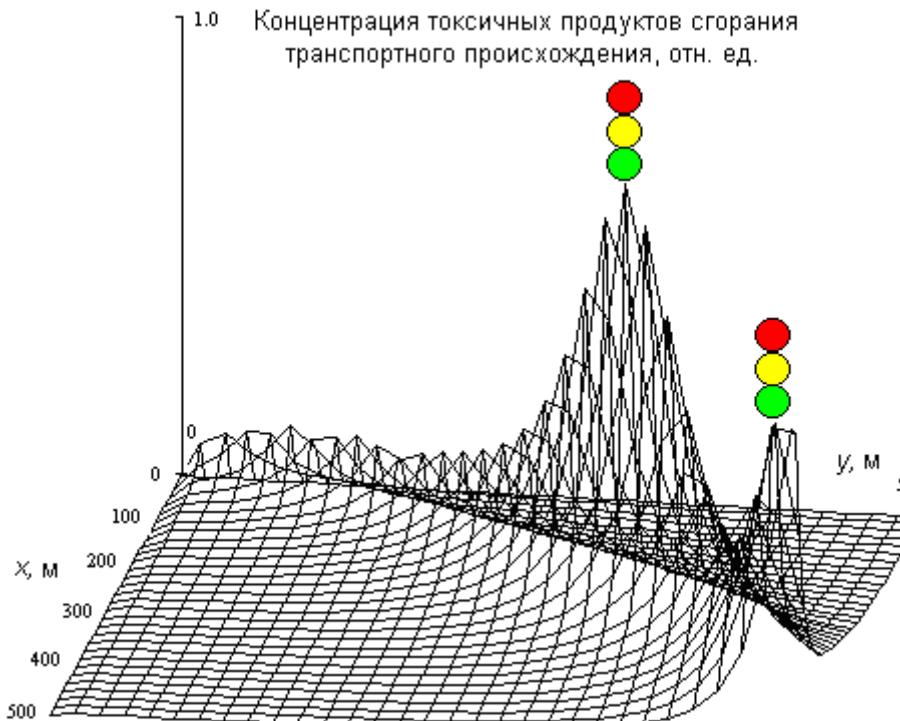


Рис. 4.60. Расчетное поле загазованности токсичным выхлопом автотранспорта на участке «пл. Гагарина – пл. Ленина» пр-та Нагибина в г. Ростов н/Д.

В соответствии с вышеизложенным программная реализация информационных моделей обучения и компьютерной имитации рабочего процесса в ДВС удовлетворяет всем заявленным в дипломной работе целям и требованиям, а наиболее перспективным направлением совершенствования информационных моделей рабочего процесса ДВС в КЛР ENGINE является придание им динамических черт, например, заменяя алгебраические уравнения раздела (3) на соответствующие дифференциальные (эволюционные).

Список первоисточников к параграфу 4.14

1. Яценко О.В., Загароднюк В.Т. Компьютерное моделирова-

- ние задач прикладной физико-химической динамики. – Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ, 2001.
2. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2001.
 3. Моисеев Н.Н. Математические задачи системного анализа. – М.: Наука, 1981.
 4. Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.: Санитарные правила и норма. – М.: Информационно-издательский центр Госкомсанэпиднадзора России, 1996.
 5. Марков В.А., Баширов Р.М., Габитов И.И. Токсичность отработавших газов дизелей. М.: Изд-во МГТУ, 2002. 376 с.
 6. Кульчицкий А.Р. Токсичность автомобильных и тракторных двигателей. М.: Академический проект, 2004. 400 с.
 7. Булыгин Ю.И. и др. Расчет энерго-экологических параметров ДВС / Св-во об официальной рег. ПрЭВМ № 2002610605. М.: РОСПАТЕНТ, 2002.
 8. Жигулин И.Н., Ладоша Е.Н., Яценко О.В. Тепломассообмен в энергетических и транспортных системах. Ростов н/Д: Изд-во РГУПС, 2002. 432 с.
 9. Колчин А.И., Демидов В.П. Расчет автомобильных и тракторных двигателей. М.: ВШ, 2002. 496 с.
 10. Ладоша Е.Н., Яценко О.В., Цымбалов Д.С. Системная имитация динамики поршневого ДВС: фазовые переходы, турбулентность и перенос, химические реакции, теплообмен / Свид. об офиц. регистрации ПрЭВМ № 2009615832. М.: РОСПАТЕНТ, 2009.
 11. Яценко О.В., Ладоша Е.Н., Холодова С.Н., Гирш Д.С. Комплексная оценка токсичности транспортных двигателей внутреннего сгорания: система детальных моделей и результаты вычислительного эксперимента // Изв. вузов. Машиностроение. 2006. № 3. с. 36–46.
 12. Якубовский Ю. Автомобильный транспорт и защита окружающей среды. М.: Транспорт, 1979.
 13. Беднарский В.В. Экологическая безопасность при эксплуатации и ремонте автомобилей. Ростов н/Д: Феникс, 2003.
 14. Зельдович Я.Б., Садовников П.Я., Франк-Каменецкий Д.А. Окисление азота при горении. М.-Л: Изд-во АН СССР, 1947.
 15. Яценко О.В. Информационно-математические модели внутрцилиндровых процессов в поршневом двигателе:

- механизмы, уравнения, термодинамические и кинетические коэффициенты / Св-во об официальной рег. БД № 2004620137. М.: РОСПАТЕНТ, 2004.
16. Бакулин В.Н., Ладоша Е.Н., Потопахин В.А., Яценко О.В. Моделирование кинетики неравновесных физических процессов и реакций в многокомпонентном турбулентном заряде поршневых двигателей внутреннего сгорания // Мат. моделирование. 2007. Т. 19. № 12. С. 81-97.
 17. Ладоша Е.Н., Холодова С.Н., Яценко О.В. Эколого-информационные технологии: компьютерное моделирование токсических характеристик поршневых двигателей внутреннего сгорания (кинетический подход) // Инженерная экология. 2005. № 4. С. 40-51.
 18. Жигулин И.Н., Ладоша Е.Н., Яценко О.В. Теплотехнические расчеты на ПЭВМ. Ростов н/Д: Изд-во РГУПС, 2005. 264 с.
 19. Ладоша Е.Н., Яценко О.В. Расчеты экономичности и токсических характеристик поршневых ДВС на основе детальных моделей внутрицилиндровой кинетики // Обзорение прикл. и промышл. математики. 2006. Т. 13. Вып. 2. С. 332-333.
 20. Ладоша Е.Н., Яценко О.В., Холодова С.Н., Гирш Д.С. Теоретические модели и компьютерные расчеты образования токсичных веществ в тепловых двигателях наземного транспорта // Безопасность жизнедеятельности. 2006. №.8. С. 27-32.
 21. Ладоша Е.Н., Цымбалов Д.С., Яценко О.В. Система моделей, кинетических и термодинамических данных для имитации рабочего процесса ДВС // Обзорение прикл. и промышл. математики. 2008. Т. 15. Вып. 5. С. 897-898.
 22. Ладоша Е.Н., Яценко О.В., Цымбалов Д.С. Согласованные кинетические и термодинамические коэффициенты для детального моделирования горения / Свид. об офиц. регистрации БД № 2009620514. М.: РОСПАТЕНТ, 2009.
 23. Булыгин Ю.И., Давлетшин Р.Ф., Яценко О.В. Математическая модель горения в поршневом двигателе внутреннего сгорания // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Ест. науки. 1995. № 4. С. 19-21.
 24. Булыгин Ю.И., Давлетшин Р.Ф., Яценко О.В. Элементарные химические процессы в поршневых ДВС // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Ест. науки. 1995. № 4. С. 44-54.
 25. Булыгин Ю.И., Давлетшин Р.Ф., Яценко О.В. Моделирование энергетических характеристик тепловозного дизеля // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Ест. науки. 1996. № 1. С. 29-

- 30.
26. Булыгин Ю.И., Давлетшин Р.Ф., Яценко О.В. Образование окислов азота при горении моторных топлив: кинетическая схема и константы реакций // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Ест. науки. 1996. № 2. С. 35-39.

4.16 Тепловой режим двигателя внутреннего сгорания с системой охлаждения

Будем рассматривать задачу, постепенно усложняя модель и тем самым отслеживая роль отдельных элементов в системной тепловой динамика ДВС. Как минимум, в нашей системе имеются три элемента: двигатель с температурой T_d , который отдает в систему тепловой (строго говоря, температурный) поток Q , охлаждающая жидкость (ОЖ) температурой $T_{ж}$, которая обеспечивает перенос тепла к радиатору, а также воздух температурой T_b . Теплообмен происходит в два этапа: 1) двигатель – жидкость, 2) жидкость – воздух). Также он подчиняется закону Ньютона – Рихмана. Коэффициенты теплообмена для первой и второй стадий обозначим $k_{д-ж}$ и $k_{ж-в}$ соответственно, а интегральную теплоемкость двигателя и ОЖ – C_d и $C_{ж}$.

Динамика параметров модели – температуры двигателя и охлаждающей жидкости описываются эволюционными уравнениями:

$$\begin{aligned} \frac{dT_{\text{д}}}{dt} &= -k_{\text{д-ж}} \cdot (T_{\text{д}} - T_{\text{ж}}) + Q, \\ \frac{dT_{\text{ж}}}{dt} &= -k_{\text{ж-в}} \cdot (T_{\text{ж}} - T_{\text{в}}) + k_{\text{д-ж}} \cdot \frac{C_{\text{д}}}{C_{\text{ж}}} (T_{\text{д}} - T_{\text{ж}}). \end{aligned} \quad (4.134)$$

Поскольку эта система второго порядка линейна, можно выписать ее общее решение. Однако оно полезно лишь с теоретической точки зрения, т.к. не выявляет важных для двигателей особенностей тепловой динамики системы охлаждения ДВС.

Полезно найти стационарное состояние системы при $t \rightarrow \infty$. Координаты стационарной точки в фазовом пространстве системы (4.134) равны:

$$T_{\text{л}} = T_{\text{а}} + \frac{Q}{k_{\text{ж-в}}} \cdot \frac{C_{\text{д}}}{C_{\text{ж}}}, \quad T_{\text{д}} = T_{\text{в}} + \frac{Q}{k_{\text{ж-в}}} \cdot \frac{C_{\text{д}}}{C_{\text{ж}}} + \frac{Q}{k_{\text{д-ж}}}. \quad (4.135)$$

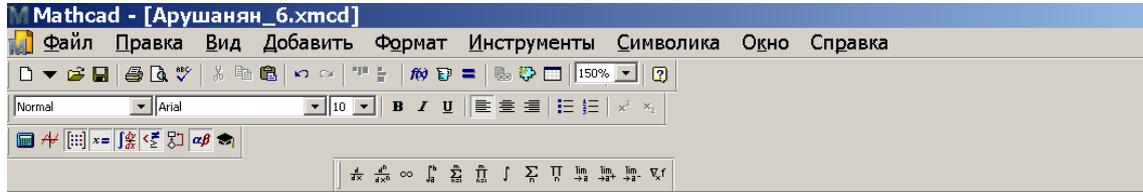
Из (4.135) следует: поддержание необходимого теплового режима ДВС требует высоких коэффициентов теплообмена $k_{\text{д-ж}}$ и $k_{\text{ж-в}}$, а также большой теплоемкости энергоносителя $C_{\text{ж}}$. Хороший теплообмен обеспечивается развитой сетью каналов, призванных увеличить контактные поверхности теплообменников. Высокое значение $C_{\text{ж}}$ обеспечивается использованием в качестве теплоносителя жидкостей на водной основе.

Отметим, что в структуре стационарного решения «заложен» принцип рационального управления тепловым режимом автомобильного ДВС: целесообразна реализация двухуровневого управления – как температурой теплоносителя, так и степенью его использования в СО двигателя.

Температуру ОЖ необходимо поддерживать не выше $T_{\text{ж}}^{\text{max}}$, чтобы выполнялось условие $T_{\text{ж}}^{\text{max}} + Q^{\text{max}}/k_{\text{д-ж}} < T_{\text{д}}^{\text{max}}$, где Q^{max} – максимальная выделяемая тепловая мощность двигателя, $T_{\text{д}}^{\text{max}}$ – предельно допустимая температура ДВС. Практически это условие реализуется установкой дополнительного вентилятора на радиатор (т.н. принудительное внешнее охлаждение), что увеличивает коэффициент теплоотдачи в воздух $k_{\text{ж-в}}$. В математических терминах управление вентилятором радиатора описывается законом:

$$K_{ж-в}(T_{ж}) = k_{ж-в}^{\min} + 1/2 \cdot (k_{ж-в}^{\max} - k_{ж-в}^{\min}) \cdot (1 + \operatorname{th}[(T_{ж} - T_{ж}^{\max})/\Delta T_{ж}]) , \quad (4.136)$$

в котором параметры $k_{ж-в}^{\max} - k_{ж-в}^{\min}$ и $\Delta T_{ж}$ определяют степень и крутизну характеристики в части интенсификации принудительного охлаждения радиатора. Результативность такого управления показана на рис. 4.61-4.62. При выбранных параметрах СО двукратное увеличение нагрузки на двигатель не приведет к перегреву благодаря управлению вентилятором согласно (4.136).



Числовые параметры модели и дополнительные функции

$C_e := 100$ $Q_e := 500$ $k_e := 20$ $t_{final} := 2000$ $NumPoints := 1000$
 $V := 1$ $C_w := 3000$ $k_r := 3$ $T_a := 20$

Given

$$\frac{d}{dt} T_e(t) = \frac{[Q_e - k_e \cdot (T_e(t) - T_i(t))]}{2000} \qquad T_e(0) = 20$$

$$\frac{d}{dt} T_i(t) = -k_r \left[1 + \frac{3}{2} \left[1 + \tanh \left[\frac{(T_i(t) - 86)}{5} \right] \right] \right] \cdot (T_i(t) - T_a) + k_e \cdot \frac{(T_e(t) - T_i(t))}{2} \qquad T_i(0) = 20$$

$$\frac{d}{dt} TT_e(t) = \frac{[Q_e - k_e \cdot (TT_e(t) - TT_i(t))]}{2000} \qquad TT_e(0) = 20$$

$$\frac{d}{dt} TT_i(t) = -k_r \left[1 + \frac{0}{2} \left[1 + \tanh \left[\frac{(TT_i(t) - 86)}{5} \right] \right] \right] \cdot (TT_i(t) - T_a) + k_e \cdot \frac{(TT_e(t) - TT_i(t))}{2} \qquad TT_i(0) = 20$$

$$\begin{pmatrix} T_e_Comp \\ T_i_Comp \\ TT_e_Comp \\ TT_i_Comp \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left[\begin{pmatrix} T_e \\ T_i \\ TT_e \\ TT_i \end{pmatrix}, t, t_{final}, NumPoints \right]$$



Рис. 4.61. Программная реализация модели теплообмена ДВС с управляемым
согласно (4.136) блоком охлаждения

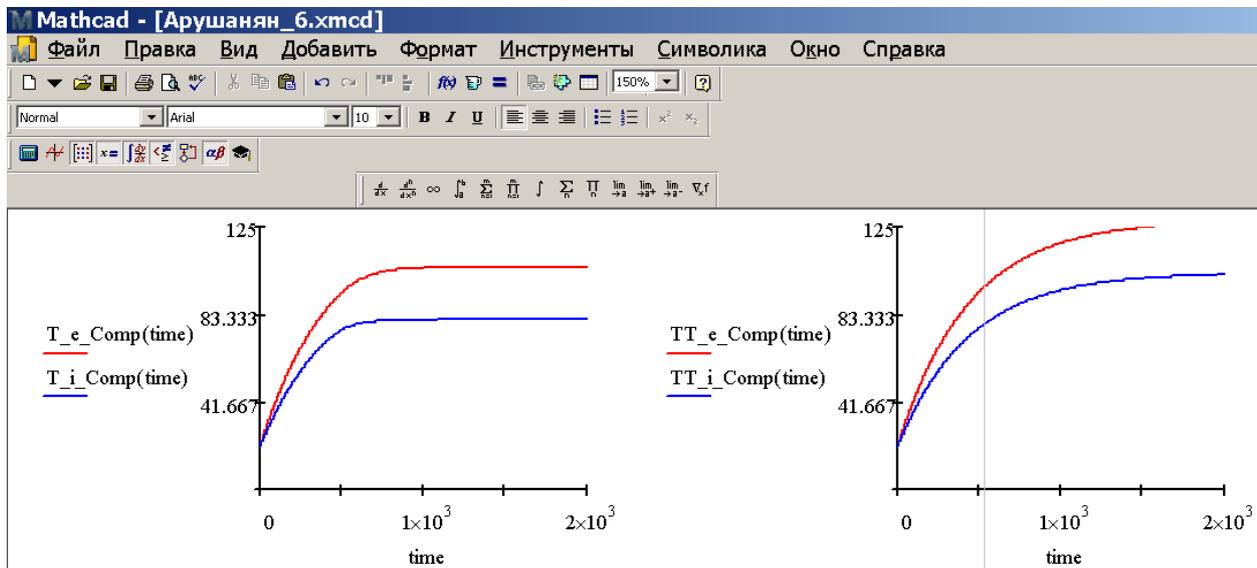


Рис. 4.62. Тепловая динамика ДВС в результате управления вентилятором радиатора по закону (4.136): левый фрагмент – температура ДВС и охлаждающей жидкости при управлении СО согласно (4.136), правый фрагмент – то же, но без управления. Красные кривые – температура ДВС, синие – температура ОЖ

При малых нагрузках обеспечивать рабочую температуру двигателя позволяет управление циркуляцией ОЖ. Оно реализуется посредством расщепления контура с ОЖ на два параллельных – один проходит через радиатор, второй – минуя радиатор, возвращается в двигатель. За распределение ОЖ по контурам отвечает термостат: чем выше Q и/или температура окружающего воздуха T_b , тем большая часть ОЖ пускается через радиатор.

Учет двухконтурности СО и термостата в модели сводится к модификации коэффициента теплоотдачи от двигателя к ОЖ. Выбирая удобную для численных интеграторов аппроксимацию $k_{д-ж}(T_d)$ высокой гладкости, получаем:

$$k_{д-ж}(T_d) = 1/2 \cdot k_{д-ж}^{\max} \cdot (1 + \operatorname{th}[(T_d - T_d^{\max})/\Delta T_d]) . \quad (4.137)$$

Прогрев двигателя в этой модели ускоряется (см. код программы и результаты расчетов на рис. 4.63-4.64): время прогрева сократилось вдвое; при этом ОЖ остается холодной.



Mathcad - [Арушанян_7.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 B I U

Числовые параметры модели и дополнительные функции

$C_e := 100$ $Q_e := 500$ $k_e := 20$ $t_final := 500$ $NumPoints := 1000$
 $V_w := 1$ $C_w := 3000$ $k_r := 3$ $T_a := 20$

Given

$$\frac{d}{dt} T_e(t) = \frac{Q_e - k_e \cdot (T_e(t) - T_i(t))}{2000}$$

$$T_e(0) = 20$$

$$\frac{d}{dt} T_i(t) = -k_r \left[1 + \frac{3}{2} \left[1 + \tanh \left[\frac{(T_i(t) - 86)}{5} \right] \right] \right] \cdot (T_i(t) - T_a) + k_e \cdot \frac{(T_e(t) - T_i(t))}{2}$$

$$T_i(0) = 20$$

$$\frac{d}{dt} TT_e(t) = \frac{Q_e - k_e \cdot \left[0.5 \left[1 + \tanh \left[\frac{(TT_e(t) - 92)}{5} \right] \right] \right] \cdot (TT_e(t) - TT_i(t))}{2000}$$

$$TT_e(0) = 20$$

$$\frac{d}{dt} TT_i(t) = -k_r \left[1 + \frac{3}{2} \left[1 + \tanh \left[\frac{(TT_i(t) - 86)}{5} \right] \right] \right] \cdot (TT_i(t) - T_a) + k_e \cdot 0.5 \left[1 + \tanh \left[\frac{(TT_e(t) - 92)}{5} \right] \right] \cdot \frac{(TT_e(t) - TT_i(t))}{2}$$

$$TT_i(0) = 20$$

$$\begin{pmatrix} T_e_Comp \\ T_i_Comp \\ TT_e_Comp \\ TT_i_Comp \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left(\begin{pmatrix} T_e \\ T_i \\ TT_e \\ TT_i \end{pmatrix}, t, t_final, NumPoints \right)$$



Рис. 4.63. Программная реализация модели двухконтурного теплообмена ДВС с управляемым согласно (4.136) блоком охлаждения и термостатом

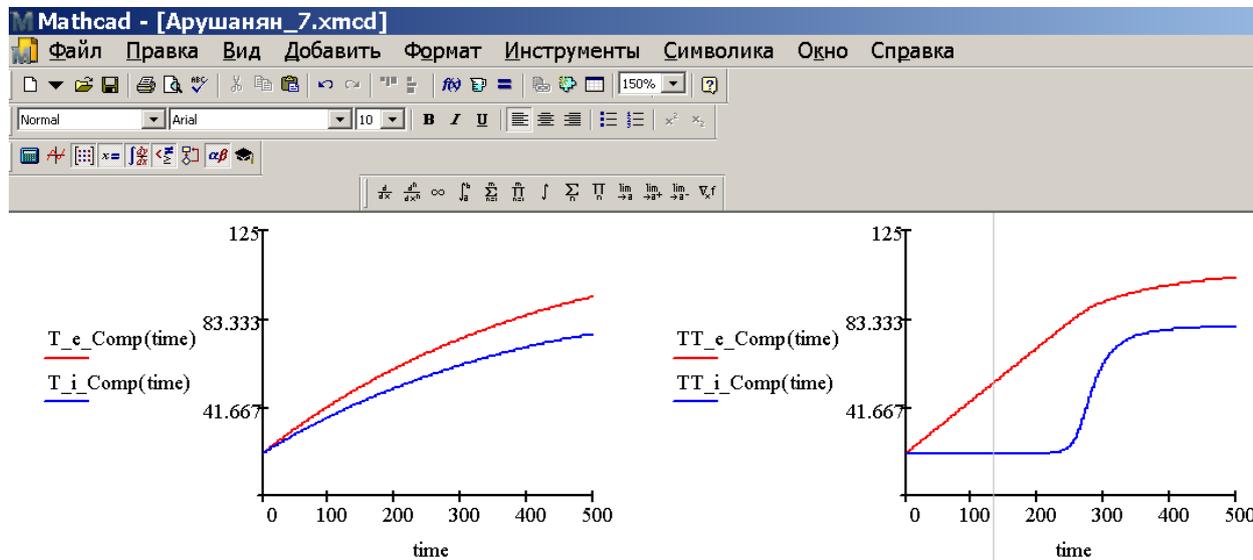


Рис. 4.64. Тепловая динамика ДВС с двухконтурным теплообменом и управлением согласно (4.136): левый фрагмент – термостат изъят из системы; правый фрагмент – в системе термостат на 92 °С. Красная кривая – температура ДВС, синяя – температура ОЖ

В тепловой динамике ДВС интересен перегрев, обусловленный вследствие вскипанием ОЖ. При ее вскипании коэффициенты теплоотдачи $k_{ж-в}$ и $k_{д-ж}$ стремятся к нулю, а двигатель перегревается в обостренном режиме. Такой режим плохо интегрируется любыми системами. Вскипание жидкости в системе охлаждения ДВС описывается уравнениями:

$$k_{ж-в}(T_{ж}) = \{k_{ж-в}^{\min} + 1/2 \cdot (k_{ж-в}^{\max} - k_{ж-в}^{\min}) \cdot (1 + \operatorname{th}[(T_{ж} - T_{ж}^{\max})/\Delta T_{ж}])\} \times \{1 - \operatorname{th}[T_{ж} - T_{ж}^{\text{исп}}]\} / 2, \quad (4.138)$$

$$k_{д-ж}(T_{д}) = 1/2 \cdot k_{д-ж}^{\max} \cdot (1 + \operatorname{th}[(T_{д} - T_{д}^{\max})/\Delta T_{д}]) \cdot \{1 - \operatorname{th}[T_{ж} - T_{ж}^{\text{исп}}]\} / 2. \quad (4.139)$$

На рис. 4.65-4.66 приведены программная реализация модели (4.138)-(4.139) и результаты компьютерного эксперимента, имитирующего перегрев ДВС вследствие критического эффекта – вскипания жидкости и, как следствие, существенного ухудшения условий теплообмена в СО.

Эти данные свидетельствуют, что рассматриваемый критический эффект проявляется в положительной обратной связи и приводит к взрывному перегреву системы. При возникновении эффекта форсирование штатных инструментов системы становится бесполезным.



Mathcad - [Арушанян_8.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Anal 10 B I U

Числовые параметры модели и дополнительные функции

Given

$$C_e := 100 \quad Q_e := 750 \quad k_e := 20 \quad t_{final} := 1000 \quad \text{NumPoints} := 1000$$

$$V := 1 \quad C_w := 3000 \quad k_r := 3 \quad T_a := 70$$

$$\frac{dT_e(t)}{dt} = \frac{[Q_e - k_e \cdot (T_e(t) - T_i(t))]}{2000} \quad T_e(0) = 70$$

$$\frac{dT_i(t)}{dt} = -k_r \cdot \left[1 + \frac{3}{2} \cdot \left[1 + \tanh \left[\frac{(T_i(t) - 86)}{5} \right] \right] \right] \cdot (T_i(t) - T_a) + k_e \cdot \frac{(T_e(t) - T_i(t))}{2} \quad T_i(0) = 70$$

$$\frac{dT_{T_e}(t)}{dt} = \frac{Q_e - k_e \cdot \left[0.5 \cdot \left[1 + \tanh \left[\frac{(T_{T_e}(t) - 92)}{5} \right] \right] \right] \cdot (T_{T_e}(t) - T_{T_i}(t)) \cdot \frac{1 - \tanh \left[\frac{(T_{T_i}(t) - 100)}{5} \right]}{2}}{2000} \quad T_{T_e}(0) = 70$$

$$\quad T_{T_i}(0) = 70$$

$$\frac{dT_{T_i}(t)}{dt} = -k_r \cdot \left[1 + \frac{3}{2} \cdot \left[1 + \tanh \left[\frac{(T_{T_i}(t) - 86)}{5} \right] \right] \right] \cdot (T_{T_i}(t) - T_a) \cdot \frac{1 - \tanh \left[\frac{(T_{T_i}(t) - 100)}{5} \right]}{2} + k_e \cdot 0.5 \cdot \frac{1 - \tanh \left[\frac{(T_{T_i}(t) - 100)}{5} \right]}{2}$$

$$\begin{pmatrix} T_{e_Comp} \\ T_{i_Comp} \\ T_{T_e_Comp} \\ T_{T_i_Comp} \end{pmatrix} := \text{Odesolve} \left[\begin{pmatrix} T_e \\ T_i \\ T_{T_e} \\ T_{T_i} \end{pmatrix}, t, t_{final}, \text{NumPoints} \right]$$

Рис. 4.65. Реализация модели перегрева ДВС и СО вследствие критического эффекта – вскипания ОЖ согласно модели (4.134), (4.136)-(4.139) в MathCAD

Выводы по разделу

Математическое исследование моделей теплообмена в элементах и системе охлаждения двигателем выявило следующие факты:

- теплоотдача элементов описывается обыкновенными дифференциальными уравнениями, а процессы теплопроводности – УЧП;
- оба типа уравнений и представительные модели элементов исследованы аналитически и конечно-разностными методами;
- процессы в СО автомобиля описываются системами дифференциальных уравнений, порядок которых зависит от факторного и пространственно-временного разрешения модели;
- даже простейшая модель СО позволяет делать содержательные выводы касательно выбора параметров элементов, способов управления, прогнозировать аварийные режимы.

Список первоисточников к параграфу 4.16

27. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2001.
28. Зарубин В.С. Математическое моделирование в технике: Учеб. для вузов / Под ред. В.С. Зарубина, А.П. Крищенко. - 2-е изд., стереотип. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003.

ГЛАВА 5. ПРАКТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

В этой главе рассматривается применение математического моделирования в проектировании электрических и электронных компонентов двух широко употребляемых технических объектов.

5.1 Моделирование зарядного устройства для автомобильных аккумуляторов

Техническое обслуживание – комплекс стратегий по защите технических систем, направленных на снижение тяжести последствий или предотвращение отказов.

Практически техническое обслуживание объединяет мероприятия профилактического характера, проводимые систематически через установленные периоды, включающие определённый комплекс работ по поддержанию необходимого уровня технического состояния оборудования. подразделяются на техническое обслуживание (ТО), ремонт, модернизацию и замену. ТО подразделяется на регламентированное и нерегламентированное.

Регламентированное ТО включает в себя работы, выполняемые в соответствии с технической документацией в обязательном порядке после определенного пробега, наработки или временного интервала по заранее утвержденному регламенту. К таким работам обычно относятся: замена смазки в агрегатах, замена некоторых ответственных быстро изнашиваемых и легкозаменяемых механических деталей, испытания сосудов и грузоподъемных механизмов, регулировка и наладка ответственных рабочих машин, периодическое техническое обслуживание по специальному графику и регламенту электрооборудования и т.п.

Работы по регламентированному ТО обычно сопровождаются остановкой рабочих машин и проводятся по специальному графику. Нерегламентированное ТО включает в себя работы по очистке, обтяжке, регулировке, добавлению смазки, замене быстро изнашиваемых и легкозаменяемых деталей, испытание и приведение в соответствие техническим требованиями электрооборудования и пр. Потребность в ТО выявляется при проведении периодических осмотров, мониторинга технического состояния с помощью диагностических систем и средств технической диагно-

стики. Устраняются проблемы функционирования оборудования обычно во время технологических перерывов без остановки или с кратковременной остановкой рабочего процесса.

ТО электрооборудования характеризуется рядом особенностей и требует правильной организации и своевременного проведения. Основной задачей ТО электрооборудования является поддержание его в работоспособном состоянии. Работы по ТО проводят на месте установки электрооборудования.

Техническое обслуживание электрооборудования подразделяют на производственное и плановое. Производственное ТО включает в себя эксплуатационное обслуживание, которое проводится персоналом, обслуживающим электрифицированные рабочие машины и механизмы, и дежурное обслуживание, выполняемое дежурными электромонтерами. При плановом ТО электрооборудование очищают, проверяют, регулируют, смазывают и/или заменяют недолговечные легкоъемные детали.

Практически ТО электрооборудования является профилактическим мероприятием, направленным на обеспечение работоспособности и предупреждение неисправностей. При обнаружении неисправностей, устранение которых требует разборки электрооборудования и/или применения специального оборудования, решается вопрос о необходимости проведения ремонта.

При ТО электрооборудования персонал сталкивается с необходимостью поиска неисправностей для определения причин отказов и восстановления работоспособности. Поиск неисправностей простого электрооборудования не вызывает особых трудностей. Для выявления причин неисправности сложного электрооборудования и сложных электрических схем рекомендуется составлять алгоритмы поиска, в которых указывается наиболее рациональная последовательность выполнения операций. Эта последовательность обеспечивает минимальные затраты времени и средств для проведения поиска.

Для поиска неисправностей наиболее распространены способы последовательного функционального анализа, половинного разбиения и вероятностно-временной.

Способ последовательного функционального анализа основан на определении основных функций контролируемого электрооборудования или схемы. Путем проверки функциональных параметров отыскивают отклонения и устанавливают отказавший элемент. Этот способ достаточно прост, нагляден, однако последовательность поиска неисправности не оптимальна.

Для электрооборудования с последовательным соедине-

нием элементов часто применяют способ половинного разбиения. Согласно этому способу вначале определяют элемент, разделяющий объект контроля примерно на две части, вероятности возникновения отказа которых примерно одинаковы. Затем в неисправной половине объекта вновь находят элемент, разделяющий эту половину на части с одинаковой вероятностью возникновения отказа. Такие операции проводят до тех пор, пока не обнаружат неисправный элемент.

Если функциональные элементы сложного объекта или схемы соединены произвольно, обычно применяют вероятностно-временной способ поиска неисправностей, информативной основой этого способа являются данные о вероятности отказов или безотказной работы элементов и затрачиваемое на их проверку время. Иногда используется отношение времени проверки элемента к вероятности его отказа или отношение вероятности безотказной работы к времени проверки.

Для проведения поиска по структурной или электрической схеме электрооборудования строят функциональную модель, а затем составляют матрицу неисправностей. В верхней части матрицы обычно помещают перечень всех основных признаков неисправностей, а в строках – перечень причин отказов или отказавших элементов, изменение состояния которых может вызвать признаки неисправностей. Для элементов определяют время, затрачиваемое на проверку технического состояния, и вероятность отказа или безотказной работы. Последовательность проверки элементов в соответствии с вероятностно-временным способом поиска неисправностей устанавливается по возрастанию отношения времени, затрачиваемого на проверку технического состояния элемента, к вероятности отказа этого элемента или по уменьшению отношения вероятности безотказной работы элемента к времени, затрачиваемому на его проверку. Поиск неисправности начинается с проверки элемента, имеющего наименьшее отношение времени проверки к вероятности отказа или имеющего наибольшее отношение вероятности безотказной работы к времени проверки, и продолжается до тех пор, пока не будет найден отказавший элемент. Построенная таким образом программа ТО и/или ремонта обеспечивает минимальные затраты времени на поиск неисправности.

Основной задачей ТО автомобиля является поддержание его в надлежащем внешнем виде и технически исправном состоянии. Основным отличием технического обслуживания от ремонта является то, что оно является профилактическим мероприятием.

Что касается ремонта, то он выполняется при возникновении такой необходимости, т.е. когда явно обозначилась какая-либо неисправность или поломка, затрудняющая либо исключаящая возможность эксплуатации транспортного средства.

ТО автомобиля включает в себя следующие виды работ:

- смазочные;
- регулирующие;
- контрольно-диагностические;
- крепежные;
- заправочные;
- электротехнические.

Помимо перечисленных, при проведении технического обслуживания современного автомобиля могут выполняться и иные виды работ – в зависимости от марки машины, ее состояния, и иных специфических факторов. Отметим, что при техническом обслуживании не обязательно выполняются сразу все перечисленные виды работ — все определяется текущей необходимостью, условиями эксплуатации и рекомендациями завода-изготовителя.

В зависимости от периодичности выполнения работ, их количеству, сложности и трудоемкости существуют следующие виды технического обслуживания автомобилей:

- ежедневное(ТО);
- первое(ТО-1);
- второе(ТО-2);
- сезонное (СО).

Задача ежедневного технического обслуживания заключается в том, чтобы поддерживать автомобиль в надлежащем внешнем виде, отслеживать его заправку топливом, маслом, иными расходными материалами, а также контролировать обеспечение безопасности дорожного движения. Каждый раз перед поездкой водитель должен проверить:

- комплектность автомобиля;
- состояние его кузова;
- наличие и регулировку зеркал заднего вида;
- наличие и читаемость государственных регистрационных номерных знаков;
- исправность дверных замков, а также замков капота и багажника;
- исправность электрооборудования («дворники», приборы освещения и сигнализации);
- герметичность систем питания, смазки и охлаждения и

наличие соответствующих расходных жидкостей;

- герметичность гидравлического привода тормозной системы;

- свободный ход рулевого колеса;

- работу контрольно-измерительных приборов.

Если автомобиль попал в дорожно-транспортное происшествие, например, по причине нарушения герметичности гидравлического привода тормозов либо иной неисправности, которая должна быть обнаружена при проверке перед поездкой – водитель признается виновником ДТП, со всеми вытекающими последствиями.

Первое и второе техническое обслуживание (соответственно ТО-1 и ТО-2) подразумевают выполнение крепежных, очистительных, смазочных, контрольно-диагностических и регулировочных работ. Их необходимо выполнять через определенный пробег автомобиля, в соответствии с указаниями, имеющимися в руководстве по эксплуатации. Кроме этого, важным фактором, влияющим на периодичность выполнения ТО-1 и ТО-2, являются условия эксплуатации автомобиля: тот же воздушный фильтр при езде по пыльным грунтовым дорогам следует менять чаще, чем при езде по качественному асфальтовому покрытию.

Что касается сезонного технического обслуживания, то оно выполняется два раза в год, чтобы подготовить автомобиль к эксплуатации в холодное и в теплое время года. Например, частью СО является «переобувание» автомобиля в зимнюю резину – перед наступлением холодного времени года, и в летнюю – по окончании зимнего сезона. В некоторых российских регионах (как правило, северных) вместо летнего моторного масла заливают зимнее, в преддверии зимы многие водители выполняют антикоррозийную обработку кузова, и т.д.

Автомобильный аккумулятор является, с одной стороны, важнейшим элементом электрооборудования автомобиля, а с другой – ключевым элементом, обеспечивающим автономность функционирования автомобиля как системы. Поэтому разработка средств и методик обеспечения нормального долгосрочного функционирования аккумуляторной батареи и является актуальной технической задачей.

В соответствии с вышесказанным целью данного проекта выбрана разработка устройства для зарядки аккумулятора в гаражных и/или домашних условиях, т.е. без использования автомобильного генератора.

Достижение поставленной цели осуществлялось посред-

ством решения следующих задач:

-изучения известных методов и средств заряда аккумуляторной батареи, их преимуществ и недостатков;

-выбора наиболее простых и одновременно надежных конструкций зарядного устройства для автомобильной аккумуляторной батареи, способных обеспечить ее долгосрочное безотказное функционирование;

-параметрического расчета и практической реализации выбранных электрических схем зарядного устройства, при необходимости – их доработки и адаптации к условиям широкой промышленной и бытовой эксплуатации;

-практического испытания разработки в составе оборудования для ТО легкового автомобиля;

-определения перспективных направлений совершенствования разработки.

Результат дипломной работы, полученный путем решения поставленных задач, следующий:

- проанализированы электрические схемы различных устройств для заряда автомобильного аккумулятора;
- выбраны, доработаны и практически реализованы две конструкции, требующие минимального числа деталей при обеспечении надлежащей функциональности;
- успешно проведены испытания обеих разработок, указаны перспективные направления их совершенствования.

Список первоисточников к параграфу 5.1

- 1 *Дьячков Ю.А.* Моделирование систем автомобилестроения: Учебное пособие. Пенза : Изд-во ПГУ, 2009.
- 2 Техническое обслуживание и ремонт:
[https://ru.wikipedia.org/wiki/Техническое_обслуживание_и_ремонт.](https://ru.wikipedia.org/wiki/Техническое_обслуживание_и_ремонт)
- 3 Техническое обслуживание электрооборудования:
[http://diplomka.net/publ/tekhnicheskoe_obslužhivanie_ehлектроoborudovanija/6-1-0-312.](http://diplomka.net/publ/tekhnicheskoe_obslužhivanie_ehлектроoborudovanija/6-1-0-312)
- 4 Техническое обслуживание автомобиля:
<https://www.gazu.ru/car/autoservice/10169>
- 5 Автомобильный аккумулятор: <https://ru.wikipedia.org/wiki/>

Автомобильный_аккумулятор.

- 6 Зарядное устройство из блока питания компьютера:
<http://diodnik.com/zaryadnoe-ustrojstvo-iz-bloka-pitaniya-kompyutera>.

5.2 Техническое обслуживание автомобильного аккумулятора: схемные решения и функционирование зарядных устройств

Последовательно рассмотрим особенности автомобильных аккумуляторов и их ТО, а затем – экспертный анализ (журнал «За рулем») лучших зарядных устройств.

5.2.1 Особенности эксплуатации и обслуживания автомобильных аккумуляторов

Автомобильный аккумулятор используется в качестве вспомогательного источника электроэнергии в бортовой сети при неработающем двигателе и для запуска двигателя. На малотоннажных грузовиках, микроавтобусах и легковых автомобилях с дизельными двигателями используются аккумуляторы с электрическим напряжением 12 вольт.

Напряжение без нагрузки (напряжение при снятых клеммах) аккумулятора можно связать с примерным уровнем заряда. Если аккумулятор находится на транспортном средстве, «напряжение без нагрузки» измеряется, когда двигатель остановлен, а нагрузка полностью отключена (сняты клеммы).

Степень заряженности оценивают на отключенном от нагрузки аккумуляторе, не менее, чем через 6 часов покоя, и при комнатной температуре. В случае температуры, отличной от комнатной, вносится температурная поправка. В среднем считается, что падение температуры на 1 °С от комнатной снижает ёмкость примерно на 1 %, таким образом при –30 °С ёмкость автомобильной АКБ будет равна примерно половине от ёмкости при +20 °С.



Напряжение без нагрузки при 26,7 °С	При- мерный заряд	Плотность электро- лита при 26,7 °С
12,65 В	100 %	1,265 г/см ³
12,35 В	75 %	1,225 г/см ³
12,10 В	50 %	1,190 г/см ³
11,95 В	25 %	1,155 г/см ³
11,70 В	0 %	1,120 г/см ³

Напряжение без нагрузки также зависит от температуры и от плотности электролита при полном заряде. Следует заметить, что плотность электролита при одном и том же уровне заряда в свою очередь также зависит от температуры (обратная зависимость).

Ёмкость аккумулятора измеряется в ампер-часах. Применительно к маркировке аккумулятора, значение ёмкости показывает, каким током будет равномерно разряжаться автомобильная АКБ до конечного напряжения при 20-часовом цикле разряда. Например, обозначение 6СТ-60 означает, что батарея в течение 20 часов будет отдавать ток 3 А, при этом в конце напряжение на клеммах не упадет до 10,5 В. Однако, это вовсе не означает линейную зависимость времени разряда от разрядного тока. Целый час стабильно отдавать 60 А наша батарея не сможет.

Ёмкость аккумулятора, как правило, выбирается исходя из рабочего объёма двигателя (большой объём — большая ёмкость), его типа (для дизельных ёмкость автомобильной АКБ будет больше, чем для бензиновых при равном объёме) и условий эксплуатации (для районов с холодным климатом ёмкость увеличивают).

Резервная ёмкость. В отличие от номинальной ёмкости, которая определяется разрядом относительно малым током, резервная ёмкость показывает, сколько времени способен проехать автомобиль зимней ночью при неисправности генератора. Ток разряда принимается равным 25 А, поскольку зимней ночью очень много энергии уходит на освещение и обогрев салона. При этом нельзя просто разделить номинальную ёмкость автомобильной АКБ на 25 А. При таком токе резервная ёмкость составит примерно 2/3 от номинальной. Как правило, значение резервной ёмкости указывается на маркировке автомобильной АКБ в минутах.

Пусковой ток — максимальный ток, который способен отдавать аккумулятор без посадки напряжения на клеммах ниже 9 В в течение 30 секунд при $-18\text{ }^{\circ}\text{C}$ по ГОСТ 53165-2008.

В основном используется свинцово-кислотный тип. Собственно батарея состоит из 6 аккумуляторов (банок), каждая номинальным напряжением около 2,2 вольта, соединённых последовательно в батарею. Обычный электролит представляет собой смесь дистиллированной воды и серной кислоты с плотностью в пределах 1,23-1,31 г/см³.

Необходимость обслуживания. По этому принципу автомобильные АКБ классифицируют на два типа: обслуживаемые (и как их подкатегория — малообслуживаемые) и необслуживаемые (в

тексте ГОСТа обозначенные как безуходные). В простых по конструкции аккумуляторах необходим регулярный контроль состояния электролита и регулярная подзарядка по специальной технологии с помощью стационарного зарядного устройства. На промышленных предприятиях для ухода за автомобильными аккумуляторами существуют специально обученные люди, а также зарядные лаборатории (станции).

Однако «необслуживаемые» автомобильные АКБ — это не значит, что за такой батареей совсем не нужен уход. Необслуживаемая батарея имеет встроенный индикатор-ареометр, по цвету которого определяется плотность электролита – зелёный поясик при нормальной плотности, красный или белый – при низкой, когда батарея подлежит замене. Также необходимо периодически контролировать уровень электролита по меткам на корпусе. На всех автомобильных АКБ во избежание повреждения аккумуляторного отсека кислотой необходимо контролировать герметичность корпуса, заливных пробок и чистоту дренажных отверстий, а при появлении признаков электролита устранить течь и тщательно промыть корпус и отсек автомобильной АКБ нейтрализующим щелочным составом. Также необходимо периодически тщательно очищать и смазывать клеммы литиевой смазкой, во избежание их электрокоррозионного разрушения.

Существует ГОСТ 53165-2008, введён в действие 01.07.2009, в котором автомобильные аккумуляторы именуется «стартерными батареями».

Различные типы аккумуляторов обладают разными особенностями, которые не позволяют однозначно назвать «лучший» тип аккумулятора. Можно говорить только о лучшей применимости различных типов аккумуляторов в разных условиях. Современные «кальциевые» аккумуляторы обладают низким саморазрядом, не требуют обслуживания, но и не терпят глубоких разрядов – при коротких поездках в зимние морозы. В то же время, для «обслуживаемых» и «малообслуживаемых» аккумуляторов глубокий разряд не столь губителен, зато такие типы аккумуляторов требуют доливки дистиллированной воды 1 раз в 4—7 месяцев.

С понижением температуры падает способность аккумулятора «принимать заряд». Поэтому короткие поездки в зимние морозы, особенно с включёнными фарами, могут довольно быстро привести к полному разряду даже абсолютно исправного аккумулятора. Это приводит не только к невозможности запуска мотора, но и к сокращению срока службы аккумулятора, особенно «кальциевого».

При температуре окружающего воздуха $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ зарядные характеристики аккумулятора, не имеющего обогрева, из-за охлаждения ухудшаются, а при температуре ниже $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$ заряд от штатного генератора автомобиля практически отсутствует^[2]. Температура электролита в аккумуляторе, установленном на автомобиле, на $5\text{--}7\text{ }^{\circ}\text{C}$ выше температуры окружающей среды и изменяется вслед за ней с запаздыванием на $4\text{--}5$ часа. В режиме длительного движения за $10\text{--}12$ часов температура электролита в не обогреваемых аккумуляторных батареях повышается на $2\text{--}3\text{ }^{\circ}\text{C}$, а при наличии обогреваемого отсека для аккумуляторных батарей на $5\text{--}7\text{ }^{\circ}\text{C}$. Поэтому, для надёжной эксплуатации в условиях низких температур применяются конструкции аккумулятора с внутренним электроподогревом.

Зимой аккумулятор рекомендуется периодически снимать с автомобиля и заряжать зарядным устройством после согревания на воздухе до положительной температуры. Согревать холодный аккумулятор в горячей воде нежелательно по причине возможного частичного осыпания активной массы пластин из-за быстрых температурных деформаций.

5.2.2 Анализ характеристик промышленных зарядных устройств для автомобильных аккумуляторов

Сравним 8 лучших зарядных устройств, появившихся на рынке в 2016 году.

Появивсь подобные устройства на сцене лет сорок назад, их освистали бы. Потому что все знали: настоящий зарядник – тяжёлый ящик с огромным трансформатором внутри, разного рода крутилками, вольтметром и амперметром снаружи. Всё остальное – несерьёзно.

Современный зарядник – довольно симпатичная автоматическая коробочка с минимумом органов управления. А то и вообще без них. При этом многие почему-то очень похожи друг на друга.

Восемь устройств, взятых на тест, проверялись при двух температурах: -10 и $+20\text{ }^{\circ}\text{C}$. Не стоит верить утверждениям отдельных производителей насчет работоспособности при более сильных морозах. Во-первых, интенсивность процесса зарядки на холоде падает очень сильно: при $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ зарядный ток 55-й батареи составит всего $4\text{--}6\%$ показателя при плюс двадцати пяти. А попытки поднять напряжение заряда чреваты разру-

шением активной массы и коррозией токоотводов. Во-вторых, при более низких температурах изоляция проводов питания представленных устройств твердеет и ломается.

В целом устройства честно выдают заявленные программы заряда. Поводом для придинок стали плавкие предохранители вместо электронной защиты, отсутствие внятных надписей на корпусе и завышенная цена при примерно равных возможностях.

8 место – CTEK MXS 5.0 Battery Charger (рис. 1), Швеция. Ориентировочная цена, 4950 руб. Симпатично выглядит. Интуитивно понятно всё, кроме термина RECOND: тут без инструкции не разобраться. Впрочем, без этого режима для восстановления разряженных батарей можно и обойтись. К автоматике и схемотехнике претензий нет. В общем, всё отлично, кроме цены.



Рис. 5.1. Зарядное устройство CTEK MXS 5.0 Battery Charger

7 место – Keepower Battery Charger, Дания. Ориентировочная цена, 4200 руб. Отсутствуют надписи на русском. Зато есть светодиод для освещения пространства. Весь процесс идет автоматически и не требует вмешательства. Предусмотрена зарядка через гнездо прикуривателя. Изделие при желании можно повесить на стенку. Конструктивно и функционально неплохо, но цена все портит.

6 место – DHC SC5E, Тайвань. Ориентировочная цена, 2000 руб. Русскоязычные надписи на приборе отсутствуют. Прибор автоматический: подключил и забыл. Есть защита от переплюсовки, искрения, перезаряда и короткого замыкания. Но вот за позорную единицу измерения емкости «А/ч» в инструкции ее авторам должно быть стыдно. Правильно: А·ч!

5 место – TCB90 Futomatic, KHP. Ориентировочная цена,

3000 руб. Внутри тяжеленный трансформатор. Только не верьте надписи на коробке: устройство вовсе не пускозарядное. Посмотрите на тоненькие проводочки с «крокодилами» — ну какой с ними пуск! Не зря в Интернете его продают как обычный зарядник. Работает нормально, но плавкий предохранитель не обрадовал. И похоже, что кто-то приспособил подходящий корпус под иную начинку.

4 место – «Орион» PW150, Россия (рис. 2). Ориентировочная цена, 1070 руб. Самое простое внешне изделие и технически незамысловато. Предохранитель в качестве защиты от ошибочного подключения – не самое удобное для пользователя решение. Режим подзаряда при хранении не предусмотрен. Но, исходя из принципа «проще не бывает», многих привлечет именно полное отсутствие наворотов. Цена, которая в разы ниже, чем у конкурентов, – немаловажный фактор.



Рис. 5.2. «Орион» PW150

3 место – Bosch C3, КНР. Ориентировочная цена, 3220 руб. Пожалуй, самый презентабельный вид. Пиктограммы понятны и перевода не требуют. Сотрудничает с 6- и 12-вольтовыми АКБ. Забавно выглядят «крокодилы» без проводов: потребитель должен прикрутить их самостоятельно. Предусмотрена «вешалка» на стенку для удобства пользования. Но вот предохранитель как защита – несовременно и неудобно.

2 место – Универсальное зарядное устройство «СОРОКИН» 12.94, «сделано для России». Ориентировочная цена, 2000 руб. Крайне эргономичное устройство умеет работать как с 12-, так и с 6-вольтовыми батареями. Заряд осуществляется циклически, в несколько этапов, при этом предусмотрен режим «десульфата-

ция» для почти убитых батарей. В комплекте различные соединительные провода, в том числе для включения в гнездо прикуривателя.

1 место – Berkut Smart Power SP-8N, КНР. Ориентировочная цена, 2650 руб. Китайский «Беркут» вполне освоился в России: даже надписи выполнены кириллицей. Всё просто: включил и пользуйся. Защита имеется, ток солидный, автоматика работает, режимы на выбор, цена средняя, облик современный. Замечаний нет, всё хорошо.

Как следует из представленного обзора все имеющиеся на рынке зарядные устройства имеют высокую цену, а в силу насыщенности электроникой ограниченную надежность. В частности, опыт эксплуатации отечественного устройства «Орион» PW150 показывает, что при его использовании в гаражных условиях ресурс составляет 1-2 зарядки. При зарядке холодных аккумуляторов в сырых условиях происходит перегрев элементов устройства и их выгорание. Таким образом, устройство крайне критично к условиям эксплуатации.

Выводы по разделу (! Этапу работы !)

Актуальной представляется разработка дешевого и надежного зарядного устройства для автомобильных аккумуляторов, пригодного для эксплуатации в реальных гаражных условиях.

5.2.3 Объект проектирования и постановка задач

Выбранное объектом проектирования зарядное устройство должно удовлетворять следующим главным требованиям: надежность и долгосрочность функционирования в реальных условиях (автосервис, гараж, балкон и др.) при достаточной простоте конструкции, доступности элементов и низкой стоимости.

Практически требуется обоснованно выбрать электрическую схему, рассчитать ее параметры, реализовать конструкцию, испытать ее в условиях, аналогичных параллельным испытаниям некоторой заводской конструкции. Сравнить результаты этих испытаний и сделать заключение о ее конкурентоспособности, объективно выявив достоинства и недостатки.

Также по результатам реализации разработки следует наметить пути и способы ее совершенствования, обозначить сферу применения в автосервисе и бытовых условиях.

Электротехническими требованиями к зарядному устрой-

ству выберем:

- способность заряжать автомобильные и мотоциклетные аккумуляторы различной емкости (от 5 до 200 А·ч) с различным номинальным напряжением (от 6 до 24 В) за приемлемое время (в течение суток);
- компактность, малый вес;
- безопасность;
- надежность и долговечность;
- эргономичность и удобство использования;
- схемная простота, низкая трудоемкость изготовления и, следовательно, стоимость.

При этом требования, связанные с автоматизацией процесса зарядки, текущего контроля, наличия специальных режимов для восстановления «умирающих» аккумуляторов будем считать вторичными и не подлежащими удовлетворению. Действительно, эти минорантные для нас требования вступают в противоречие с выбранными здесь в качестве доминантных.

Выводы по разделу

В качестве реализующих схемных решений рассмотрим два следующих: зарядное устройство на базе модифицированного блока питания старого ПК и ограниченного конденсатором источника зарядного тока.

Преимущество первого технического решения – в использовании готовой конструкции, второго – в практически неограниченной номенклатуре заряжаемых батарей.

ГЛАВА 6. ПРАКТИЧЕСКОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ, РАСЧЁТЫ, ИСПЫТАНИЯ И СРАВНЕНИЕ С ПРОМЫШЛЕННЫМ ОБРАЗЦОМ

6.1 Зарядное устройство из компьютерного блока питания

Последовательно рассмотрим реализацию зарядного устройства из блока питания ПК и выпрямителя с токоограничивающим конденсатором. Зарядное устройство из блока питания компьютера (БПК) получается за копеечную цену, а его парамет-

ры отлично справляются с зарядкой автомобильных АКБ.

Мы использовали рабочий блок питания от старого ПК, мощностью 250 Вт. Этой мощности хватает с запасом.

Поскольку зарядка должна происходить при напряжении в 13,9 – 14,4 В, переделкой БПК является поднятие напряжение на линии 12 В до 14,4 В.

Следуя рекомендациям в предметных источниках, мы отпаяли все провода, которые выходили с блока питания, оставив только зеленый, который запаяли к минусовому контакту. Это делается для автоматического старта блока при включении в сеть. Более старые БПК этой операции не требуют.

Следующие манипуляции осуществляем с режимом работы ШИМ – это микросхема TL494 (или ее аналоги). С первым выводом микросхемы соединены три резистора, нам нужен тот, который соединяется с выводами блока +12 В. На рис. 6.4 этот резистор мы отметили красной точкой.

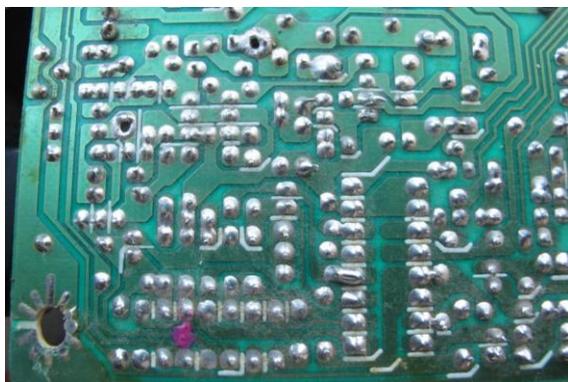


Рис. 6.1. Первый вывод микросхемы TL494

Этот резистор мы отпаяли и измерили его сопротивление. Оно составило 38,5 кОм. Вместо него мы впаяли переменный резистор, который предварительно настроили на такое же сопротивление.

Плавно увеличивая сопротивление переменного резистора, мы добились напряжения на выходе в 14,4 В (рис. 6.2).

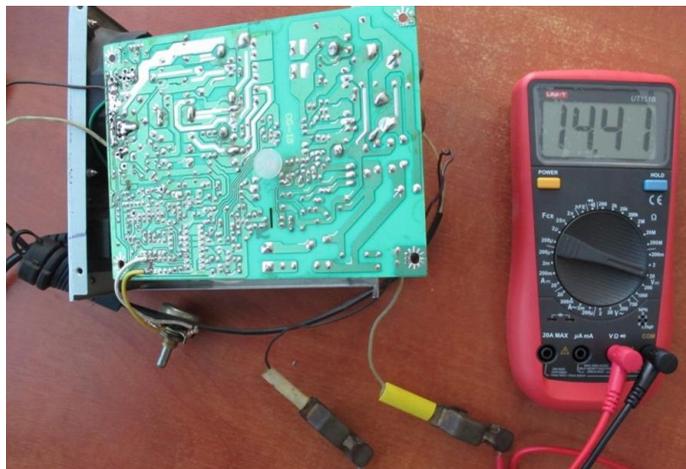


Рис. 6.2. Подбор регулировочного резистора для получения повышенного напряжения 14.4 В

Когда напряжение достигло 14.4 В, мы заменили переменный резистор на постоянный с сопротивлением 91 кОм, близким к измеренному 89.7 Ком.

После этого закрыли крышку и приступили к использованию зарядного устройства в тестово-испытательном режиме.

Следует отметить, что переделанный в зарядное устройство автомобильного аккумулятора БПК имеет функцию защиты от короткого замыкания и перегрузки. Однако в нем нет защиты от переплюсовки. Поэтому для практической эксплуатации мы снабдили выход этого устройства мощным диодом.

6.2 Зарядное устройство на базе токоограничивающего конденсатора

Вообще, технология быстрой и гибкой разработки зарядных устройств различного назначения остро востребована. Повысить эффективность проектов в электротехнике и электронике позволяют современные средства моделирования систем Simulink Matlab, MicroCap и Electronics WorkBench и др. Поэтому в этом параграфе мы спроектируем простое зарядное устройство для автомобильного аккумулятора, используя имитационную систему Electronics WorkBench (EWB) и оценить методическую эффективность подхода. Реализация обозначенной цели достигается путем

последовательной реализации различных схемных решений в виртуальной среде EWB с последующим их анализом и выбором наилучшего.

Простейшей схемой зарядного устройства для автомобильного аккумулятора, которую часто рекомендуют гаражные мастера, изображена на рисунке 6.3 и содержит последовательно соединенные диод и омическое (активное) сопротивление. Назначение диода в этой схеме – обеспечить однонаправленное протекание электрического тока, а добавочного омического сопротивления – ограничить его величину. Необходимую степень ограничения зарядного тока определим из условия, что полная зарядка аккумулятора требует, согласно рекомендациям производителей 10-12 часов. Т.е. для аккумулятора легкового автомобиля емкостью 55-62 А·час зарядный ток должен составлять 5-6 А. Превышение этой величины резко сокращает срок службы аккумулятора.

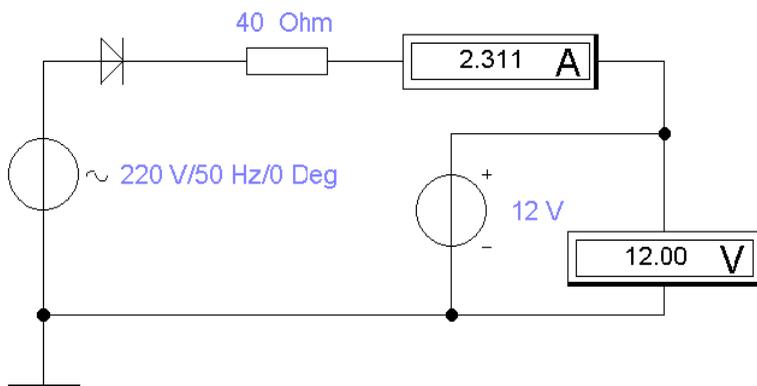


Рисунок 6.3. Схема простейшего зарядного устройства и подбор добавочного резистора в среде EWB

Рассчитать номинал добавочного резистора в схеме рис. 5 можно по закону Ома, но мы здесь воспользуемся имитационными возможностями среды EWB – просто подберем подходящий номинал. Результаты подбора добавочного резистора приведены на рисунке 5. Здесь следует учесть, что амперметр на схеме показывает действующее значение тока, а его амплитуда в 2.8 раза превышает действующее значение (за счет использования лишь одного из двух направлений протекания переменного синусоидаль-

ного тока).

К сожалению, достоинства описанной выше схемы ограничиваются лишь исключительной простотой. В то же время, она имеет ряд недостатков. Главный – очень низкая эффективность. Время заряда составляет $60 \text{ А} \cdot \text{час} / 2.3 \text{ А} \approx 26$ часов, а потребляемая зарядным устройством мощность $220 \text{ В} \cdot 2.3 \text{ А} \approx 506$ Ватт. Непосредственно на зарядку аккумулятора в таком процессе расходуется не более (реально значительно менее) $12 \text{ В} \cdot 2.3 \text{ А} \approx 28$ Ватт. Поскольку столь мощные лампы накаливания – редкость, в качестве дополнительного резистора «гаражные кулибины» рекомендуют электроплиты, что пожароопасно. Использование в этих целях сравнительно безопасных электрических ламп увеличивает время заряда до нескольких суток. Кроме того, при разрыве цепи, например, снятии одной клеммы аккумулятора между разомкнутыми проводниками, появляется опасное для жизни сетевое напряжение. Поэтому такое схемное решение приемлемо для тех, кто готов серьезно рисковать своей жизнью и одновременно многократно переплачивать за электроэнергию.

Применение диодного моста вместо одиночного диода (рисунок 6.4) позволяет лишь сократить время заряда до 13 часов без риска повредить аккумулятор; все прочие недостатки предыдущей схемы при этом сохраняются.

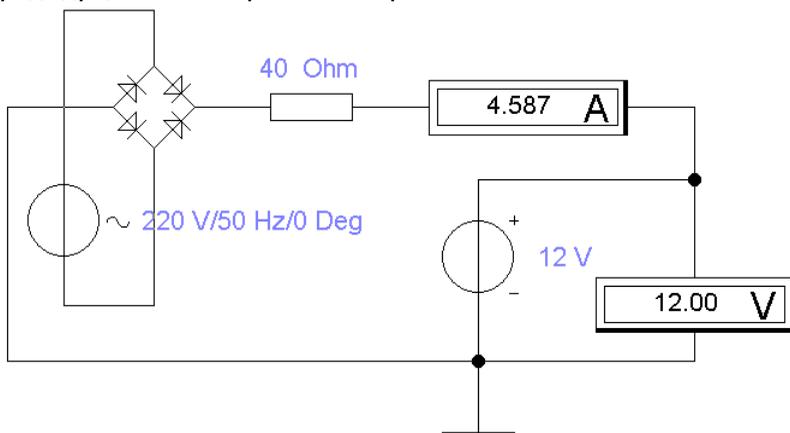


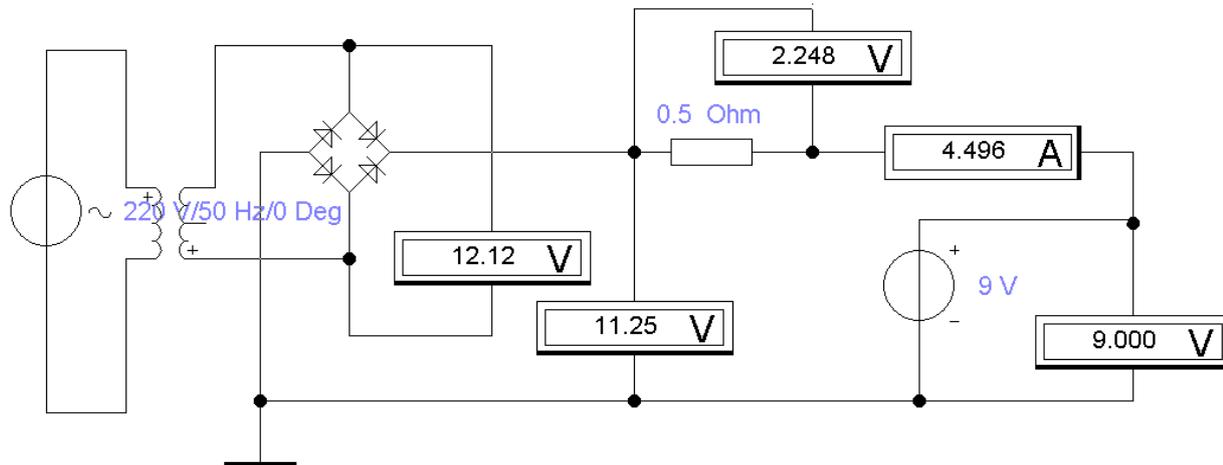
Рисунок 6.4. Схема зарядного устройства с диодным мостом, обеспечивающим выпрямление тока по двухполупериодной схеме в среде EWB

Устранить недостатки рассмотренных схем позволяет ис-

пользование понижающего трансформатора (рисунок 6.4). С одной стороны, он позволяет кардинально повысить эффективность (КПД) зарядного устройства, а с другой, исключить риск поражения потребителя электрическим током.



a)



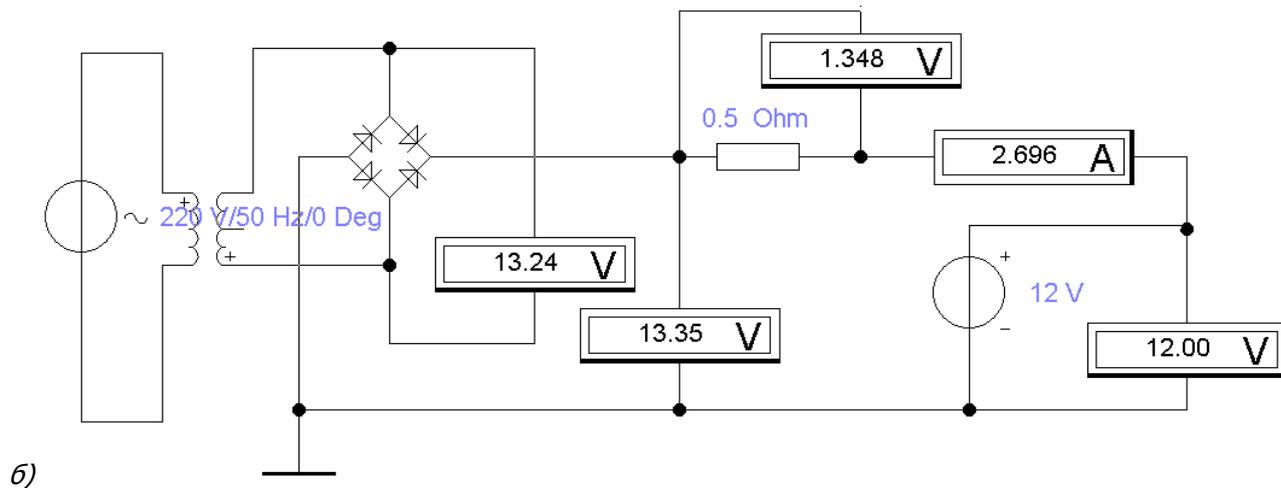
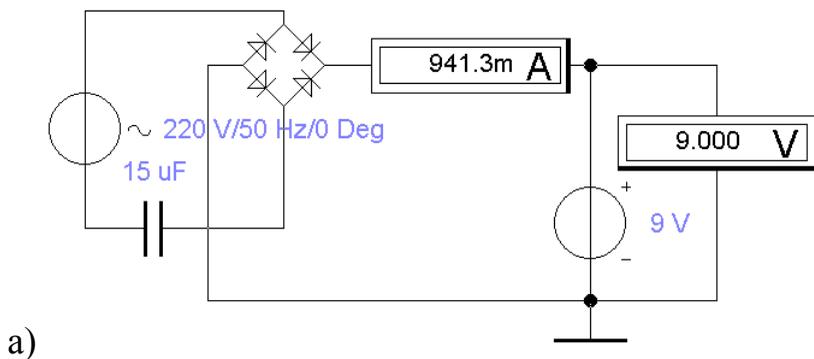


Рисунок 6.4. Схема зарядного устройства с понижающим трансформатором в среде EWB: *а* – в начале заряда, *б* – в конце заряда

Параметры понижающего трансформатора и добавочного сопротивления в этой схеме мы выбрали так, чтобы зарядный ток не превышал допустимые 5 А и снижался по мере заряда до величины, исключающей кипение электролита. Средний зарядный ток в нашей схеме (рисунок 6.4) составляет $(4.5 + 2.7)/2 = 3.6$ А, а время заряда $60/3.6 \approx 17$ часов. Практически в качестве добавочного сопротивления удобно использовать автомобильную лампочку мощностью 50-100 Вт и по накалу спирали судить о степени заряженности аккумулятора: по мере заряда накал будет уменьшаться от слабого до практически незаметного. В начале заряда рассеиваемая устройством мощность составляет $2.25^2/0.5 = 10$ Ватт, а по окончании – $1.35^2/0.5 = 3.5$ Ватт (т. е. в среднем около 7 Ватт). По сравнению с бестрансформаторной, трансформаторная схема в 70 раз экономичнее. Недостатками такого решения являются высокие вес и содержание дорогой электротехнической меди.

Снизить стоимость зарядного устройства, сохранив при этом высокий КПД позволяет конденсаторная схема (рисунок 6.5). В этой схеме принципиально отсутствуют омические потери: конденсатор можно рассматривать как кружку, которую поочередно подставляют под кран и наполняют, а затем опорожняют в ванну (последнее служит аналогом аккумулятора).



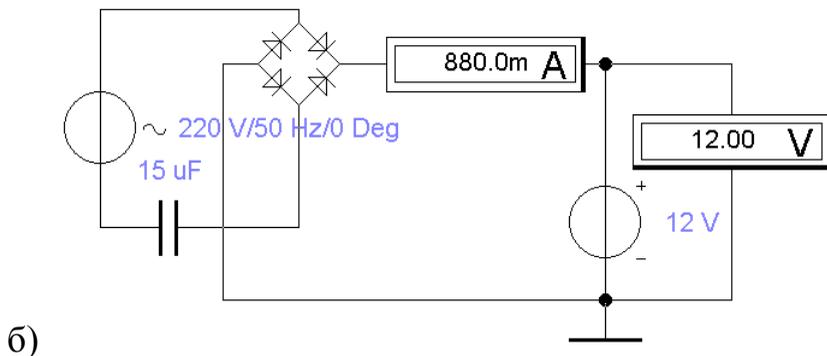


Рисунок 6.5. Схема зарядного устройства с конденсатором, ограничивающим ток, в среде EWB: *а* – в начале заряда, *б* – в конце заряда

Как свидетельствует результаты компьютерной имитации, зарядный ток в этой схеме практически не меняется в процессе заряда аккумулятора. При выбранном номинале конденсатора время заряда превышает двое суток. Сократить процесс позволяет параллельная установка нескольких подобных конденсаторов: одиночные конденсаторы большей емкости дефицитны, А ток в конце зарядке равный близкий к 5 А вреден для аккумулятора поскольку может вызвать кипение электролита и разрушение пластин. Рациональным техническим решение здесь представляется использование коммутируемого магазина конденсаторов, например 5 шт. по 15 мкФ. С помощью такого магазина можно вручную управлять зарядным током, постепенно снижая его от 5 до 1 А. Поскольку средний ток заряда в этом случае составляет 3А, аккумулятор полностью зарядится в течение суток. Очевидный недостаток – необходимость контроля и управления процессом, требующая вмешательства потребителя и наличие контрольного прибора (амперметра) в цепи зарядного устройства.

Поскольку после отключения от сети ограничивающие ток конденсаторы (рисунок 6.5) содержат опасный заряд и способны сохранять его в течение длительного времени, для обеспечения безопасности потребителя предлагается параллельно конденсаторам подключить защитное снимающее накопленный заряд сопротивление номиналом 100 кОм. Кроме того, для индикации се-

тевого подключения устройства параллельно этим конденсаторам подключим (красный) светодиод. Естественно, входная цепь требует защиты от перегрузки, вызванной неправильным подключением устройства или отказом его элементов. Эту функцию в предлагаемой схеме выполняет плавкий предохранитель номиналом 10 А.

Все рассмотренные в статье схемы позволяют не только зарядить, но и разрядить и даже полностью испортить аккумулятор: для этого достаточно нарушить полярность его подключения. С целью исключить подобную ситуацию предлагается дополнить схему зарядного устройства модулем, предотвращающим нарушение полярности. Результирующая схема устройства показана на рисунке 6.6, а ее реальный макет на рисунке 6.7.

Здесь следует подчеркнуть, что поскольку данное схемотехническое решение не содержит гальванической развязки с сетью промышленной частоты, использование такого устройства допускается только в помещениях с соблюдением всех мер электробезопасности.

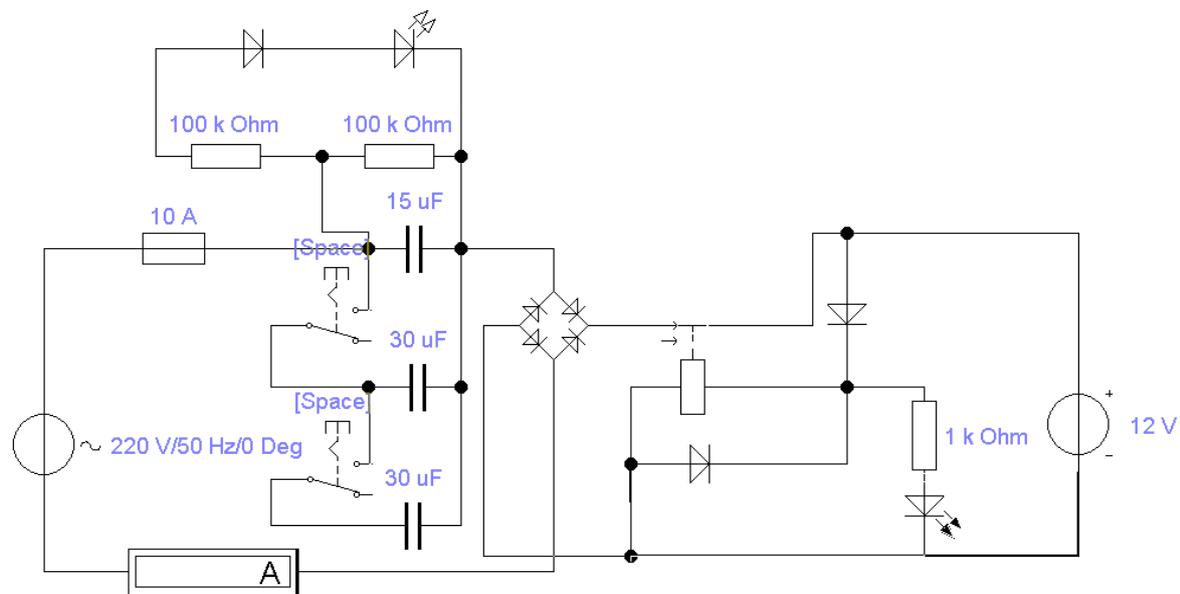


Рисунок 6.6. Схема зарядного устройства с магазином конденсаторов, индикаторами включения, правильной полярности аккумулятора и измерителем зарядного тока

Анализ работы макета (рисунок 6.7) свидетельствует, что имитационная среда EWB позволяет рассчитывать электронные устройства подобного типа с погрешностью в несколько процентов.



Рисунок 6.7. Вид зарядного устройства, разработанного авторами с использованием системы Electronics Workbench: *а* – элементы электрической схемы; *б* – работа макета устройства по схеме (рисунок 6.6).

На основании автоматизированного (средствами EWB) анализа различных способов и схем заряда автомобильных аккумуляторов авторами разработано простое и эффективное зарядное устройство.

Дальнейшее совершенствование разработки следует осуществлять в целях повышения ее безопасности, а также возможности восстанавливать аккумуляторы, утратившие свойства при продолжительной и/или ненадлежащей эксплуатации.

6.3 Измерение диэлектрической проницаемости пищевых продуктов аппаратными средствами ПК типа «ноутбук»

Проблема получения качественной сельхозпродукции тесно связана с технологиями хранения и переработки сырья. Для грамотного соблюдения этих технологий необходимо учитывать взаимное влияние физико-технологических характеристик продукта. В качестве наиболее значимых показателей зерноматериалов выступают влажность, соленость, содержание крахмала, размер и форма зерна, химический состав и прочее. Оценить связь этих критериев и особенностей обработки зерна возможно при помощи знания такого важного показателя, как диэлектрическая проницаемость. Данный параметр является одним из надежно измеряемых физических параметров, которые тем или иным способом соотносятся с различными технологическими показателями. Поэтому крайне актуальными представляются как вопросы изучения взаимодействия диэлектрической проницаемости зерна с прочими его свойствами, так и разработки аппаратно-методического обеспечения лабораторных измерений, в особенности, экспресс-способами.

Исследовательская работа нацелена на разработку приборного обеспечения и информативной методики исследования объективных связей между различными физическими и технологическими показателями зерноматериалов при непосредственном измерении их диэлектрической проницаемости.

Реализация намеченной цели осуществлялась путем решения следующих задач:

- 1) монографический и теоретический анализ взаимовлияния различных физико-технологических показателей зерновых с их диэлектрической проницаемостью;
- 2) изучение и комплексный анализ методов и средств измерения диэлектрической проницаемости сельскохозяйственных материалов и пищевых продуктов;
- 3) разработка приборного и методического обеспечения измерений диэлектрической проницаемости зерна (рациональный выбор конструкции экспериментальной измерительной ячейки, проектирование и реализация средств электрических измерений, калибровка/тарировка лабораторной установки, проведение тестовых опытов в целях отработки эффективной методики измерений);
- 4) проведение экспериментальных исследований для выявле-

ния связей диэлектрической проницаемости зерна с основными технологическими показателями различных зерно-материалов (в целях выявления возможностей и недостатков предлагаемых в диссертации измерительных средств и методик).

- 5) адаптация разработки к экспресс-измерениям влажности зерна потенциальными потребителями (разработка мобильной конструкции зонда, сопряжение измерительной ячейки с компьютером);
- 6) составление методических рекомендаций по использованию диссертационной разработки в учебном процессе вуза.

Методы исследования выбраны после изучения известных принципов и современных средств измерения диэлектрической проницаемости материалов, в т.ч. зерно-материалов. На основе их сопоставления по ключевым показателям с использованием экспертных оценок выбрана инструментальная методика диссертационного исследования (на основе кондуктивного метода измерения ϵ).

ГЛАВА 7. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ЗЕРНОМАТЕРИАЛОВ: ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И СРЕДСТВА ИЗМЕРЕНИЯ

В данной главе рассматриваются фундаментальные вопросы о связи технологически значимых свойств зерна и зерновой продукции с диэлектрической проницаемостью, а также основные современные методы исследований в обозначенной предметной области. Актуальность данного раздела обусловлена потребностями промышленности в эффективных средствах и технологиях обработки (кондиционирования) зерна посредством электромагнитных полей (ЭМП). Не менее актуальной представляется задача надежного определения влажности зерна в условиях подготовки к посеву, производству, хранению. Содержание главы представлено теоретической и методико-технологической компонентами в объеме, достаточном для научно обоснованного выбора целей диссертационной работы и рациональной формулировки соответствующих задач.

Микроволновое или СВЧ-излучение применяется не только в радарах и сотовой связи, но и в технологиях переработки пищевых продуктов и материалов. Например, в домашних микроволновых печах используется излучение частотой 2,45 ГГц, а в промышленных – 915 МГц. Поглощение СВЧ-энергии пищевыми продуктами обусловлено, главным образом, двумя физическими процессами – взаимодействием с ионами и вращением диполей. Ионному взаимодействию способствует наличие в продуктах солей. Под действием поля диссоциированные солевые ионы устремляются в направлении поля или в противоположном в соответствии с их зарядом. Ускоряясь переменным электромагнитным полем, эти частицы сталкиваются с окружающими и передают им часть своей энергии. Вследствие теплового взаимодействия молекул продукта этот направленный переданный ионом от поля импульс хаотизируется, что ведет к нагреву всей среды.

Дипольные же молекулы типа воды в таком поле подвергаются быстропеременному вращательному моменту и своим раскручиванием вперед-назад также передают приобретенный от поля момент импульса соседям. Результатом процесса является нагрев среды. Основным компонентом продовольственных продуктов, отвечающим за данный механизм диссипации СВЧ-энергии, является вода.

Степень и характер взаимодействия полярных диэлектриков, к которым относятся зерновые культуры, определяется физическим параметром, называемым диэлектрическая проницаемость.

7.1 Диэлектрическая проницаемость зерна: физические основы и связь с важными технологическими параметрами

Диэлектрические свойства материала являются электрическими характеристиками плохо проводящих веществ (сред, материалов), определяющими их взаимодействия с электрическим полем. Они важны для множества технологических процессов, в частности нагрева полями радиочастот и СВЧ. Определяя насколько хорошо материал поглощает энергию высокочастотного переменного электрического поля они отражают скорость нагрева соответствующих образцов (сред). Практически диэлектрические свойства важны при проектировании радиочастотных и микроволновых (СВЧ) нагревательных устройств и определение регламента соответствующих техпроцессов. Поскольку диэлектрические свойства, в частности пищевых продуктов, сильно коррелируют с влагосодержанием, измерение диэлектрических свойств может использоваться для экспресс-измерений их влажности (влагосодержания). Диэлектрические свойства сельскохозяйственной и пищевой продукции наряду с влагосодержанием определяются и другими факторами. Температура является важным фактором и ее влияние можно понять, осуществляя измерения влажности или производя нагрев электромагнитным полем (ЭМП). Плотность конкретных сред, например зерновых, может также существенно варьироваться, что важно изучить для практических приложений. Также на диэлектрические свойства влияет химический состав продукта и частота приложенного переменного ЭМП.

Комплексная диэлектрическая проницаемость ε (по отношению к вакууму) дается формулой:

$$\varepsilon = \varepsilon' - j\varepsilon'',$$

(7.1)

где ε' – диэлектрическая постоянная, ε'' – коэффициент диэлектрических потерь. Действительная часть диэлектрической проницаемости характеризует способность материала накапливать энергию электрического поля, а мнимая – его склонность к диссипации электромагнитной энергии в тепловую. Часто представляет интерес угол диэлектрических потерь δ , определяемый формулой:

$$\delta = \arctg(\varepsilon''/\varepsilon') , \quad (7.2)$$

и проводимость диэлектрика:

$$\sigma = \omega \varepsilon_0 \varepsilon'' \text{ См/м} , \quad (7.3)$$

где $\varepsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12}$ Ф/м – электрическая постоянная; $\omega = 2\pi f$ – круговая частота; f – частота ЭМП в Гц.

7.1.1 Связь физико-химических свойств с диэлектрической проницаемостью сельскохозяйственных и пищевых продуктов.

В гигроскопичных материалах, в частности, зерне влажность является главным фактором, определяющим диэлектрическую проницаемость. Для гранулированных сред (к ним относятся зерновые), представляющих собой материально-воздушную смесь, средняя плотность также влияет на ε . Химический состав продукта влияет на диэлектрическую проницаемость посредством присутствующих в них подвижных ионов (например, диссоциированные соли) и дипольных молекул типа H_2O .

Большинство рассматриваемых в работе сред характеризуются сильной зависимостью $\varepsilon(f)$, обусловленной переориентацией дипольных молекул в направлении переменного ЭМП. Для этого механизма в 1929 г. Петер Дебай предложил формулу:

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + j\omega\tau} , \quad (7.4)$$

где ε_s – диэлектрическая проницаемость материала для постоянного электрического поля; ε_∞ – для ЭМП бесконечно большой частоты; τ – время релаксации дипольных молекул в составе продукта, с.

Для действительной и мнимой частей ε выражение (7.4)

расщепляется на:

$$\varepsilon' = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty}}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (7.5)$$

$$\varepsilon'' = \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty})\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (7.6)$$

Типичный вид зависимостей (7.5) и (7.6) показан на рисунке 7.1.

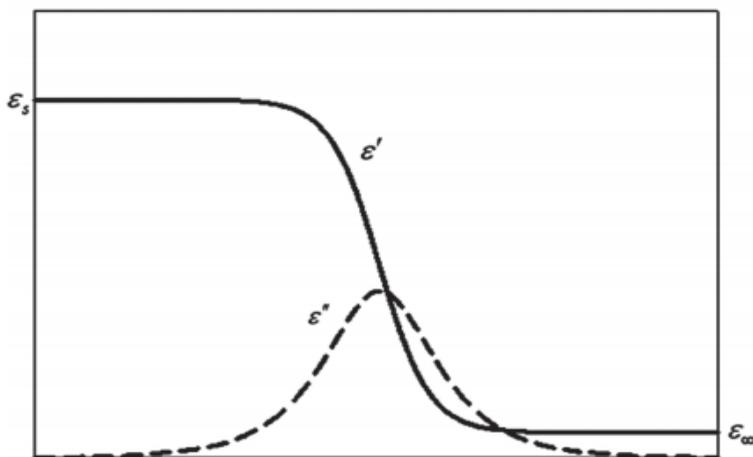


Рисунок 7.1 – Диэлектрическая проницаемость и коэффициент диэлектрических потерь материала, удовлетворяющего теории П. Дебая (в частности, влажного зерна), в зависимости от частоты ЭМП

При увеличении температуры влагосодержащие сельскохозяйственные и пищевые продукты демонстрируют снижение как ε' , так и ε'' . Это связано с тем, что при увеличении температуры от 0 до 60 °С ε_s воды уменьшается от 87,9 до 66,7, а ε_{∞} – от 5,7 до 4,2. Соответственно это приводит к снижению ε' и ε'' не только воды, но и содержащего ее продукта.

Плотность также влияет на диэлектрическую проницаемость, особенно если некоторый однородный монолитный материал подвергся измельчению (помолу или грануляции). Применительно к зерну диэлектрическую проницаемость отдельного семени измерить практически невозможно, поэтому ее определение

осуществляют для совокупности зерен – как цельных, так и под-вергнутых измельчению. Как следствие, интересен перевод ди-электрической проницаемости дисперсной смеси зерно – воздух (крупа – воздух, мука – воздух) в диэлектрическую проницае-мость собственно зерновой среды. Для такого перевода использу-ется уравнение диэлектрических смесей.

Рассмотрим двухкомпонентную смесь с эффективной ди-электрической проницаемостью ε , состоящую из среды (в нашем случае воздуха) с диэлектрической проницаемостью ε_1 , в которую помещены частицы (зерно, крупа, мука) с диэлектрической про-ницаемостью. Обозначим v_1 и v_2 объемные доли соответствующих компонентов смеси. Очевидно, $v_1 + v_2 = 1$. Для зерновых культур нашли применение следующие два уравнения:

$$\varepsilon^{1/2} = v_1 \varepsilon_1^{1/2} + v_2 \varepsilon_2^{1/2} \quad (7.7)$$

и

$$\varepsilon^{1/3} = v_1 \varepsilon_1^{1/3} + v_2 \varepsilon_2^{1/3}. \quad (7.8)$$

Первое уравнение подразумевает пластинчатую форму частиц, второе – объемную.

Для определения ε_2 необходимо знать эффективную ди-электрическую проницаемость зерно-воздушной (крупо-воздушной, порошко-воздушной) смеси ε , ее плотность ρ , а также плотность ρ_2 зерновой массы (крахмала). Это позволяет рассчиты-вать объемную долю зерна в смеси как ρ/ρ_2 . Решая уравнение (7.7) и (7.8) с учетом $\varepsilon_1 = 1$, получаем соответственно:

$$\varepsilon_2 = \left(\frac{\varepsilon^{1/2} + v_2 - 1}{v_2} \right)^2 \quad (7.9)$$

и

$$\varepsilon_2 = \left(\frac{\varepsilon^{1/3} + v_2 - 1}{v_2} \right)^3. \quad (7.10)$$

Если плотность зерно-воздушной смеси равна ρ_x , то ее ди-электрическая проницаемость равна:

$$\varepsilon_x^{1/2} = \frac{\varepsilon_2^{1/2} - 1}{\rho_2} \rho_x + 1 \quad (7.11)$$

для модели (7.7) и

$$\varepsilon_x^{1/3} = \frac{\varepsilon_2^{1/3} - 1}{\rho_2} \rho_x + 1 \quad (7.12)$$

для модели (7.8).

Соответственно, эти формулы позволяют пересчитать диэлектрическую проницаемость ε_x для любой плотности ρ_x , если известна диэлектрическая проницаемость ε_y для плотности ρ_y . Явной формой этих уравнений служат

$$\varepsilon_x = \left[\left(\varepsilon_y^{1/2} - 1 \right) \frac{\rho_x}{\rho_y} + 1 \right]^2 \quad (7.13)$$

для модели (7.7) и

$$\varepsilon_x = \left[\left(\varepsilon_y^{1/3} - 1 \right) \frac{\rho_x}{\rho_y} + 1 \right]^3 \quad (7.14)$$

для модели (7.8).

Экспериментально установлено, что модель (7.8) (соответственно уравнения 7.10, 7.12, 7.14) лучше согласуются для опытов с цельными зернами пшеницы, молотой пшеницей и мукой. Тем не менее, поскольку форма всех перечисленных частиц отличается от сферической, в данной работе предлагается при наличии соответствующей экспериментальной базы и исследуемых материалов пользоваться более реалистичными моделями:

$$\varepsilon^{1/n} = v_1 \varepsilon_1^{1/n} + v_2 \varepsilon_2^{1/n}, \quad (7.15)$$

$$\varepsilon_2 = \left(\frac{\varepsilon^{1/n} + v_2 - 1}{v_2} \right)^n, \quad (7.16)$$

$$\varepsilon_x^{1/n} = \frac{\varepsilon_2^{1/n} - 1}{\rho_2} \rho_x + 1, \quad (7.17)$$

$$\varepsilon_x = \left[\left(\varepsilon_y^{1/n} - 1 \right) \frac{\rho_x}{\rho_y} + 1 \right]^n, \quad (7.18)$$

где n – эмпирический параметр ($2 \leq n \leq 3$).

В низкочастотном (до 1 МГц) диапазоне диэлектрическая проницаемость влагосодержащих зерновых продуктов несколько снижается при увеличении частоты ЭМП. В СВЧ-диапазоне частотная зависимость ε носит более сложный характер, и ее исследования при таких условиях выходят за рамки данной работы.

Подробные экспериментальные исследования зависимости диэлектрической проницаемости от влагосодержания, степени дисперсности и температуры приведены в работах [1]. Однако в этих работах недостаточно освещены результаты исследования диэлектрической проницаемости различных зерновых культур и материалов, остро необходимые при проектировании сушильного СВЧ-оборудования, а также в разработках эффективных компактных устройств для измерения влажности зерноматериалов. Восполнение выявленных научных пробелов составляет цель данной магистерской диссертации.

Диэлектрическая проницаемость основных пищевых продуктов показана на рисунке 7.2.

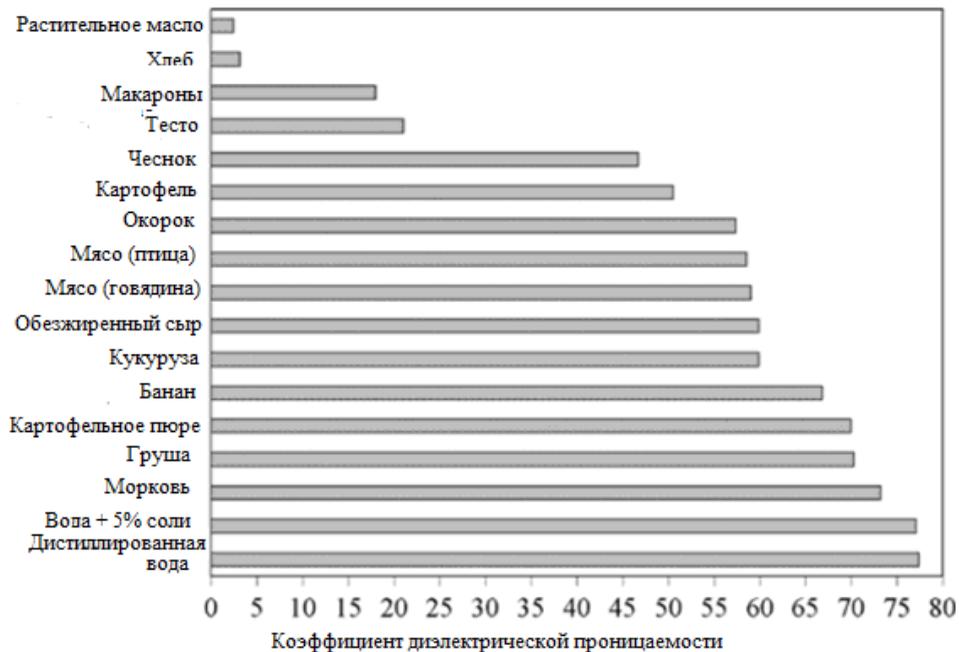


Рисунок 7.2 – Диэлектрическая проницаемость основных пищевых продуктов

Кроме нее важным параметром этих продуктов является показанный на рисунке 7.3 фактор диэлектрических потерь. Последний, однако, выходит за рамки целей данной работы.

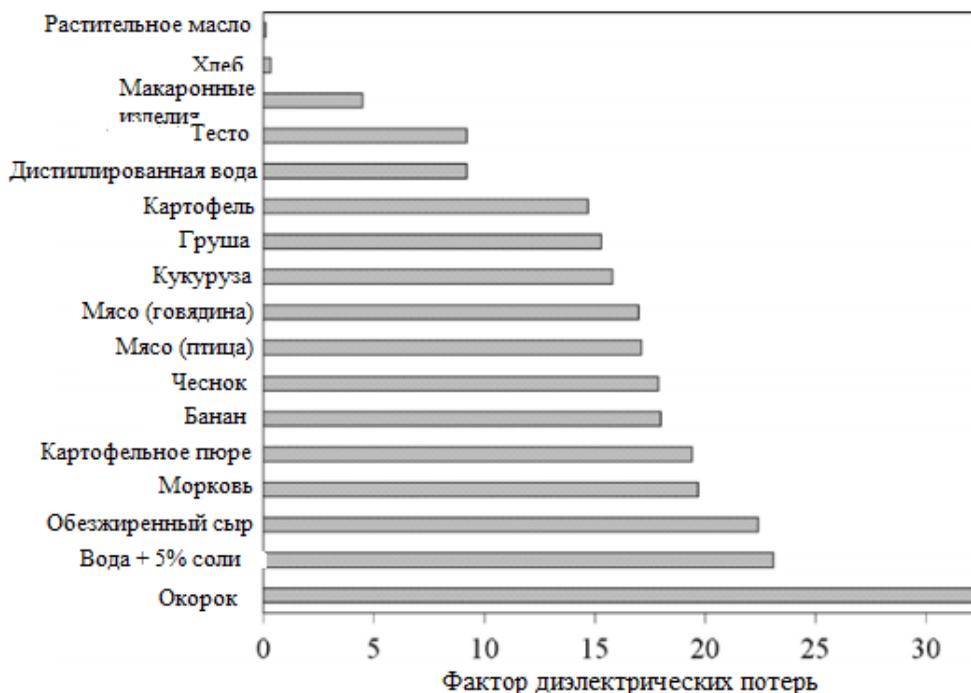


Рисунок 7.3 – Фактор диэлектрических потерь различных продуктов

Если вода содержится в продукте в связанной форме, тогда диэлектрические свойства (в частности, ε) возрастают с температурой, в то время как для чистой воды эта величина с ростом температуры уменьшается. Как следствие, суммарные диэлектрические свойства влагосодержащего продукта меняются с температурой в зависимости от соотношения долей связанной и свободной воды.

Кроме того, часто на температурную зависимость диэлектрических свойств влияют конкурирующие обстоятельства: в то время как с ростом температуры дипольные потери снижаются, роль ионной проводимости увеличивается. Как следствие, продукты, проявляющие оба механизма диссипации СВЧ-энергии, дают возможность наблюдать немонотонную зависимость коэффициента потерь от температуры.

Практически интересная область температурной зависимости диэлектрических свойств продуктов от температуры в от-

рицательном диапазоне последней вообще является мало изученной. Эта область вследствие сравнительной сложности соответствующих экспериментов также выходит за пределы данного исследования.

Диэлектрические свойства продукта, как следует из данных рисунков (7.2 и 7.3) зависят от его состава. Углеводы, жиры, влагосодержание, белки и соль являются здесь основными компонентами. Содержание связанной и свободной воды, поверхностных зарядов, электролитов, неэлектролитов, а также плотность водородных связей – все это влияет на диэлектрические свойства. Изменение физических, в том числе диэлектрических свойств, происходит при технологической и/или кулинарной обработке продуктов: потеря влаги, денатурация белков и пр. Поэтому скрупулезное изучение диэлектрических свойств основных компонентов пищевых продуктов, а также воздействие технологического процесса их переработки на диэлектрические свойства крайне важно для технологов-пищевиков и разработчиков новых СВЧ-процессов переработки пищевого сырья.

Соли, главным образом, поваренная, являются важным элементом всех пищевых продуктов. Одновременно они обеспечивают ионную проводимость. Например, добавление соли в черную икру уменьшает диэлектрическую проницаемость, одновременно увеличивая коэффициент диэлектрических потерь. Уменьшение диэлектрической проницаемости с ростом солесодержания обусловлено процессом гидратации ионов и соответственно снижением чувствительности связанных диполей воды к внешнему полю. С другой стороны, повышенное солесодержание приводит к увеличению коэффициента потерь, поскольку в системе увеличивается концентрация носителей заряда и их подвижность. Оба параметра – диэлектрическая проницаемость и коэффициент потерь – увеличиваются с ростом температуры. Описанную ситуацию, однако, нельзя назвать универсальной и в ряде случаев исследователи сталкиваются со значительно более сложным откликом системы на изменение концентрации соли и/или температуры.

Диэлектрические свойства углеводов интересны, поскольку те являются основным компонентом пищевых продуктов. Для них и для их водных растворов влияние свободной воды на диэлектрические свойства особо сильно по причине незначительной диэлектрической активности углеводов как таковых. Водородные связи и гидроксильно-водные взаимодействия обуславливают диэлектрические свойства высших сахаров, мальтозы, гидролизиро-

ванного крахмала и лактозы.

Изменение диэлектрических свойств крахмала с температурой зависит от того, находится ли крахмал в твердой или в виде суспензии. Когда исследовались диэлектрические свойства разных крахмалов в виде порошка на частоте 2,45 ГГц и диэлектрическая проницаемость и коэффициент потерь демонстрировали увеличение при нагреве. Отличия между коэффициентом потерь различных порошковых крахмалов объяснимы с позиции их неравной плотности. Меньшей удельной плотности соответствует меньший коэффициент диэлектрических потерь.

Для крахмальных суспензий сильное влияние на диэлектрическую проницаемость оказывает свободная вода. Установлено, что диэлектрическая проницаемость и коэффициент потерь уменьшаются по мере роста как температуры, так и концентрации.

Диэлектрические свойства водных растворов обратным образом связаны с температурой, если отсутствуют ионы. Увеличение концентрации крахмала ведет к снижению диэлектрической проницаемости и коэффициента потерь поскольку молекулы крахмала связывают молекулы воды таким образом снижая их количество в свободном состоянии.

7.2 Принципы, методы и средства измерения диэлектрической проницаемости пищевых продуктов

Наиболее часто используемым принципом измерения диэлектрической проницаемости пищевых продуктов, как и прочих (твердых, жидких и сыпучих) сред, является исследование их способности увеличивать энергию, накопленную в электрическом поле – т.е. непосредственное использование определения диэлектрической проницаемости как физической величины.

Основная идея таких измерений заключается в сравнении известной или также измеряемой накопленной электрической энергии в поле заполненного исследуемым материалом конденсатора с энергией поля конденсатора пустого.

Соответствующая методика, называемая кондуктивной, схематизирована на рисунке 7.4.

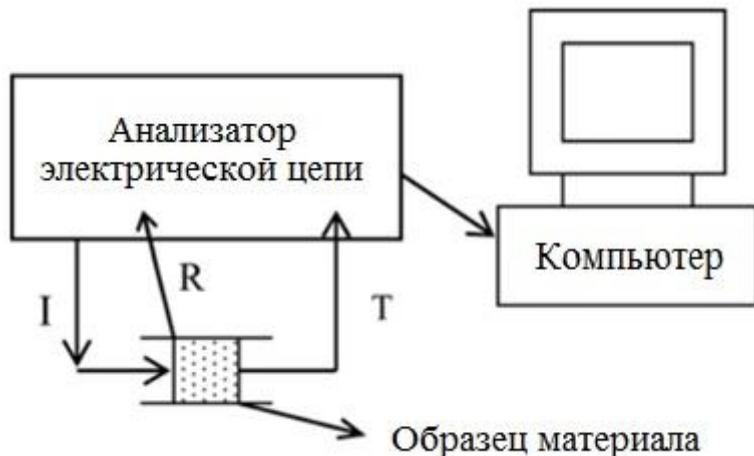


Рисунок 7.4 - Схематическая реализация кондуктивного метода: I – исходящий сигнал, T – прошедший через среду, R – отраженный средой

В изображенной схеме анализатор представляет собой комбинированное устройство, позволяющее испускать, как правило, синусоидальный сигнал определенной амплитуды, частоты и фазы (I – на схеме рисунка 7.4), а также принимать прошедший (T) и/или отраженный (R) сигналы, определяя при этом их амплитудно-фазовые параметры. Роль компьютера состоит в сопоставлении электрических параметров испущенного и принятых сигналов и решении т.н. *обратной задачи* – определении электрических параметров заполненного средой конденсатора (емкости C и проводимости σ), который бы обеспечивал измеренные параметры T и/или R сигналов.

Поскольку обратные задачи являются принципиально некорректными – допускают бесчисленное множество решений – выбор нужного обеспечивается *регуляризацией*. Последним термином в математике обозначают совокупность дополнительных знаний, условий или обстоятельств, которые из бесчисленного множества в большинстве своем бессмысленных решений задачи выбрать единственное верное. В нашем случае регуляризация основывается на теории электрических цепей однофазного переменного тока. Практически в компьютер для корректного и однозначного анализа цепи требуется заложить адекватную модель электрического контура с кондуктивными (активными) и реактив-

ными элементами.

Техническая реализация схемы рисунка 4 может существенно варьироваться в зависимости от предполагаемых условий эксплуатации, типов анализируемого материала, доступного измерительного оборудования, в т.ч. компьютерного. Наиболее простой и доступной представляется реализация измерительных ячеек среднего размера (объемом 0,1-1 л) в сочетании с генератором низких и умеренно высоких частот (10 кГц – 100 МГц).

Достоинством подобных измерительных систем являются простота реализации и безопасность использования, что позволяет адаптировать их для повсеместного применения, включая учебный процесс. Недостатком видится невозможность анализировать диэлектрические свойства малых объемов и объектов, а также умеренная по сравнению с альтернативными методиками точность, характеризующаяся относительной погрешностью более 2–3 %.

Принципиально родственным является *резонансный метод*, называемый также методом возмущения измерительной ячейки. В нем диэлектрическая проницаемость помещаемой в резонансный R–L–C контур измеряемой среды меняет емкость конденсатора и, как следствие, резонансную частоту.

Схематизация метода отображена на рисунке 7.5.

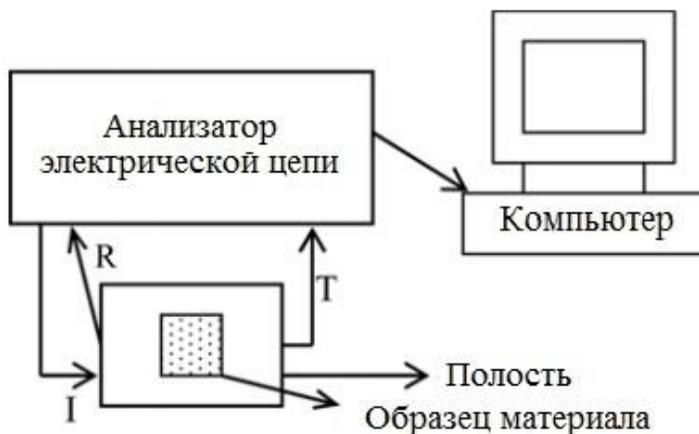


Рисунок 7.5 - Схематическая реализация резонансного метода. Обозначения идентичны обозначениям рисунка 7.4

Компьютеру отводится роль анализатора величины зафиксированной отстройки (от резонансной частоты) в связи с диэлек-

трическими параметрами помещенного в измерительную ячейку образца. Здесь также существенна регуляризация, основанная на гораздо более сложной по сравнению с кондуктивным методом математической модели электрической цепи переменного тока.

Техническая реализация также весьма вариативна и легко адаптируется под различные ситуации и требования.

Достоинствами метода являются высокая точность и абсолютная безопасность, однако их во многом нивелирует чрезвычайная сложность электронного модуля системы.

Принципиально альтернативный подход к измерению диэлектрических параметров материалов основан на их связи с показателями поглощения и отражения электромагнитных волн (излучений) сверхвысокой частоты (свыше 1 ГГц).

Ему соответствуют два наиболее распространенных варианта измерительных систем: первая основывается на анализе параметров отраженного образцом излучения (ее схема представлена на рисунке 7.6), вторая – на прошедшего через образец (схема на рисунке 7.7).



Рисунок 7.6 - Схематическая реализация коаксиального метода. Обозначения идентичны обозначениям рисунка 7.4

Обе схемы характеризуются достаточной точностью, однако их реализация требует использования сложных в изготовлении, дорогостоящих и при этом требующих серьезных мер защиты (персонала) СВЧ-излучателей. Ввиду их опасности для человека использование подобных оригинальных устройств в лабораторной

практике вуза строго регламентировано и по этой причине крайне затруднено.

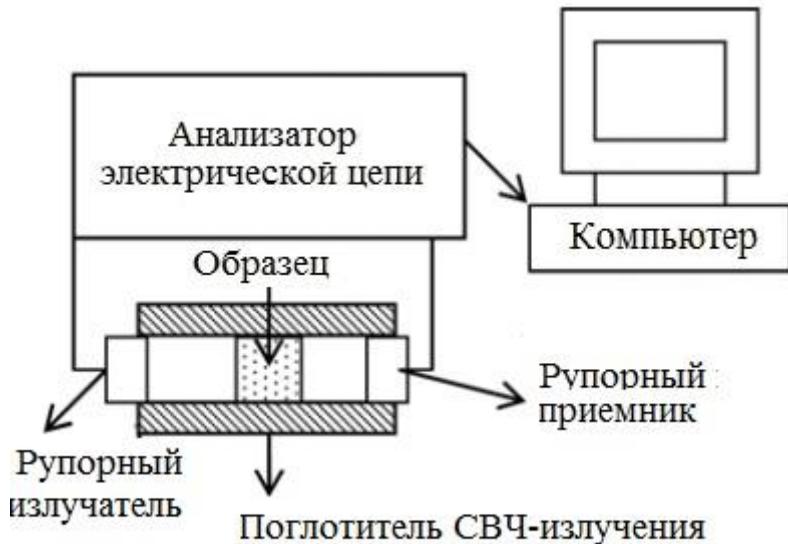


Рисунок 7.7 - Схематическая реализация метода, основанного на пропускании СВЧ-излучения через образец.

Поскольку целью данного параграфа является обоснованный выбор экспериментальной методики для изучения связи диэлектрической проницаемости зерна с его физико-технологическими свойствами, необходимо сопоставить описанные выше методики (рисунки 7.4 – 7.7) по совокупности критериев (показателей), отвечающих требованиям диссертационного исследования, технической безопасности, а также организационно-техническим возможностям университета.

В качестве критериев, характеризующих достоинства сравниваемых методов, выберем множество следующих: {Пригодность, Точность, Сложность реализации, Безопасность, Стоимость реализации}. Будем также считать их равноценными, т.е. наделим равными весами, поскольку здесь сложно выделить приоритетность. Существенное различие и несводимость этих критериев обуславливает необходимость их сопоставления с использованием методики ранжирования. Эта методика подразумевает присвоение каждому методу по каждому из показателей соответствующего числового значения – ранга. Чем выше уровень показателя,

тем выше ранг соответствующего метода. Ограничиваясь числовыми значениями рангов от 1 до 4 (т.к. сравниваются 4 метода), оценим каждый из сравниваемых методов измерения по каждому из выбранных показателей.

Существенно, что набор выбранных здесь показателей согласовывался с предметными специалистами, которые впоследствии использовались в качестве экспертов при назначении рангов. Если два или более из сравниваемых методов оказывались не различимыми по какому-то показателю, по этому показателю им присваивался одинаковый средний ранг. Результат выполненного ранжирования приведен в таблице 7.1.



Таблица 7.1 – Сравнительный анализ методик измерения диэлектрической проницаемости зерноматериалов по совокупности утилитарных показателей

Показатель	Пригодность	Точность	Сложность реализации	Безопасность	Стоимость	Итого
Метод						
Кондуктивный	2,5	2	4	4	4	16,5
Резонансный	2,5	4	3	3	3	15,5
Коаксиальный	2,5	2	1,5	1,5	1,5	9
Пропускания	2,5	2	1,5	1,5	1,5	9

Результаты сопоставления в таблице 7.1 свидетельствуют, что наилучшим для реализации целей магистерских исследований в рамках действующих ограничений является кондуктивный метод, превосходящий конкурентные по ряду показателей: сложность реализации, безопасность и стоимость. Следуя этому результату посвятим следующую главу конструированию, расчету, калибровке и тестированию конструкции, основанной на кондуктивном методе измерений ε .

Выводы:

1 На основе монографического анализа выявлены критичные для целей диссертационного исследования связи диэлектрических характеристик зерновых материалов с важными физико-технологическими параметрами. Осуществлена математическая формализация этих связей.

2 Изучены известные принципы, методы и средства измерения диэлектрической проницаемости материалов, в т.ч. зерно-материалов. На основе их сопоставления по ключевым показателям с использованием экспертных оценок выбрана инструментальная методика диссертационного исследования (на основе кондуктивного метода измерения ε).

Глава 8. Экспериментальная установка и методика измерений

Для реализации выбранной методики необходимо правильно рассчитать и сконструировать экспериментальную установку. Ниже описана конструкция установки для определения диэлектрической проницаемости зерновых культур в диапазоне низких

частот (порядка 1 кГц), а также ее отладка и калибровка. При конструировании были использованы методы физического и математического моделирования.

8.1 Конструкция и ее элементы

При проектировании установки ее конструкция, материалы и геометрические параметры измерительного конденсатора выбирались из соображений:

1) возможности помещать в измерительную ячейку (плоский засыпной конденсатор) зерноматериалы в достаточном количестве. При этом учитывался такой параметр, как размеры отдельно взятых зерен различных культур, что влияет на плотность прилегания зерновой массы к стенкам плоского конденсатора;

2) соответствия электрической емкости C измерительной ячейки диапазону выбранного многофункционального мультиметра;

3) безопасности и удобства длительного использования при экспериментальных исследованиях.

Измерительная установка включает в себя два блока: измерительную ячейку и электроизмерительный модуль.

В качестве материалов для конструкции плоского засыпного конденсатора (измерительной ячейки установки) были выбраны жестяные листы толщиной 0,5 мм, листы и рейки ДСП, необходимые крепежные изделия в виде саморезов. Измерительная ячейка представила собой плоский конденсатор, имеющий жестяные стенки с двухслойным лакокрасочным покрытием для достижения необходимой электроизоляции, соединенные между собой двумя деревянными рейками и находящиеся на основе из ДСП.

В виде электроизмерительного модуля системы выступает модифицированный мультиметр Ф4320. Прибор R-L-C Ф4320 предназначен для измерений емкости на частоте 1000 Гц (1 кГц) и активной составляющей комплексного сопротивления емкостного характера по параллельной схеме замещения, индуктивности и активной составляющей комплексного сопротивления индуктивного характера по последовательной схеме замещения, активного сопротивления. Ф4320 имеет небольшие габаритные размеры (115×215×90 мм, масса 1.5 кг), что позволяет использовать его не только в лабораторных, но и полевых условиях. Однако при включении данного прибора в предлагаемую систему необходимо учитывать, что непосредственное использование этого прибора неудобно вследствие необходимости двуполярного (± 9 В) питания от давно снятых с производства аккумуляторных бата-

рей 7Д-01 (рисунок 8.1). Продолжительность измерений от зарядки до зарядки ограничивается при этом интервалом 1,5–2 часа.

Схема электрическая принципиальная прибора Ф4320

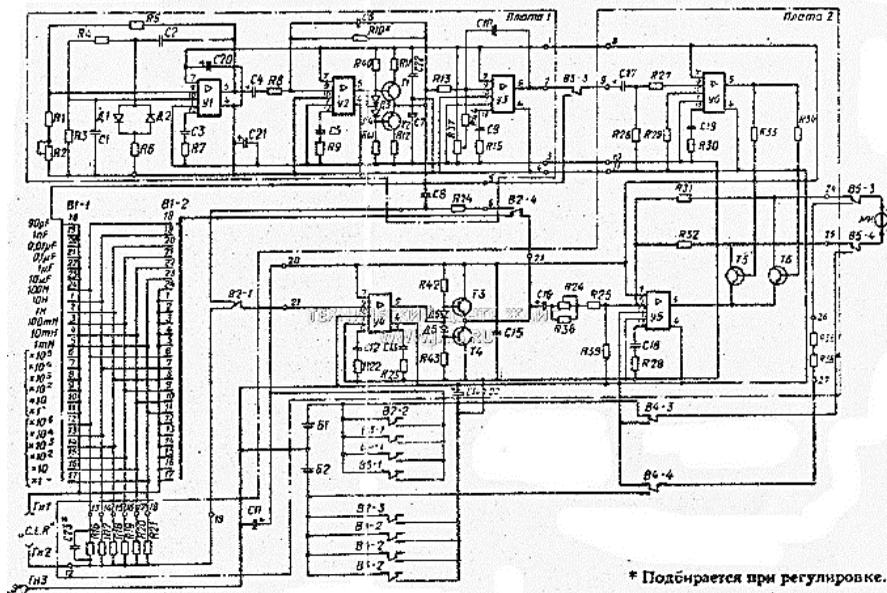


Рисунок 8.1 - Схема электроизмерительного прибора Ф4320

Устранить указанное несовершенство и обеспечить длительные лабораторные измерения призвана специально разработанная система двуполярного питания на базе стандартного блока для ноутбука (+19 В). Эта система, схематизированная на рисунке 8.1, представляет собой делитель напряжения с током потребления ~ 100 мА. Единственным недостатком предложенного технического решения представляется низкий ~ 25% коэффициент полезного действия, обусловленный необходимостью стабилизировать питание прибора Ф4320 в широком диапазоне режимов. Схема модернизированного источника питания прибора Ф4320 показана на рисунке 8.2.

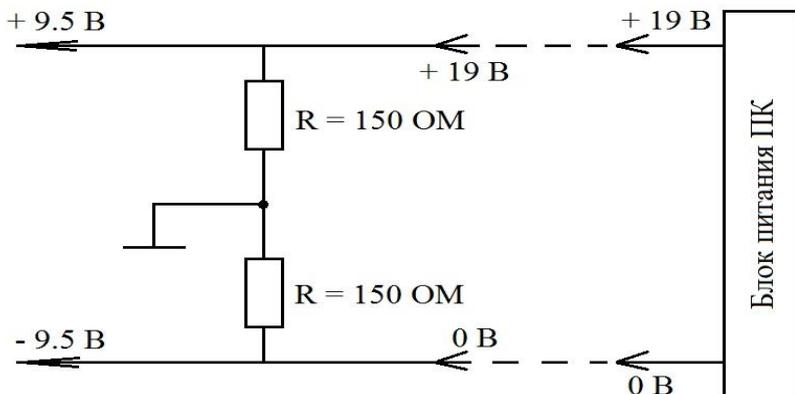


Рисунок 8.2 - Схема двуполярного источника питания на основе делителя напряжения

8.2 Расчет параметров измерительной ячейки и оценка методической погрешности

На основании предварительной инженерной проработки и конструкторского расчета размеры ячейки составляют 420×270×10 мм. Суммарная толщина боковых стенок 20 мм. Объем засыпки – 1,08 л. Рассчитанная согласно емкости измерительного конденсатора C составляет 122 пФ, в том числе 27 пФ – паразитная (рисунки 8.3, 8.4).

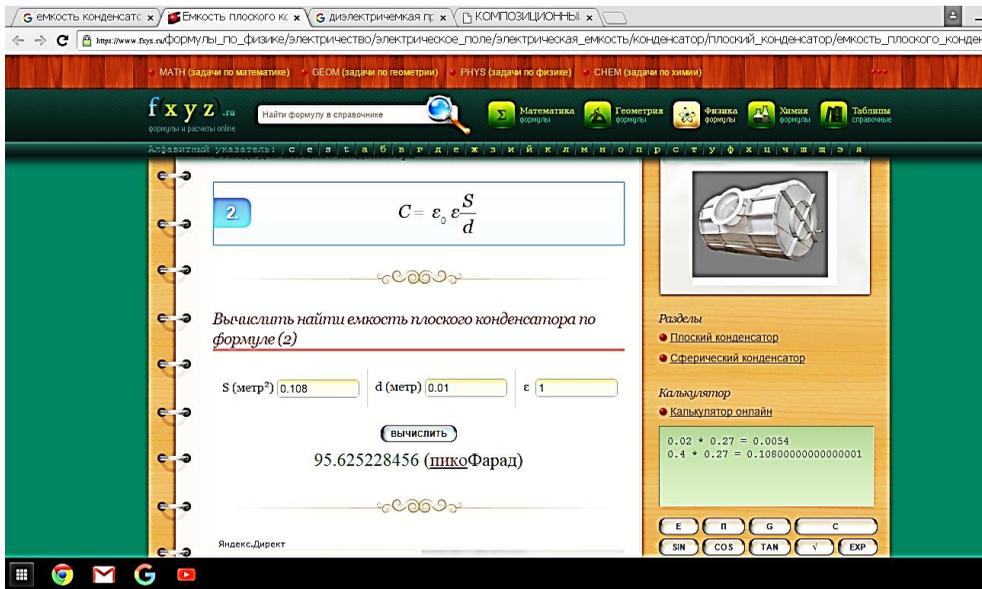


Рисунок 8.3 – Предварительная оценка параметров измерительной ячейки (емкость рабочего объема)

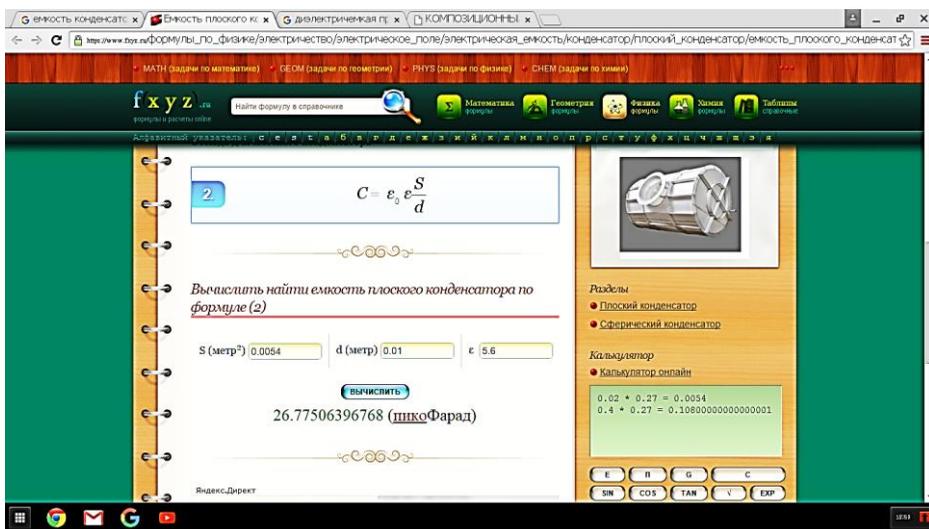


Рисунок 8.4 - Предварительная оценка параметров измерительной ячейки (паразитная емкость)

8.3 Калибровка экспериментальной установки

Процедура калибровки нацелена на приведение в соответствие показаний измерительного прибора и/или комплекса приборов с действительными значениями измеряемого параметра (измеряемых параметров). При этом обычно используют различные эталоны измеряемой величины или же эталонные измерительные приборы, обеспечивающие необходимые измерения с заданной степенью точности.

В нашем случае калибровке подлежат оба элемента конструкции – измерительная ячейка и электроизмерительный тракт. Соответствующие методы и результаты описаны в следующих параграфах.

8.3.1 Калибровка измерительной ячейки

Поскольку теоретический расчет параметров измерительной ячейки не представляется достаточно надежным в рамках требуемой точности измерений, нами осуществлена ее непосредственная калибровка, причем двумя способами. В первом случае измерительная емкость плотно заполнялась древесно-стружечной плитой (ДСП), во втором – водой, помещенной в полиэтиленовый пакет. Использование пакета мотивировано, с одной стороны, необходимостью исключить активную проводимость между стенками емкостного датчика, а с другой, желанием экономить зерно при последующих измерениях влажности.

Методически первый способ калибровки состоял в постепенном введении ДСП внутрь измерительной ячейки. В первом опыте измерительная ячейка (рисунок 8.5) была пуста, в каждом последующем заполнялась на 0,1 объема материалом ДСП, после чего измерялась ее электрическая емкость.

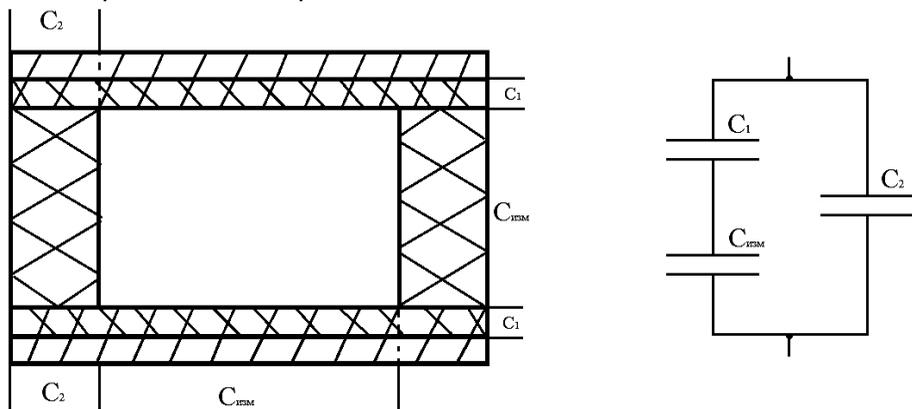


Рисунок 8.5 - Конструкция измерительной ячейки (слева) и эквивалентная электрическая схема (справа)

Результаты измерения емкости ячейки, заполняемой ДСП, приведены в таблице 8.1. Затем эти данные обрабатывались методами математической статистики с учетом эквивалентной электрической схемы ячейки (рисунок предыдущий).

Таблица 8.1
Данные непосредственных измерений емкости ячейки в зависимости от степени ее заполнения материалом ДСП

№ опыта	Доля заполненной измерительной емкости V_n/V	Фактический объем, заполненный ДСП с учетом объема боковых стенок, см ³	C_n , пФ
1	0	54	115
2	0.1	157	125
3	0.2	259	130
4	0.3	362	135
5	0.4	464	142
6	0.5	567	152
7	0.6	670	157
8	0.7	772	170
9	0.8	875	177
10	0.9	977	185
11	1.0	1080	190

Данные таблицы 8.1 свидетельствуют о практически линейной зависимости $C(V)$, что подтверждается высоким коэффициентом корреляции – $\text{corr}(C(V), V) = 0,997$ (рисунок 8.7). Это обстоятельство служит основанием для линейной регрессии полученной в эксперименте зависимости. Результаты соответствующего анализа показаны на рисунке 8.6.

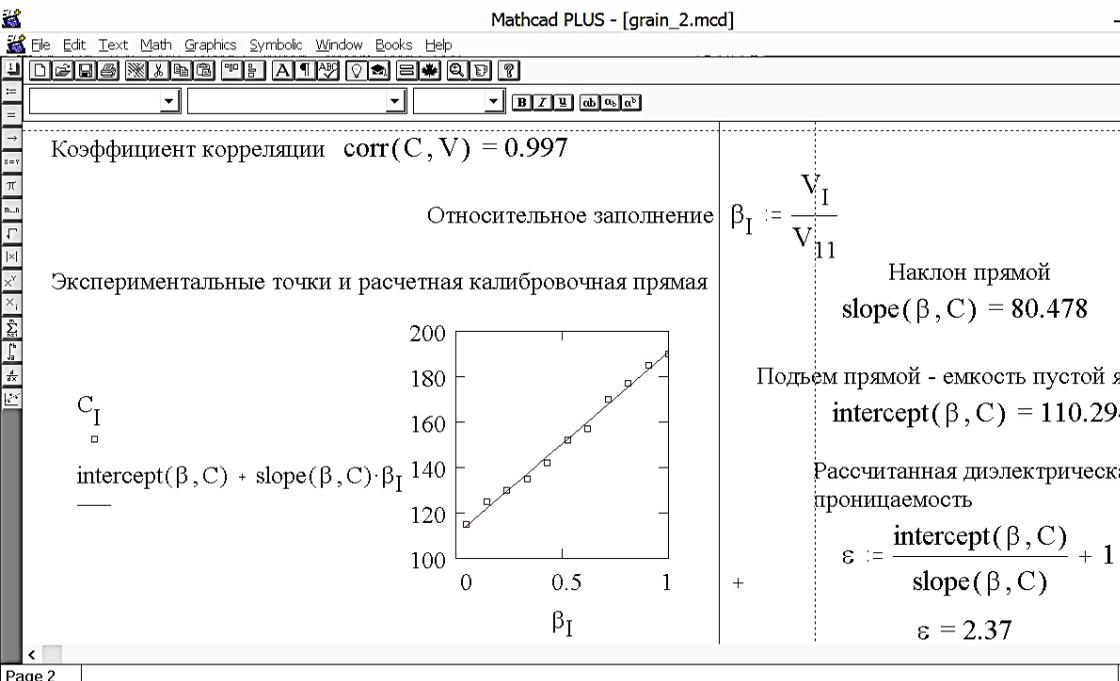


Рисунок 8.6 – Статистическая обработка данных, полученных в калибровочном эксперименте с ДСП, средствами MathCAD

В соответствии с результатами расчета (рисунок сверху) рабочая электрическая емкость ячейки составляет 110 пФ, а величина диэлектрической проницаемости вводимой в ячейку ДСП – 2,37. Эти данные хорошо согласуются с проектным расчетом (рабочая электрическая емкость оценена в 122 пФ, из которых 27 пФ – паразитная, а справочное значение $\epsilon_{\text{дсп}} = 2,0 - 2,6$).

Для наших целей крайне важна также мера погрешности измерений, обусловленная неточным знанием электрических параметров ячейки. Ее можно оценивать средним и максимальным отклонением экспериментальных точек от идеализированной калибровочной кривой (рисунок сверху). Соответствующие вычисления (рисунок 8.7) показывают, что эти погрешности составляют 1.4 и 2.5% соответственно.

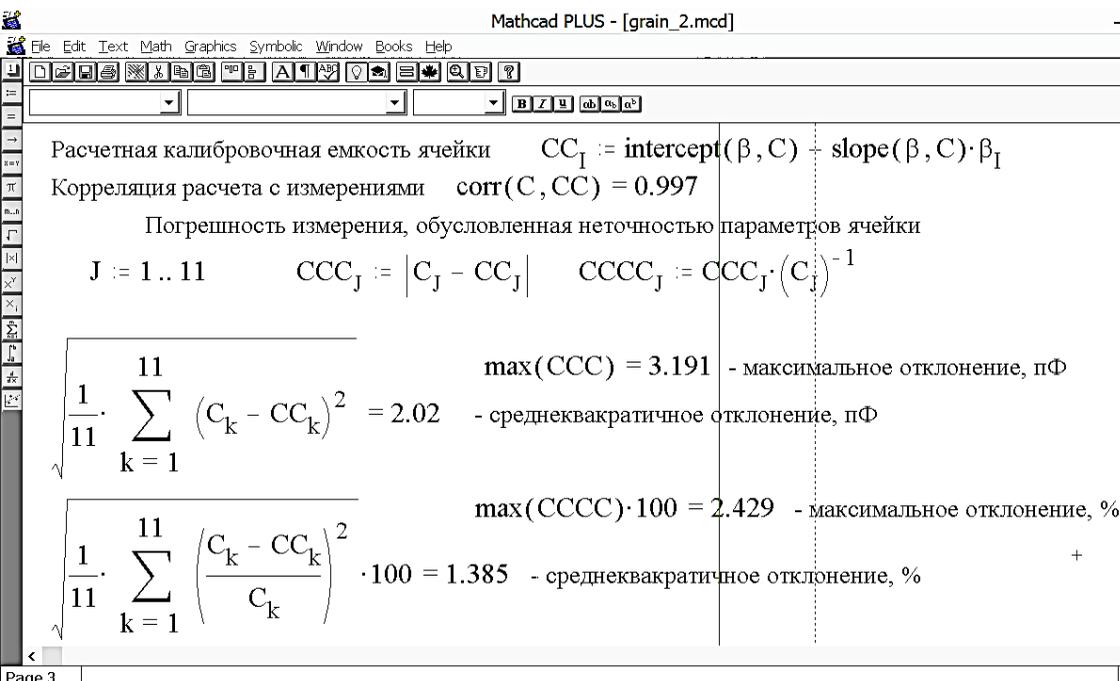


Рисунок 8.7 - Оценка погрешности при экспериментальном определении параметров измерительной ячейки

Попытка откалибровать измерительную ячейку при помощи воды, используя двойной полиэтиленовый пакет, оказалась не столь успешной. Хотя диэлектрическая проницаемость самого пакета $\epsilon_{(C_2H_2)_n}$ близка к единице, и заполнение измерительной ячейки 17 пакетами привело к увеличению ее емкости лишь на 2–3 пФ, результаты калибровки водой, сведенные в таблицу 8.2, дают очень далекое от реальности значение $\epsilon_{H_2O} = 25\text{--}35$ (рисунки 8.8, 8.9). Кроме того, в ходе эксперимента отмечался медленный рост емкости со временем.

Таблица 8.2 – Первичные данные эксперимента по калибровке измерительной ячейки водой: второе значение в третьем столбце соответствует данным, полученным при откачивании воды

№ опыта	Объем залитой воды V , мл	Емкость заполненной ячейки C , пФ
1	0	115 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 120
2	50	155 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 180
3	100	220 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 260
4	150	280 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 360
5	200	340 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 500
6	250	410 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 640
7	300	530 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 720
8	350	640 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 735
9	400	730 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 780
10	450	825 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 1050
11	500	920 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 1150
12	550	1050 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 1200
13	600	1250 $\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$ 1250

	при заполнении водой	при откачке воды	среднее значение
наклон прямой	$\text{slope}(\alpha, C_f) = 1.95 \cdot 10^3$	$\text{slope}(\alpha, C_b) = 2.156 \cdot 10^3$	$\text{slope}(\alpha, C) = 2.053 \cdot 10^3$
емкость пустой ячейки	$\text{intercept}(\alpha, C_f) = 28.736$	$\text{intercept}(\alpha, C_b) = 89.231$	$\text{intercept}(\alpha, C) = 58.98$
диэлектрическая проницаемость воды	$\frac{\text{slope}(\alpha, C_f)}{\text{intercept}(\alpha, C_f)} + 1 = 68.856$	$\frac{\text{slope}(\alpha, C_b)}{\text{intercept}(\alpha, C_b)} + 1 = 25.16$	$\frac{\text{slope}(\alpha, C)}{\text{intercept}(\alpha, C)} + 1 = 3$

Рисунок 8.8 – Числовой результат математической обработки данных таблицы 8.2

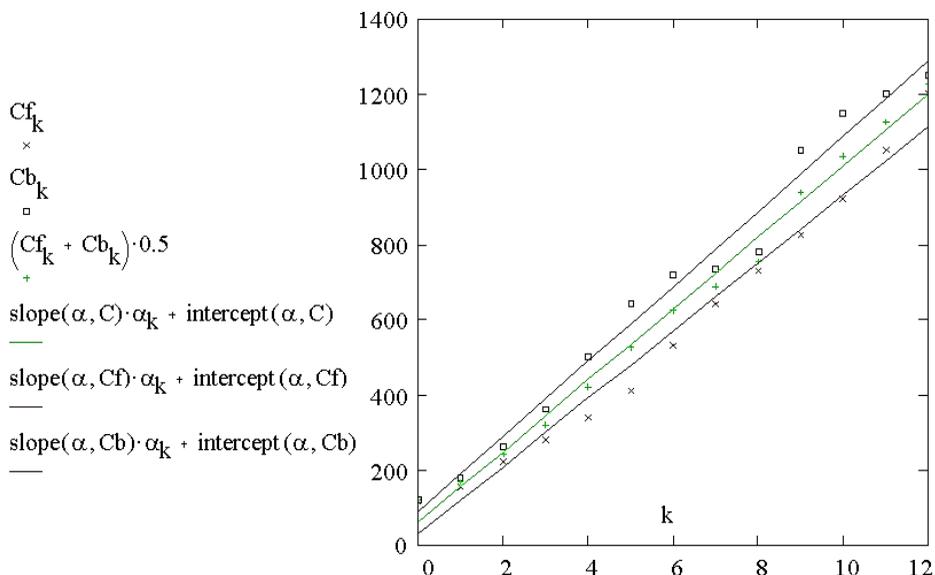


Рисунок 8.9. Визуализация данных таблицы 8.2 и результатов линеаризации: красным – при заполнении ячейки водой, синим – при откачке воды, зеленым – среднее значение

Поскольку стабилизация показаний измерителя емкости Ф4320 требовала определенного времени, наиболее достоверным следует признать результат при $t \rightarrow \infty$, обозначенный на рисунке 8.9 синим цветом. Соответствующие значения емкости пустой ячейки и диэлектрической проницаемости воды равны 89 пФ и 25 соответственно. Это означает, что в использованной нами модели измерений и обработки данных имеются существенные неучтенные факторы.

Тщательный анализ этого результата позволяет заключить, что использование для измерений двойного полиэтиленового пакета принципиально усложняет схему измерений, внося в нее дополнительную, последовательную с измерительной ячейкой, паразитную емкость. Схематизация и электрический эквивалент уточненной таким образом измерительной системы приведены на рисунке 8.10.

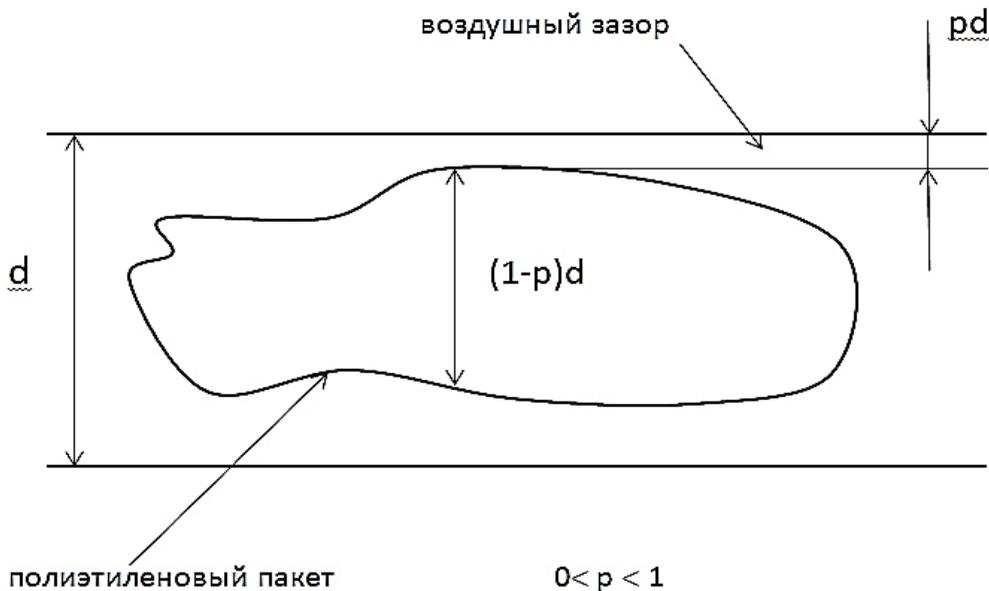


Рисунок 8.10 – Причины и параметры, влияющие на ошибочность калибровки измерительной ячейки водой

Если доля зазора между пластинами, заполненная воздухом и/или стенками полиэтиленового пакета равна $p = \Delta/d$ (рисунок 8.10), то паразитная емкость $C_{\text{пар}} \sim (pd)^{-1}$. При этом емкость измерительной ячейки, заполненной водой, $C_{\text{изм}} \sim 81 \cdot [(1-p)d]^{-1}$, а емкость последовательно соединенных конденсаторов $C_{\text{пар}} \parallel C_{\text{изм}}$ может быть заменена эффективной емкостью $C_{\text{эфф}}$. Поскольку $C_{\text{эфф}}^{-1} = C_{\text{пар}}^{-1} + C_{\text{изм}}^{-1}$, эффективная диэлектрическая проницаемость такого составного конденсатора $\epsilon_{\text{эфф}}$ дается известной из электротехники формулой:

$$\frac{1}{\epsilon_{\text{эфф}}} = \frac{p}{\epsilon_{\text{пар}}} + \frac{1-p}{\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}}. \quad (8.1)$$

Знание величин $\epsilon_{\text{пар}} \approx 1$ и $\epsilon_{\text{H}_2\text{O}} \approx 81$ позволяет, решив уравнение (8.1), относительно p для экспериментально опреде-

ленной $\varepsilon_{\text{эфф}} \approx 25\text{--}35$, определить величину зазора. Полученное нами значение $\rho \approx 0,3 \div 0,4$ мм хорошо согласуются с наблюдаемым в опытах.

Важным практическим следствием этого результата является неудобство измерений диэлектрической проницаемости паке-тированного зернового материала при помощи разработанных нами установки и методики. Другой результат состоит в том, что для обеспечения качества измерений диэлектрической проницаемости следует обеспечивать плотную упаковку зерновых. Как следствие, мелкое, плотно пакуемое зерно представляется предпочтительным с точки зрения надежности экспериментальных данных.

8.3.2 Калибровка комбинированного прибора Ф 4320

Ниже описывается процедура калибровки электроизмерительного модуля системы на основе модифицированного мультиметра Ф4320.

Калибровка осуществлялась путем измерения емкости эталонных конденсаторов с последующим сопоставлением результатов этих измерений с заявленными номиналами. Результаты интерпретировались с использованием известных методов математической статистики. Фрагмент исходных данных для калибровки двух низших диапазонов прибора Ф4320 показан на рисунке 8.11. В первой колонке приведены заявленные номиналы эталонных конденсаторов, во второй – погрешность изготовления в %, в третьей – результаты измерения прибором Ф4320.

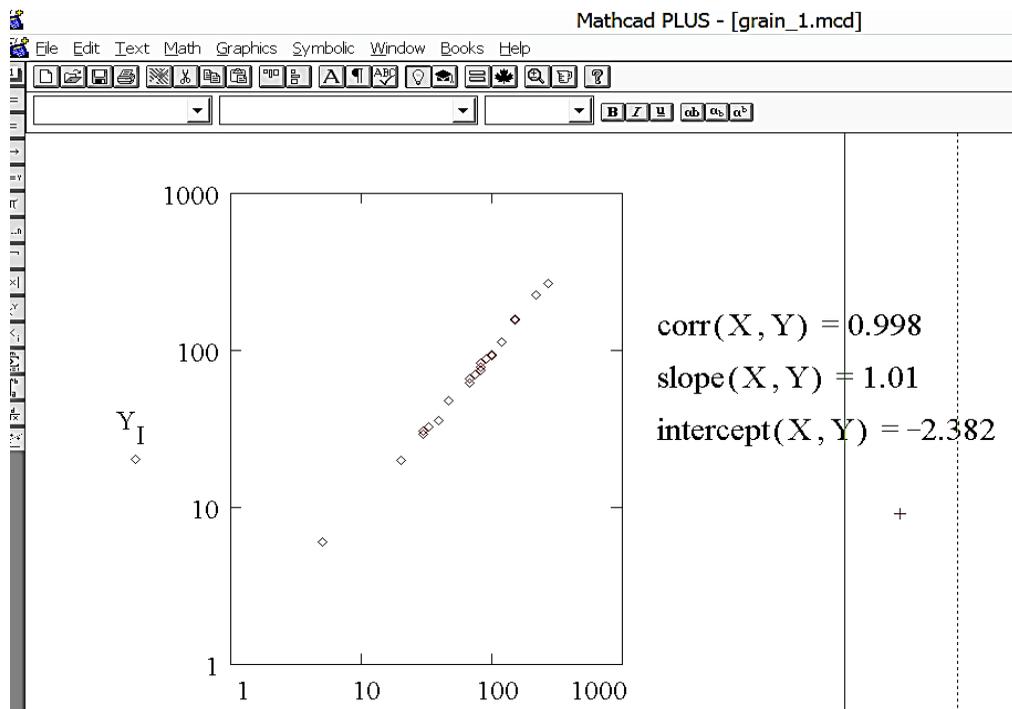


Рисунок 8.12 – Статистические показатели качества измерений емкости конденсатора посредством модифицированного прибора Ф4320

Наряду с этой нижней оценкой погрешности измерений приведем верхнюю, для чего следует учесть вероятную погрешность номиналов конденсаторов, которые мы выбрали в качестве эталонов. На рисунке 8.13 приведены результаты сравнения отно-

сительной погрешности измерения емкости всех эталонных конденсаторов с допустимым отклонением их номинала (см. 2-й столбец матрицы на рисунке 8.11). Они свидетельствуют, что измеренное прибором Ф4320 значение емкости отличается от заявленного производителем на величину, меньшую допустимой технологической погрешности. Таким образом, качество модифицированного измерителя емкости удовлетворяет нашим целям. Даже в худшем случае погрешность измерения и изготовления в совокупности не превышает 10%.

Заявленная производителем погрешность измерения емкости составляет 5%.

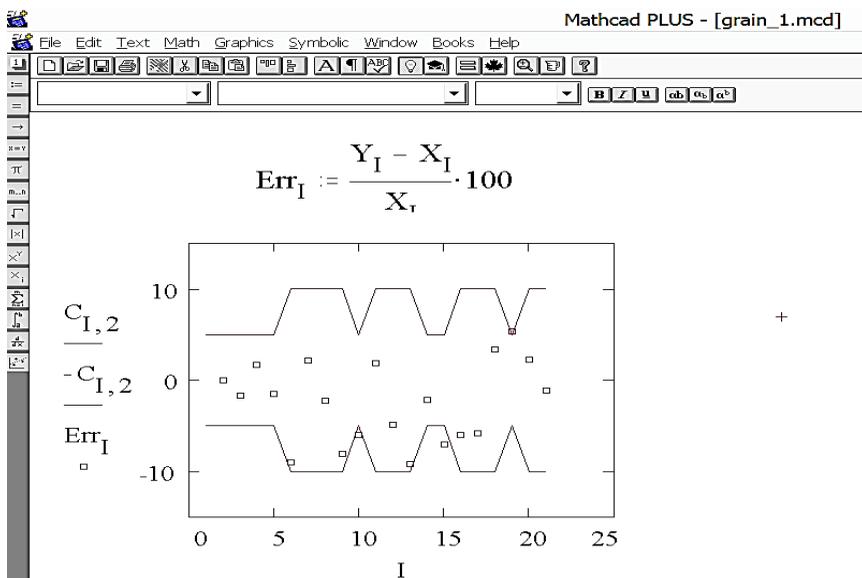
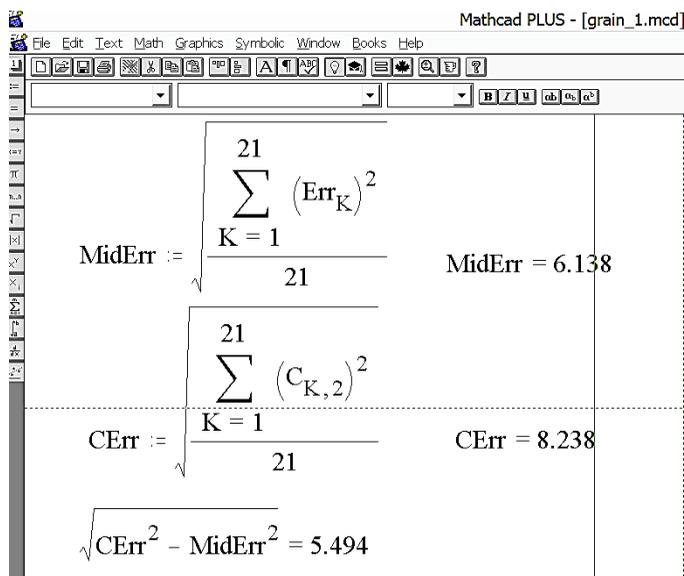


Рисунок 8.13 – Сопоставление допустимой погрешности емкости эталонных конденсаторов (красные линии) и фактически зафиксированное прибором отклонение емкости от номинала (синие точки)

Более тонкий статистический анализ показывает, что средняя погрешность измерения прибором составляет 6,1%, а средняя погрешность фактического номинала эталонных конденсаторов – 8,2%. Следовательно, вероятная максимальная погрешность модифицированного нами измерителя составляет 5,5% (рисунок 8.14).



Mathcad PLUS - [grain_1.mcd]

File Edit Text Math Graphics Symbolic Window Books Help

$$\text{MidErr} := \sqrt{\frac{\sum_{K=1}^{21} (\text{Err}_K)^2}{21}} \quad \text{MidErr} = 6.138$$

$$\text{CErr} := \sqrt{\frac{\sum_{K=1}^{21} (C_{K,2})^2}{21}} \quad \text{CErr} = 8.238$$

$$\sqrt{\text{CErr}^2 - \text{MidErr}^2} = 5.494$$

Рисунок 8.14 – Верхняя оценка относительной погрешности измерения емкости модифицированным прибором Ф4320

Таким образом, основным результатом данного параграфа представляются положительный ответ на вопрос о целевом соответствии модифицированного прибора Ф4320 и успешно осу-

ществленные процедуры его калибровки и оценки погрешности измерений диэлектрической проницаемости зерна вследствие несовершенства электроизмерительной подсистемы

8.4 Усовершенствованный модуль электрических измерений для определения диэлектрической проницаемости зерновых материалов

Естественными требованиями к электрическим измерениям в диссертационном исследовании являются высокая точность, а также надежность и простота. Действенным способом их достижения представляется интеграция измерительного устройства и ЭВМ, обрабатывающей данные, как это отображено на рисунке 8.15. По сравнению с описанной выше реализацией проекта с использованием прибора Ф4320 интегрированная с ЭВМ цифровая измерительная система исключает перенос данных с использованием органов чувств и подвижности человека, внешних промежуточных носителей информации. Такой подход не только совершенствует, но также интенсифицирует и удешевляет измерения.

Примером реализации электронного измерительного модуля в схеме эксперимента на рисунке 8.15 служит разработка Ю.С.Магда.

Устройства на рисунке 8.15 измеряет емкость конденсатора C_x , используемого в качестве определяющего период колебаний мультивибратора на таймере 1006ВИ1.

Емкость C_x задается формулой:

$$C_x = 1,443 T / (R_A + 2 R_B) , \quad (8.3)$$

где: T – период колебаний мультивибратора.

Для измерения периода T вывод 3 микросхемы таймера следует соединить с контактом 15 порта принтера ПЭВМ, а общий провод схемы – с контактом 24 этого порта. Приведенные на рисунке 8.15 значения резисторов R_A и R_B обеспечивают точность измерения емкости C_x в интересном для нас диапазоне $100 \div 1000$ пФ с погрешностью $4 \div 8$ %. Следует отметить, что для малых значений $C_x \sim 10 \div 30$ пФ погрешность измерения достигает 15 % – за счет входной емкости микросхемы 1006ВИ1.

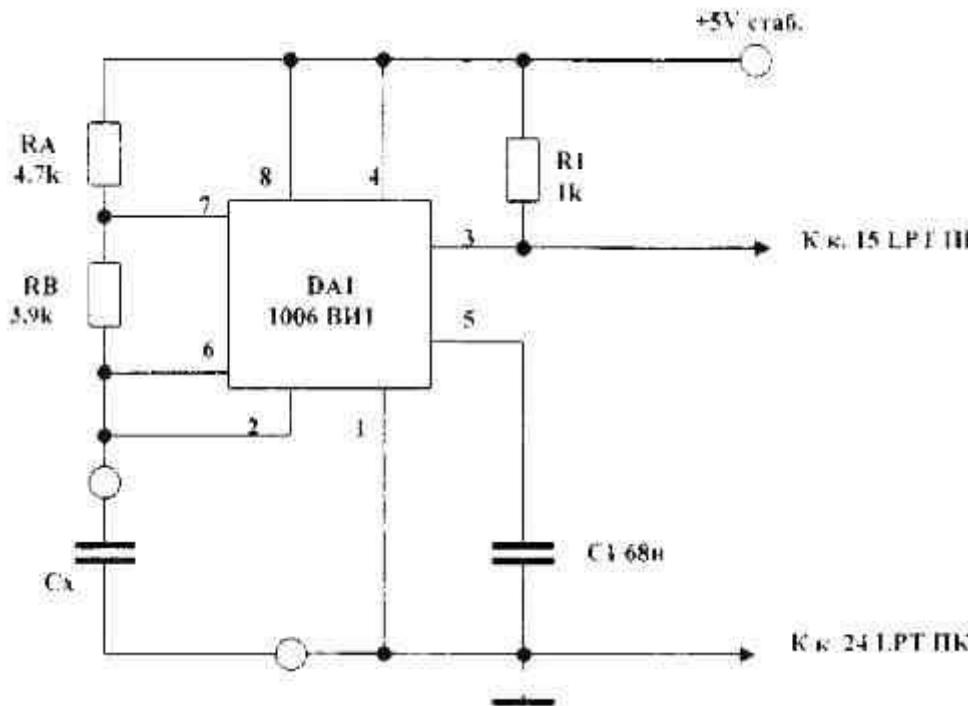


Рисунок 8.15 – Схема измерителя емкости конденсаторов

Как отмечалось ранее, принципиальным элементом автоматизированных электронных измерительных систем является программное обеспечение. В описываемом измерителе определяется частота генерации мультивибратора. Практически измеряется количество импульсов мультивибратора на контакте 15 порта принтера персонального компьютера в течение 1 с. Затем на основе соотношения

$$T = 1 / F, \quad (8.4)$$

где F – частота генерации, рассчитывается величина C_x [пФ]. Для квантования времени используется внутренний таймер персонального компьютера, который генерирует 18,2 импульса за 1 с. Программа написана на языке Borland Pascal v 7 0, компилируется как DOS приложение реального режима и может работать в среде MS DOS и MS Windows. Текст программы приведен на рисунке 8.16.

```

uses WinDos
var
Int1Cold : Pointer;
Counter, Flag : Word
R : TRegisters
Ticks, Capacity : Longint
RA, RB, K : Real;
{$F+}
procedure Int1Cnew; interrupt;
begin
    if Counter < 19 then
        Inc(Counter)
    else
        Flag:= 1;
end;
<$F-}
procedure ReadPort; assembler;
asm
    mov     dx,379h
@wait_1
    in al,  dx
    test   al, 08h
    jz     @wait_1
@wait_0
    in al,  dx
    test   al, 08h
    jnz    @wait_0
end;
begin
RA:=4.7;
RB:=3900;
Flag:=0;
Counter:=0;
Ticks:=0;
K:=1.443*1000000000/(RA+2*RB);
GetIntVec ($1C Int1Cold);
SetIntVec ($1C Addr (Int1Cnew));
while Flag <> 1 do
begin
ReadPort;
Inc(Ticks);
end;
SetIntVec ($01C, Int1Cold);
Capacity:=Trunc(K/(Ticks*1.043));
writeln('Измеренная емкость
равна',Capacity,'pF);
    
```

end.

Рисунок 8.16 – Текст управляющей программы для измерителя емкости конденсаторов на микросхеме 1006ВИ1

Серьезным недостатком описанной выше электронной конструкции является ее привязка к порту принтера LPT, который отсутствует на современных персональных ЭВМ.

Альтернативные схемные решения, адаптированные к USB-портам современных компьютеров оказываются существенно более сложными как в аппаратной (пример показан на рисунке 8.17), так и в программной части.

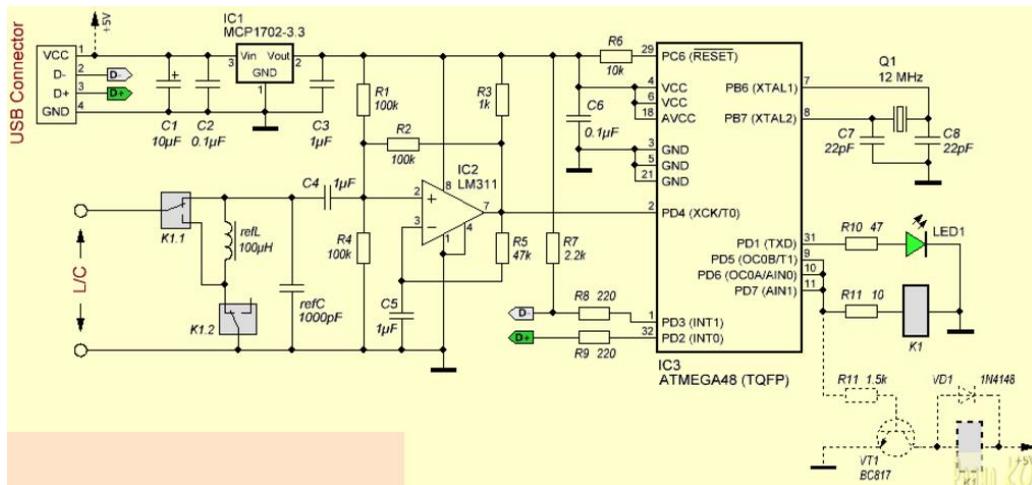


Рисунок 8.17 – Измеритель емкости и индуктивности: схемотехническое решение

Поэтому особую ценность представляет *идея использовать* в качестве электроизмерительного устройства собственные компоненты современной ЭВМ. Ее реализуемость обеспечивается наличием во всех современных ЭВМ *звуковых карт* (ЗК), объединяющих два практически идентичных цифро-аналоговых преобразователя (ЦАП) – линейный выход звуковой карты, а также (в стационарных компьютерах два, в ноутбуках два или один) аналого-цифровых преобразователей (АЦП). Эти устройства позволяют эффективно преобразовывать аналоговый электрический

сигнал в цифровой и наоборот.

Типовая схема измерения емкости (индуктивности и сопротивления) посредством звуковой карты показана на рисунке 8.18. Генерируемый сигнал переменного тока с выхода (Line-Out) поступает на линейный вход (Line-In). По одному каналу сигнал с Line-Out идет напрямую на левый линейный вход ЗК – т.н. эталонный сигнал. По другому каналу этот же выходной сигнал поступает на правый линейный вход через элемент, электрические параметры которого подлежат определению.

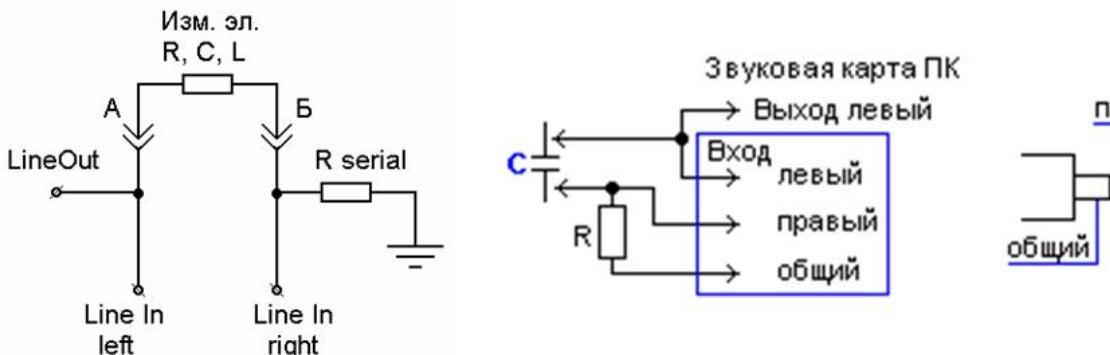


Рисунок 8.18 – Электрическая схема, схема подключения и разводка штекера измерительного моста к звуковой карте ЭВМ для определения сопротивления, емкости и индуктивности

Практически измерительная цепь является адаптером к ЗК ЭВМ и состоит из двух шнуров со стандартными штекерами, разводка которых приведена на рисунке 8.18.

Двухканальность схемы призвана обойти неполноценность АЦП звуковых карт, в которых отсутствует высокоточная калибровка по уровню. Дифференциальная методика измерений (рисунок 8.19) полностью нивелирует этот недостаток.

В измерительную схему также вводится дополнительный резистор (R_{serial}), который монтируется в соединительные провода и соединяется с землей (корпусом). Сигнал, прошедший через измеряемый элемент, ослабится по амплитуде и сдвинется по фазе по сравнению с эталонным, что иллюстрируется рисунок 8.19.

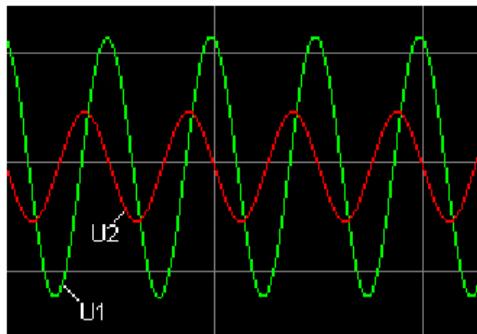


Рисунок 8.19 – Изменение амплитуды и фазы сигнала, прошедшего через исследуемый элемент электрической цепи: U_1 – исходный, U_2 – преобразованный

Параметры исследуемого элемента связаны известными в электротехнике соотношениями с параметрами исходного сигнала, прочих элементов цепи и собственно ЗК компьютера. Для их определения в общем случае следует решать систему алгебраических уравнений, сложность которой зависит от диапазона измерений, требований точности и ряда прочих особенностей.

Следует отметить, что из имеющегося в свободном доступе программного обеспечения измерений большинство оказываются неработоспособными в интересующем нас диапазоне измерений емкости C . Кроме того, все они имеют закрытый код, что исключает их адаптацию под непосредственное измерение диэлектрических свойств зерноматериалов на нашей установке. Поэтому разработка адекватной предметным исследованиям математической модели автоматизированного определения емкости измерительной ячейки и на ее основе диэлектрической проницаемости зерноматериалов является одной из важнейших задач диссертационного исследования.

Схемотехнической реализации автоматизированных измерений диэлектрической проницаемости зерна ϵ , ее программной поддержке и интеграции в разрабатываемую систему посвящен следующий параграф.

8.4.1 Техника измерения емкости засыпного конденсатора с помощью звуковой карты ЭВМ

Реализация измерительного щупа приведена на рисунке 8.20. В качестве рабочих параметров системы выбраны частота генерации $f = 10$ кГц и сопротивление добавочного резистора R_{serial} , обозначаемого далее как R , 10 кОм.



Рисунке 8.20 – Вид измерительного адаптора

Значение частоты генерации обусловлено тем обстоятельством, что при изменении емкости измерительной ячейки C в диапазоне $100 \div 1000$ пФ следует обеспечивать вариацию коэффициента ослабления сигнала U_2/U_1 в диапазоне как, минимум, 10 %. Такое требование связано с тем, что при меньшей чувствительности параметров измерительной цепи к емкости измерительной ячейки, характеризуемой величиной $d \ln(U_2/U_1)/d \ln C$, разрядность АЦП звуковой карты, шум усилителей и нестабильность характеристик системы в целом не позволят обеспечить необходимую точность измерений. Расчет частоты генерации f выполнен методом подбора параметра в специализированной среде Electronics Workbench (рисунок 8.21).

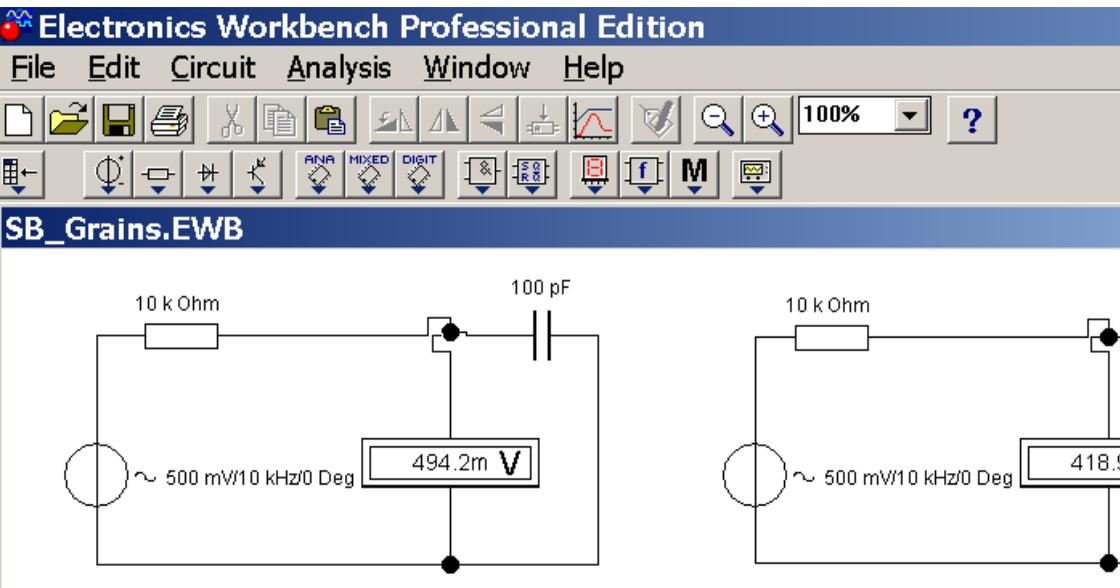


Рисунок 8.21 – Расчет добавочного резистора в среде Electronics Workbench

Выбранное значение является максимально допустимым в том смысле, что его увеличению препятствуют теорема Котельникова в сочетании с максимальной частотой оцифровки стандартных ПК ЭВМ ($f_{\text{оцифр}} = 44.1$ кГц). Упомянутая теорема ограничивает синтез цифровых сигналов частотным диапазоном $0 \div f_{\text{оцифр}}/2$. Однако даже при выбранном значении рабочей частоты $f = f_{\text{оцифр}}/4.41$ сформированный сигнал отличается от синусоидального (см. рисунок 8.22), т.е. содержит много высших гармоник.

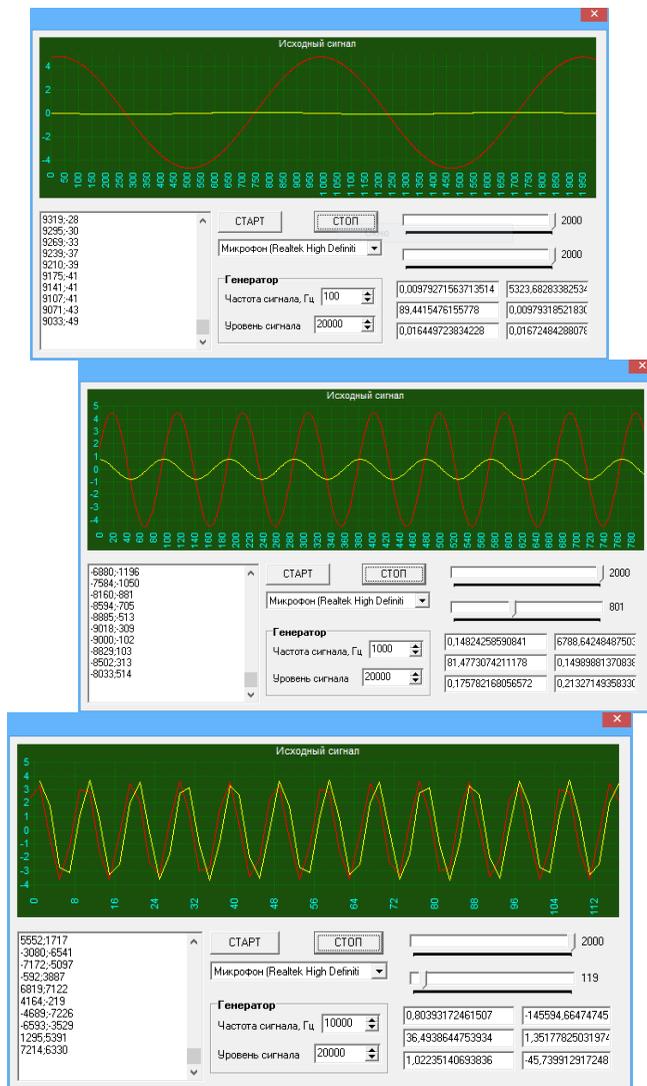


Рисунок 8.22 – Форма зондирующего электрического сигнала, сгенерированного звуковой картой ЭВМ: *а* – частота $f=100$ Гц, *б* – 1 кГц, *в* – 10 кГц

Соответствующее спектральное разложение для выборок зондирующего сигнала длиной 3, 10 и 100 периодов приведено на рисунок 8.23-8.24.

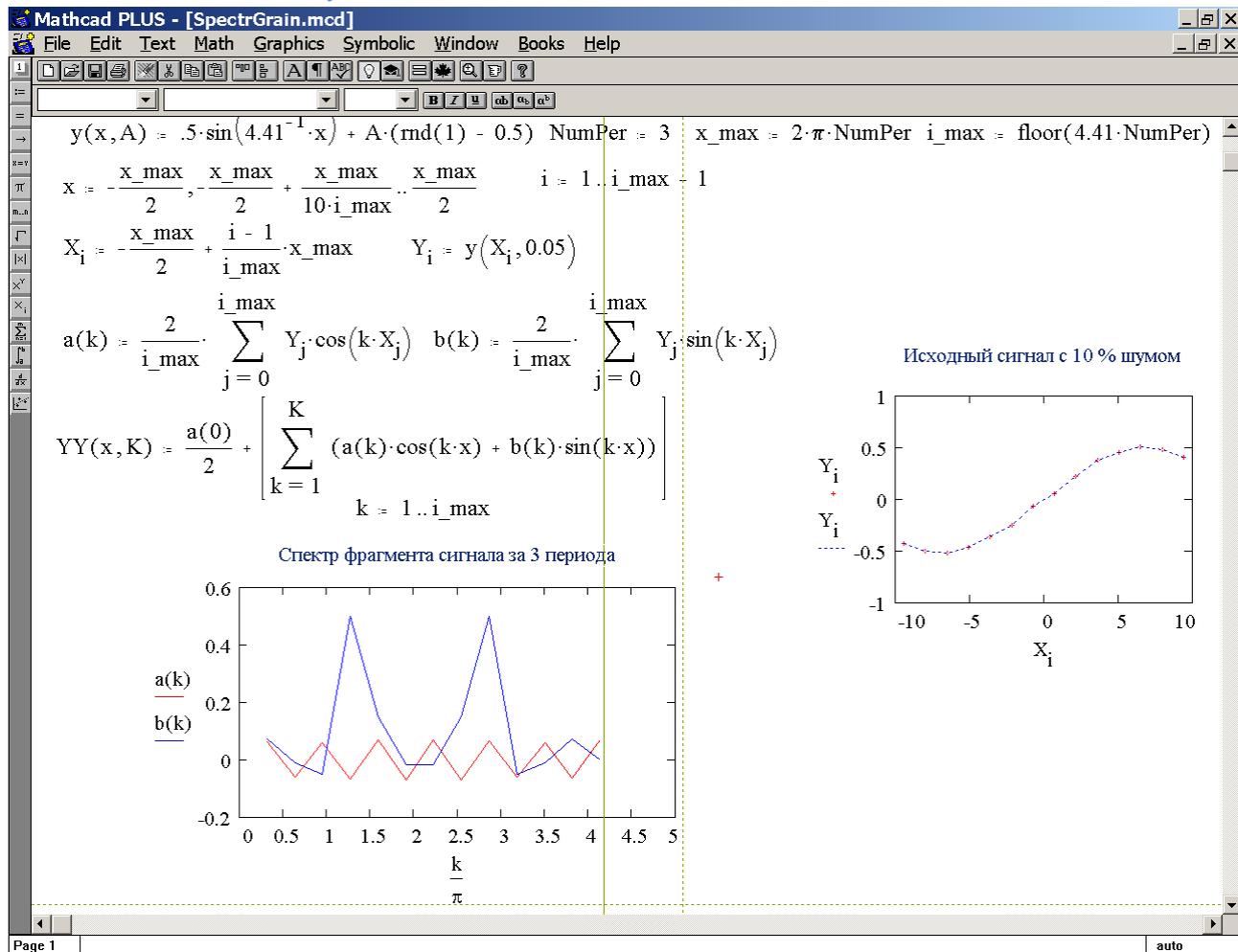




Рисунок 8.23 – Цифровой квазисинусоидальный сигнал частотой $f_{\text{цифр}}/4.41$ и его разложение на гармоники (спектр) при анализе трех периодов

Представленные на этом рисунке данные свидетельствуют о существенной ангармоничности зондирующего сигнала при выбранной частоте генерации: краткосрочные наблюдения (рисунок 8.24) выявляют высокий уровень третьей гармоники (ее природа в замене гладкой нечетной функции ступенчатой), а долгосрочные – четвертой (ее частота близка к $f_{\text{цифр}}$).



Mathcad PLUS - [SpectrGrain.mcd]

File Edit Text Math Graphics Symbolic Window Books Help

$y(x, A) = .5 \cdot \sin(4.41^{-1} \cdot x) + A \cdot (\text{rnd}(1) - 0.5)$ NumPer := 10 x_max := $2 \cdot \pi \cdot \text{NumPer}$ i_max := floor(4.41 · NumPer)

$x = -\frac{x_{\max}}{2}, -\frac{x_{\max}}{2} + \frac{x_{\max}}{10 \cdot i_{\max}}, \dots, \frac{x_{\max}}{2}$ i = 1..i_max + 1

$X_i = -\frac{x_{\max}}{2} + \frac{i-1}{i_{\max}} \cdot x_{\max}$ $Y_i = y(X_i, 0.05)$

$a(k) = \frac{2}{i_{\max}} \cdot \sum_{j=0}^{i_{\max}} Y_j \cdot \cos(k \cdot X_j)$ $b(k) = \frac{2}{i_{\max}} \cdot \sum_{j=0}^{i_{\max}} Y_j \cdot \sin(k \cdot X_j)$

$YY(x, K) = \frac{a(0)}{2} + \left[\sum_{k=1}^K (a(k) \cdot \cos(k \cdot x) + b(k) \cdot \sin(k \cdot x)) \right]$
k = 1..i_max

Спектр фрагмента сигнала за 10 периодов

Исходный сигнал с 10% шумом

Page 1 auto



Рисунок 8.24 – Цифровой квазисинусоидальный сигнал частотой $f_{\text{цифр}}/4.41$ и его разложение на гармоники (спектр) при анализе десяти периодов

Отмеченные здесь обстоятельства требуют определенной аккуратности при организации измерений и интерпретации их результатов. В частности особая роль здесь отводится корректным математическим моделям электрических процессов и тщательно отработанной в соответствии с этим моделями процедурой калибровки.

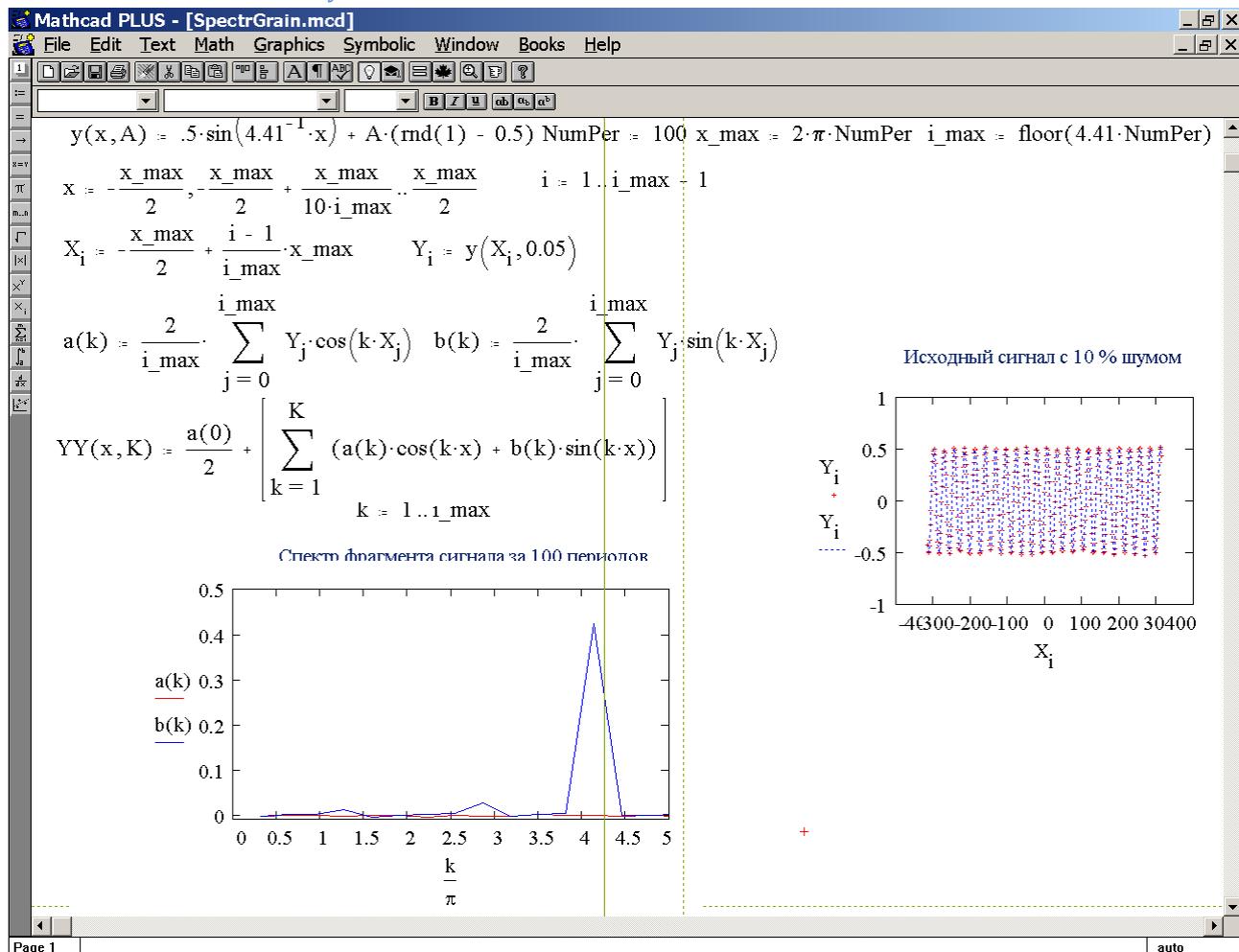


Рисунок 8.25 – Цифровой квазисинусоидальный сигнал частотой $f_{\text{цифр}}/4.41$ и его разложение на гармоники (спектр) при анализе ста периодов

8.4.2 Процедура калибровки измерителя емкости на базе звуковой карты

Поскольку ЗК ЭВМ представляет собой АЦП без системы автокалибровки, а предлагаемая (рисунок 8.18) схема измерения C является дифференциальной, калибровка системы представляет собой многоэтапный процесс, призванный решить ряд научно-технических задач.

Во-первых, входные усилители левого и правого каналов ЗК, а также настройки программные звуковой подсистемы конкретной ЭВМ не идентичны, требуется обеспечить равенство сигналов U_2 и U_1 , поступающих в левый и правый каналы приемно-анализирующего тракта ЗК. Здесь имеется ввиду подбор коэффициентов усиления этих каналов таким образом, чтобы при отсутствии в измерительной цепи конденсатора C (короткозамкнутый участок, емкость которого $C \rightarrow \infty$) *результат оцифровки* давал бы равные значения $U_2 = U_1$. Практически достаточно определить число k , удовлетворяющее условию:

$$U_2 = k U_1. \quad (8.5)$$

После этого можно всюду в дальнейших расчетах при интерпретации измерений емкости C данной ЗК заменять U_1 – на $k U_1$: $U_1 := k U_1$. Определить величину k позволяет соотношение

$$k = \sqrt{\frac{\int_0^{\infty} [U_2(t)]^2 dt}{\int_0^{\infty} [U_1(t)]^2 dt}}, \quad (8.6)$$

Которое применительно к дискретному сигналу, наблюдаемому в течение ограниченного времени трансформируется в следующее:

$$k \approx \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^I [U_2(t_i)]^2}{\sum_{i=1}^I [U_1(t_i)]^2}} \quad (8.7)$$

Погрешность формулы (8.6) по сравнению с (8.7) обусловлена следующими факторами: дискретизацией сигналов U_1 и U_2 , шумом ЗК, а также конечностью времени наблюдения, следовательно, параметра I (числа точек наблюдения за сигналом).

Проверка пяти ЗК современных стационарных ПК показала, что при правильной или «средней» программной настройке аудиосистемы, отличие величины k от единицы не превышало 1 %. Качество ЗК трех протестированных ноутбуков из низшей ценовой категории оказалось хуже – отличие k от единицы колебалось в пределах 6 %. Это обстоятельство требует обязательной калибровки ЗК по формуле (8.7) для обеспечения равной цифровой чувствительности левого и правого входных трактов. Этот этап назовем выравниванием чувствительности АЦП.

Следующий этап калибровки цепи «ЗК ПЭВМ – измерительный щуп» нацелен на определение входного сопротивления правого измерительного канала, в который поступает сигнал U_2 , прошедший через исследуемую емкость C . Этот сигнал по сравнению с эталонным (исходным) U_1 оказывается ослабленным по амплитуде и сдвинутым по фазе. Если коэффициент ослабления сигнала по амплитуде обозначить $\alpha(C)$, а сдвиг по фазе $\varphi(C)$, получаем соотношение:

$$U_2(C, \omega t) = \alpha(C) k U_1(\omega t + \varphi(C)) \quad (8.8)$$

Формула (2.8) служит основой определения емкости как функции U_2 и $U_1 - C = C(U_2, U_1)$, если известен явный вид функций $\alpha(C)$ и $\varphi(C)$. При этом экспериментально определяемые величины $\alpha(C_n)$ и $\varphi(C_n)$ даются формулами:

$$\alpha(C_n) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^I [U_2(t_i, C_n)]^2}{\sum_{i=1}^I [k U_1(t_i)]^2}}$$

(8.9)

и

$$\varphi(C_n) = \arccos \left(\frac{\sum_{i=1}^I U_1(t_i) U_2(t_i, C_n)}{\sqrt{\sum_{i=1}^I [U_1(t_i)]^2 \cdot \sum_{i=1}^I [U_2(t_i, C_n)]^2}} \right). \quad (8.10)$$

Первая из этих формул является реализацией метода наименьших квадратов, использованного для решения оптимизационной задачи – нахождения наилучшего значения $\alpha(C_n)$ в смысле обеспечения минимальной невязки формулы (8.8) данными одновременных измерений $U_1(t_i)$ и $U_2(t_i, C_n)$. Вторая формула отражает связь сдвига фаз в элементах цепи $\varphi(C_n)$ с корреляцией соответствующих синусоидальных сигналов, выборка наблюдений за которыми представляет собой два вектора высокой размерности I . При таком подходе коэффициент корреляции сигналов равен углу между соответствующими векторами в I -мерном пространстве.

Осмысленность формул (8.9) и (8.10) подтверждается физически адекватными асимптотиками:

$$\alpha(C \rightarrow 0) \rightarrow 0, \quad \alpha(C \rightarrow \infty) \rightarrow 1, \quad (8.11)$$

$$\varphi(C \rightarrow 0) \rightarrow \pi/2, \quad \varphi(C \rightarrow \infty) \rightarrow 0. \quad (8.12)$$

После того как цифровые измерения сигналов $U_1(t_i)$, $U_2(t_i, C_n)$ осуществлены, а и их математический анализ по формулам (8.9) и/или (8.10) дал значения $\alpha_n = \alpha(C_n)$ и $\varphi_n = \varphi(C_n)$, стоит задача определить величину C_n . Для этого требуется построить теоретические зависимости $\alpha = \alpha(C)$ и $\varphi = \varphi(C)$, основываясь на теории электрических цепей и гипотезах касательно существенных элементов этих цепей. Таковыми являются сопротивление r и емкость c входного тракта ЗК. Соответственно схема усложняется до отображенной ниже (рисунок 8.26).

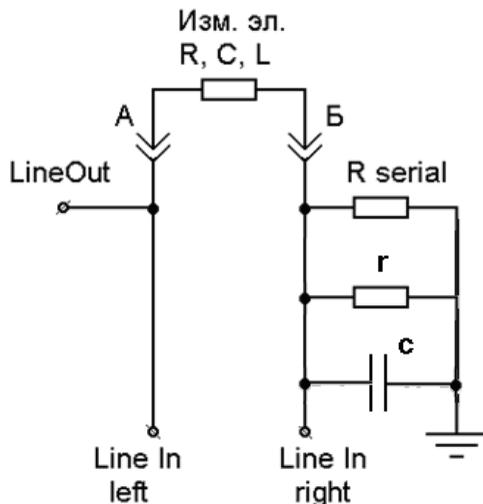


Рисунок 8.26 – Реалистичная схема измерительной электрической цепи, учитывающая конечные сопротивление и емкость входного тракта ЗК ЭВМ

В простейшей модели измерений можно предположить входную емкость ЗК равной нулю ($c = 0$), а элементы R_{serial} и r на схеме рисунке 2.26 объединить в $R^* = R_{\text{serial}} \parallel r = (R_{\text{serial}} \cdot r) / (R_{\text{serial}} + r)$. Для этой модели связь $\alpha = \alpha(C)$ дается формулой:

$$\alpha(C) = \frac{R^*}{\sqrt{(R^*)^2 + (2\pi fC)^{-2}}} = \frac{R^*}{\sqrt{(R^*)^2 + (\omega C)^{-2}}}, \quad (8.13)$$

где $\omega = 2\pi f$ – круговая частота зондирующего сигнала, f – его физическая частота. Обратной к (8.13) функцией является (получается разрешением (8.13) относительно C):

$$C = \frac{1}{R^*} \cdot \frac{1}{\omega} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{1 - \alpha^2}}. \quad (8.14)$$

Важное практическое значение имеет чувствительность измерительной методики, характеризуемая логарифмической производной – в данном случае величиной $d\ln C / d\ln \alpha$, а также определяемые чувствительностью оптимальные параметры установки, сигнала и иные режимы. Почленным логарифмическим дифференцированием (2.14) получаем:

$$\Delta \ln C = \left(\frac{1}{\alpha} \cdot \frac{1}{1 - \alpha^2} \right) \cdot \partial \alpha . \quad (8.15)$$

При $\alpha = 1/3^{1/2}$ величина $\Delta \ln C$ минимальна и составляет $3^{3/2}/2 \cdot \Delta \alpha$. Соответственно здесь относительная погрешность метода минимальна. При близких к нулю и к единице значениях α чувствительность погрешность метода одновременно резко растут. Из приведенных соотношений также следует, что для измерения емкостей порядка C оптимальной является круговая частота $\omega_{\text{опт}} \approx (R^* C)^{-1}$.

Если при определении емкости C опираться на экспериментально измеренный сдвиг фазы $\varphi = \varphi(C)$, модель выражается уравнением:

$$\varphi(C) = \arctg[(2\pi f R^* C)^{-1}] = \arctg[(\omega R^* C)^{-1}] . \quad (8.16)$$

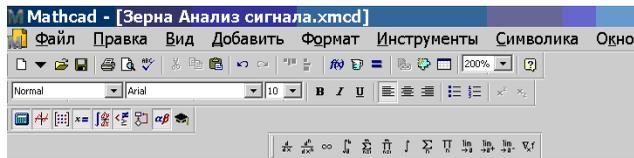
Разрешая это уравнение относительно C , получаем явную зависимость

$$C = [2\pi f R^* \operatorname{tg} \varphi]^{-1} = [\omega R^* \operatorname{tg} \varphi]^{-1} . \quad (8.17)$$

Чувствительность этого варианта методики выражается формулой:

$$\Delta \ln C = - \frac{1}{\sin \varphi \cos \varphi} \cdot \partial \varphi . \quad (8.18)$$

Здесь также оптимальной оказывается работа в середине диапазона при $\varphi \sim \pi/4$. Минимальная чувствительность метода составляет $|\Delta \ln C|_{\min} = 2 \cdot \Delta \varphi$, а наилучшая частота зондирующего тока $\omega_{\text{опт}}$ также порядка $(R^* C)^{-1}$. Кривые чувствительности обоих вариантов методики совмещены на рисунке 8.27.



Чувствительность амплитудного и фазового анализа

$$\begin{aligned}
 \frac{d \ln C d \alpha(\alpha)}{d \alpha} &:= \frac{1}{\alpha \cdot (1 - \alpha^2)} & \frac{d \ln C d \phi(\phi)}{d \phi} &:= \frac{1}{\sin(\phi) \cdot \cos(\phi)} \\
 \alpha &:= 0.01, 0.02 \dots 0.99 & \phi &:= \frac{\pi}{200}, \frac{\pi}{100} \dots \frac{\pi \cdot 0.99}{2}
 \end{aligned}$$

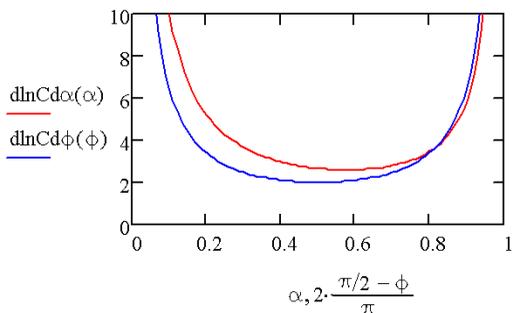


Рисунок 8.27 – Сравнительная чувствительность описанных вариантов методики анализа зондирующего сигнала: левый предел независимых переменных отвечает величине $C \rightarrow 0$, правый $C \rightarrow \infty$

Практическим результатом описанного выше исследования является целесообразность реализации адаптивного алгоритма измерения C , предусматривающего подстройку частоты зондирующего сигнала под конкретный образец конденсатора. Однако мы проигнорируем это обстоятельство в силу трудности реализовать соответствующий компьютерный алгоритм. Выбранный здесь простой путь, как показала работа с предметными образцами, позволяет обеспечить необходимую нам точность измерений.

Второй этап калибровки нацелен на определение единственной неизвестной величины R^* , которая зависит от входного сопротивления инструментальной ЗК ЭВМ. Ее численная оценка основывается на решении оптимизационных задач

$$C_n - \frac{1}{R^*} \cdot \frac{1}{\omega} \cdot \frac{\alpha_n}{\sqrt{1 - \alpha_n^2}} \rightarrow \min ,$$

(8.19)

$$C_n - [\omega R^* \operatorname{tg} \varphi_n]^{-1} \rightarrow \min$$

(8.20)

по отдельности или совместно, выбрав некоторую разумную норму для невязки. В приведенных формулах C_n – емкость n -го градуировочного (эталонного) конденсатора, α_n и φ_n – измеренные при включении его в цепь ослабление сигнала и сдвиг фаз.

Однотипность уравнений (8.19) и (8.20) не только свидетельствует о равенстве величин $\alpha = \cos \varphi$, но практически позволяет использовать единый оптимизационный алгоритм для вычисления R^* , опираясь на одно и/или оба эти уравнения. Чтобы уравнивать значимость различных номиналов C_n в предполагаемом диапазоне измерений $20 \div 2000$ пФ, будем минимизировать суммарную относительную погрешность (ее удаленность от нуля) применительно к (8.19), (8.20) или их совокупности. Также будем использовать статистический вес g_n для уравнивания статуса градуировочных конденсаторов: конденсаторы, имеющий заводской допуск на заявленный номинал в 10 % снабдим статвесом $g_n = 1$, а имеющие допуск 5 % – $g_n = 2$. Приведенные ниже расчетные формулы для R^* получаются логарифмированием и взвешенным суммированием из (8.14) и (8.16) соответственно:

$$\sum_{n=1}^N [(\ln C_n + \ln R^* + \ln \omega - \ln \alpha_n + \ln \sqrt{1 - \alpha_n^2}) \cdot g_n]^2 \rightarrow \min$$

,

 (8.21)

$$\sum_{n=1}^N [(\ln C_n + \ln R^* + \ln \omega + \ln \operatorname{tg} \varphi_n) \cdot g_n]^2 \rightarrow \min$$

,

 (8.22)

в которых N – число градуировочных конденсаторов.

Совместный анализ ослабления сигнала и сдвига фазы дает формулу:



$$\sum_{n=1}^N \left[(\ln C_n + \ln R^* + \ln \omega - \frac{\ln \alpha_n}{2} + \frac{\ln \sqrt{1 - \alpha_n^2}}{2} + \frac{\ln \operatorname{tg} \varphi_n}{2}) \cdot g_n \right]^2 \rightarrow \min. \quad (8.23)$$

Дифференцируя эти уравнения по $\ln R^*$, приравнявая результат к нулю и разрешая их относительно искомого параметра R^* получаем:

$$R^*_{\text{опт}} = \frac{1}{\omega} e^{\sum_{n=1}^N [(\ln \alpha_n - \ln \sqrt{1 - \alpha_n^2} - \ln C_n) \cdot g_n] / \sum_{n=1}^N g_n}, \quad (8.24)$$

$$R^*_{\text{опт}} = \frac{1}{\omega} e^{\sum_{n=1}^N [(-\ln \operatorname{tg} \varphi_n - \ln C_n) \cdot g_n] / \sum_{n=1}^N g_n}. \quad (8.25)$$

Если калибровочные конденсаторы имеют одинаковую погрешность изготовления, формулы (8.24) и (8.25) соответственно упрощаются:

$$R^*_{\text{опт}} = \frac{1}{\omega} e^{\sum_{n=1}^N [\ln \alpha_n - \ln \sqrt{1 - \alpha_n^2} - \ln C_n]}, \quad (8.26)$$

$$R^*_{\text{опт}} = \frac{1}{\omega} e^{\sum_{n=1}^N [-\ln \operatorname{tg} \varphi_n - \ln C_n]}. \quad (8.27)$$

Совместное использование амплитудного и фазного алгоритмов для определения $R^*_{\text{опт}}$ опирается на комбинированные соотношения (8.23)

$$R^*_{\text{опт}} = \frac{1}{\omega} e^{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [\ln \alpha_n - \ln \sqrt{1 - \alpha_n^2} - \ln \text{tg} \varphi_n - 2 \ln C_n] \cdot g_n} / \sum_{n=1}^N g_n \quad (8.28)$$

или для равных g_n

$$R^*_{\text{опт}} = \frac{1}{\omega} e^{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [\ln \alpha_n - \ln \sqrt{1 - \alpha_n^2} - \ln \text{tg} \varphi_n - 2 \ln C_n]} \quad , \quad (8.29)$$

которые дают среднегеометрическую величину.

Оценка надежности определения $R^*_{\text{опт}}$, предназначенного для подстановки в расчетные формулы для емкости конденсатора C как R^* , осуществлялась вычислением ряда статистических показателей. Во-первых, вычислялись коэффициенты корреляции данных расчета по формулам (8.14)-(8.15) емкости калибровочных конденсаторов с их номинальной емкостью:

$$\text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}}) = \frac{1}{R^*} \cdot \frac{1}{\omega} \cdot \frac{\alpha_n}{\sqrt{1 - \alpha_n^2}} \quad , \quad (8.30)$$

$$\text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}}) = \frac{1}{R^*} \cdot \frac{1}{\omega} \cdot \frac{1}{\text{tg} \varphi_n} \quad (8.31)$$

и

$$\text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}}) = \frac{1}{R^*} \cdot \frac{1}{\omega} \cdot \sqrt{\frac{\alpha_n}{\sqrt{1 - \alpha_n^2}} \cdot \frac{1}{\text{tg} \varphi_n}} \quad . \quad (8.32)$$

Коэффициенты корреляции индицируют качественное сходство реально наблюдаемых и модельных связей $C = C(\alpha, \varphi)$.

Кроме того, рассчитывались среднеквадратичные и максимальные относительные погрешности определения $C = C(\alpha, \varphi)$

для набора калибровочных конденсаторов:

$$\sigma_{\text{отн}} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left(\frac{C_n^{\text{расч}} - C_n}{C_n} \right)^2} \cdot 100\% \quad (8.33)$$

и

$$\sigma_{\text{отн}}^{\text{max}} = \max_{n=1, \dots, N} \left| \frac{C_n^{\text{расч}} - C_n}{C_n} \right| \cdot 100\% \quad (8.34)$$

Эти показатели характеризуют количественную погрешность измерительной методики. Их целесообразно сравнивать с заявленной погрешностью изготовления эталонных калибровочных конденсаторов. В идеале, если число эталонных конденсаторов N очень велико, неточность их заявленного номинала ΔC удастся свести к нулю ($\Delta C \sim N^{-1/2}$).

Для калибровки использовались два набора эталонных конденсаторов: первый покрывал диапазон емкостей $30 \div 500$ пФ, второй – $200 \div 3000$ пФ. Выбор этих диапазонов продиктован следующими соображениями. Во-первых, требовалось удостовериться в работоспособности обеих методик измерения C – по ослаблению сигнала и по сдвигу фазы, во-вторых, следовало выбрать из них наиболее точную для конкретного диапазона измеряемой величины, в-третьих выявить аппаратные ограничения обеих методик с точки зрения обеспечения требуемой точности измерений. Поэтому низший из диапазонов затрагивает неудобную для ЗК область слабых зондирующих сигналов и больших сдвигов фазы, а высший – предполагаемый диапазон емкости измерительной ячейки *в рабочем диапазоне*, т.е. при практически интересной влажности зерновых культур (до 20 %).

Исходные данные и результаты калибровки инструментальной ЗК как измерителя емкости приведены в таблицы 8.3-8.4 и рисунке 8.28.

Таблица 8.3 – Исходные данные и результат калибровки ЗК инструментальной ЭВМ в *низшем* диапазоне измеряемой емкости C –
 $5 \div 500$ пФ

n	C_n , пФ	$\Delta C_n / C_n$ 100 %	g_n	$C_n^{\text{расч}}$, пФ	$\left \frac{C_n^{\text{расч}} - C_n}{C_n} \right \cdot 100\%$
1	5,1	5	2	50	883
2	18	10	1	57	214
3	20	5	2	57	185
4	25,1	5	2	59	136
5	30	5	2	63	108
6	33	5	2	63	91
7	38	10	1	66	73
8	43,1	10	1	68	58
9	47	10	1	69	46
10	52,1	10	1	74	41
11	63	5	2	78	23
12	68,1	5	2	79	16
13	75	5	2	81	8
14	82	10	1	83	2
15	91	5	2	87	4
16	95	5	2	90	5
17	100	5	2	91	9



18	118	10	1	94	21
19	130	5	2	103	21
20	147	10	1	110	25
21	153	5	2	112	27
22	163	5	2	115	29
23	175	5	2	118	33
24	180	10	1	124	31
25	197	10	1	131	33
26	218	10	1	136	37
27	238	10	1	143	40
28	250	10	1	146	42
29	268	10	1	152	43
30	280	10	1	156	44
31	297	10	1	163	45
32	317	10	1	175	45
33	338	10	1	173	49
34	345	10	1	174	50
35	352	10	1	176	50
36	370	10	1	183	51
37	400	10	1	192	52
38	417	10	1	198	53
39	438	10	1	204	53
40	272	10	1	214	21
41	472	10	1	215	55



42	490	10	1	220	55
<i>Итого:</i>					
$R^*_{\text{опт}(\alpha)} = 5781 \text{ Ом}, \quad R^*_{\text{опт}(\varphi)} = 29056 \text{ Ом}, \quad R^*_{\text{опт}\{\alpha, \varphi\}} = 12961 \text{ Ом},$					
$\text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}\alpha}) = 0.96, \quad \text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}\varphi}) = 0.98, \quad \text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}\{\alpha, \varphi\}}) = 0.98,$					
$\sigma_{\text{отн}}^\alpha = 34 \%, \quad \sigma_{\text{отн}}^\varphi = 120 \%, \quad \sigma_{\text{отн}}^{\{\alpha, \varphi\}} = 69 \%,$					
$\sigma_{\text{отн}}^{\text{max}\alpha} = 412 \%, \quad \sigma_{\text{отн}}^{\text{max}\varphi} = 1789 \%, \quad \sigma_{\text{отн}}^{\text{max}\{\alpha, \varphi\}} = 883 \%$					

Данные таблицы 8.3 свидетельствуют о непригодности методики определения емкости по сдвигу фаз в диапазоне малых емкостей. В этом надежно работаем метод, основанный на ослаблении сигнала.

Таблица 8.4 – Исходные данные и результат калибровки ЗК инструментальной ЭВМ в *высшем* диапазоне измеряемой емкости $C - 200 \div 3000 \text{ пФ}$

n	$C_n, \text{ пФ}$	$\Delta C_n / C_n \cdot 100 \%$	g_n	$C_n^{\text{расч}}, \text{ пФ}$	$\left \frac{C_n^{\text{расч}} - C_n}{C_n} \right \cdot 100 \%$
1	200	5	2	301	50
2	220	5	2	316	44
3	240	10	1	299	25
4	270	10	1	321	19
5	300	10	1	332	11
6	317	10	1	342	8



7	338	10	1	357	6
8	370	10	1	376	2
9	438	10	1	419	4
10	468	10	1	439	6
11	510	10	1	586	15
12	557	10	1	612	10
13	585	10	1	621	6
14	670	10	1	670	0
15	730	10	1	715	2
16	780	10	1	757	3
17	810	10	1	775	4
18	910	10	1	760	16
19	1010	10	1	818	19
20	1130	10	1	886	22
21	1500	10	1	1288	14
22	1910	10	1	1555	19
23	2200	5	2	1850	16
24	2700	10	1	1774	34
25	3610	10	1	2251	38
26	4400	5	2	3254	26

Итого:

$$R^*_{\text{опт}(\alpha)} = 4569 \text{ Ом}, \quad R^*_{\text{опт}(\varphi)} = 8656 \text{ Ом}, \quad R^*_{\text{опт}\{\alpha, \varphi\}} = 6289 \text{ Ом},$$

$$\text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}\alpha}) = 0.98, \quad \text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}\varphi}) = 0.99, \quad \text{Корр}(C_n, C_n^{\text{расч}\{\alpha, \varphi\}}) =$$



$$\begin{array}{l} \sigma_{\text{отн}}^{\alpha} = 9 \%, \quad 0.99, \quad \sigma_{\text{отн}}^{\{\alpha, \varphi\}} = 16 \%, \\ \sigma_{\text{отн}}^{\max \alpha} = 21 \%, \quad \sigma_{\text{отн}}^{\varphi} = 27 \%, \quad \sigma_{\text{отн}}^{\max \{\alpha, \varphi\}} = 50 \%, \\ \sigma_{\text{отн}}^{\max \varphi} = 87 \%, \end{array}$$

В практически интересном диапазоне емкости амплитудный метод также существенно надежней фазового, обеспечивая погрешность в пределах 9 %. Однако при невозможности его реализации можно воспользоваться и методом сдвига фаз. При этом погрешность определения емкости будет втрое выше.

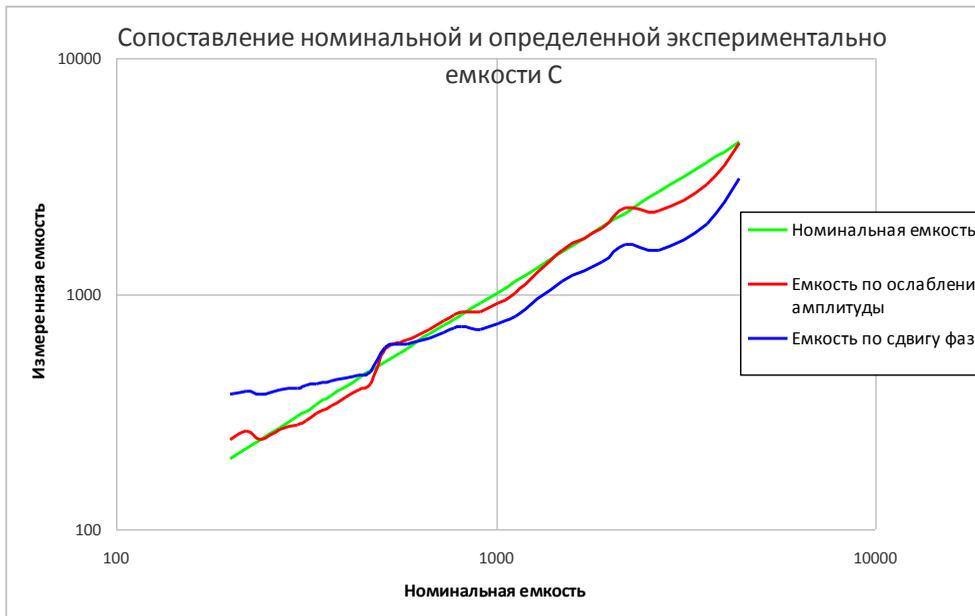


Рисунок 8.29 – Сопоставление номинальных и определенных после калибровки ЗК ЭВМ емкостей калибровочных конденсаторов $C_n^{\text{расч}} - C_n$: красная кривая – измерения по ослаблению сигнала, синяя – по сдвигу фазы, зеленая – комбинированная

Представленные данные, свидетельствуют, что в диапазоне малой емкости $C \leq 100$ пФ методика измерений, основанная на сдвиге фазы перестает работать. Поскольку согласно рисунку 8.29 она, наоборот, должна давать меньшую погрешность по сравнению с методикой, основанной на ослаблении сигнала, объяснением наблюдаемого может служить лишь неадекватность интерпретирующей эквивалентной схемы измерений (рисунок 8.30). Практически при малых значениях измеряемой емкости C она становится сопоставимой с входной емкостью измерительной микросхемы c , которую в такой ситуации следует учитывать согласно рисунку 8.29. При этом, естественно, существенно услож-

няются интерпретирующие модели.

В частности, в меньшей степени зависящая от входной емкости микросхемы с модель калибровки по ослаблению сигнала опирается на более реалистичную электрическую схему измерений рисунка 8.30 и принимает форму:

$$\alpha(C) = \frac{1}{\sqrt{1 + 2\frac{c}{C} + \frac{(R^*)^{-2} + (\omega c)^2}{(\omega C)^2}}}. \quad (8.35)$$

Практически малой, т.е. не отвечающей обозначенному предельному переходу, измеряемой величиной C является $C \sim 10 c$. По результатам экспериментов, отраженных в табл Ы1 и рис. №** входная емкость ЗК составляет порядка 10 пФ.

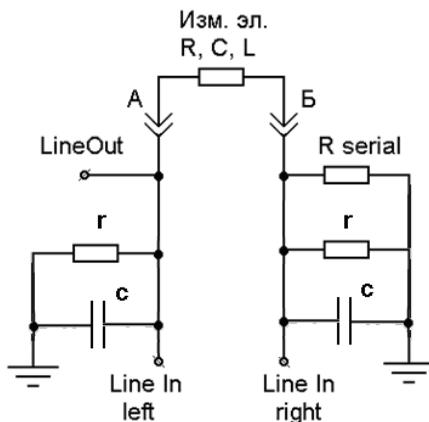


Рисунок 8.30 – Наиболее реалистичная схема измерительной электрической цепи, учитывающая конечные сопротивление и емкость входного тракта ЗК ЭВМ, которые необходимо учитывать при измерении малых емкостей: входные сопротивления r и емкости c левого и правого каналов ЗК принимаются равными

Это означает, что наиболее чувствительный к входной емкости ЗК метод измерений, основанный на оценке сдвига фазы позволяет надежно измерять емкости от 100 пФ и более, т.е. работать в интересном для нас диапазоне. При этом метод, основанный на ослаблении сигнала оказывается более точным, следо-

вательно, предпочтительным. Поэтому особой необходимости нам реализовывать более сложный алгоритм параметрической идентификации измерительной цепи нет.

Тем не менее, приведем соответствующие модели расчетные формулы для R^* и соответственно r и c . Сначала требуется минимизировать функционал, рассматриваемый как функция двух искомых переменных R^* и c :

$$\Phi(R^*, c) = \sum_{n=1}^N \left[\left(\ln \alpha_n + \frac{1}{2} \ln \left\{ 1 + 2 \frac{c}{C_n} + \frac{1}{\omega^2} \frac{1}{(R^*)^2} \frac{1}{C_n^2} + \frac{c^2}{C_n^2} \right\} \right) \cdot g_n \right]^2 \rightarrow \min \quad (8.36)$$

Для этого $\Phi(R^*, c)$ дифференцируется по каждой из переменных, и оба результата приравниваются к нулю. Полученная система нелинейных уравнений решается затем, например, методом Ньютона. В качестве начальных приближений следует выбирать R^* равное найденному из предыдущей модели значению (в нашем случае $R^* = 4569$ Ом) и $c = 10$ пФ. Рекомендуемые значения призваны обеспечить хорошую сходимость итерационного процесса. Отметим, что зная R^* и R_{serial} нетрудно определить входное сопротивление ЗК r . Оно равно:

$$r = \frac{R^* R_{\text{serial}}}{R_{\text{serial}} - R^*} \quad (8.37)$$

Вид калибровочного окна программы приведен на рисунке 8.31, а основная часть ее кода – в Приложении 1.

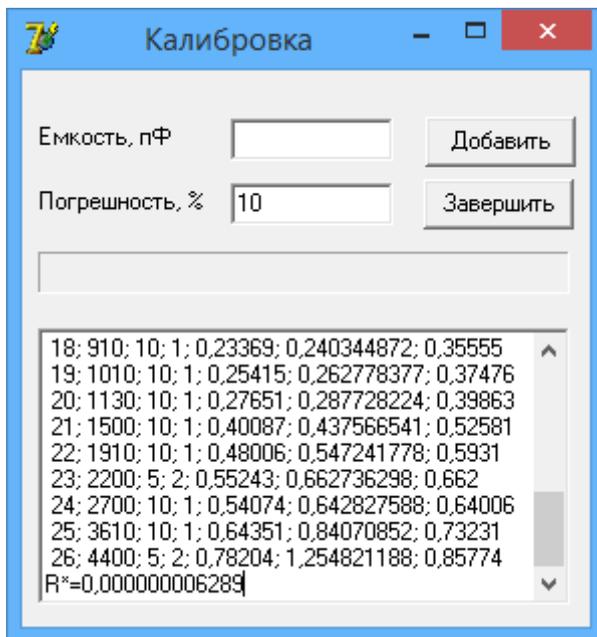


Рисунок 8.31 – Калибровочное окно программы измерения электрической емкости, диэлектрической проницаемости и влажности зерна

После калибровки компьютер с установленной программой может использоваться как электроизмерительный тракт установки по определению диэлектрической проницаемости зерна. Соответствующие измерения требуют, однако, либо заблаговременно внести в компьютер сведения о параметрах пустой измерительной ячейки, либо перед каждым измерением (серией измерений) выполнять такое определение (калибровку измерительной ячейки) оба варианта использования предусмотрены в функциональном коде программы.

Кроме того, в ней предусмотрено непосредственное определение влажности для различных видов зерноматериала (на данный момент трех – крупы пшеница, гречиха и ячменя) на основании исследованных в следующей части работы связей диэлектрической проницаемости с видом зерна, влажностью, степенью измельчения и температурой. Реализованные в этой части программы формулы подробно описаны ниже.

Выводы:

1. Разработана конструкция измерительного стенда, сочетающая засыпной плоский конденсатор нормированной электрической емкости и электроизмерительный тракт на основе модифицированного прибора Ф4320; рассчитаны ее геометрические и электрические параметры; реализован опытный образец.
2. Выполнена надлежащая калибровка измерительной ячейки (датчика) и электрического тракта; установлено, что погрешность измерения электрической емкости и, соответственно, диэлектрической проницаемости не выходит за допустимые пределы.
3. Осуществлена автоматизация измерений диэлектрической проницаемости путем замены аналогового прибора Ф4320 на звуковую карту современного ПК.
4. Проведены комплексные испытания, подтверждающие надежность и эффективность разработанного измерительного комплекса.

ГЛАВА 9. ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА, СБОР, ОБРАБОТКА И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ДАННЫХ

Поскольку целью предметного исследования ставится выявить связь диэлектрической проницаемости зерна с его физико-технологическими свойствами (влажностью, степенью измельчения и температурой) соответствующий научный эксперимент следует квалифицировать как многофакторный. Такой эксперимент

требует надлежащей организации, в частности, корректного планирования.

Стандартная процедура планирования (эксперимента) подразумевает абсолютную неизученность интересующих исследователя свойств объекта и не нацелена на вскрытие его внутренней структуры, отражением которой эти свойства являются. В результате математическая модель объекта носит «внешний» характер и не несет объясняющих функций. Кроме того, такая модель обладает существенно ограниченными возможностями в части прогнозирования, особенно за пределами параметрического полигона, на котором изучался отклик модели на ее параметрические возмущения.

В то же время инициализация типичной «внешней» математической модели требует проведения большого числа опытов, в которых измеряется отклик системы на множество воздействий, каждое из которых характеризуется конкретным сочетанием уровней или значений, влияющих факторов. Чтобы покрытие многомерного параметрического полигона было равномерным, такие выборочные сочетания параметров разыгрываются по специальным статистическим алгоритмам. Сама же структура «внешней» модели выбирается в форме многочлена N переменных первой или второй степени чувствительности к этим факторам; A – некоторая константа;

$$g(\vec{x}) = f(\vec{x}) + (\vec{x}^T, C\vec{x}) = A + \sum_{n=1}^N B_n x_n + \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N C_{nm} x_n x_m$$

,

(9.1)

где $C=C_{N \times N}$ – симметричная матрица коэффициентов, характеризующих взаимное влияние каждой пары рассматриваемых факторов.

В линейной модели считается, что все изучаемые факторы независимым образом влияют на отклик системы. В приведенной нелинейной модели (9.1) также учитывается их парный синергизм.

Приведенные модели формально обобщаются и на случай множественного синергизма. Однако ценность подобных моделей представляется весьма спорной, а их корректная инициализация (определение по опытным данным коэффициентов A , B , C и т.д.) – крайне проблематична. Действительно, если рассмотреть лишь три влияющих фактора x_1 , x_2 и x_3 в рамках линейной модели (1п) потребуется порядка сорока опытов для определения коэффициентов A , B_1 , B_2 , B_3 . Соответственно каждый из влияющих факторов

потребуется три-четыре градации уровня в исследуемом диапазоне. Корректная инициализация нелинейной модели нуждается, как минимум, в сотне опытов при пяти градациях по каждому из параметров.

Найденные из опыта методом статистической обработки подгоночные параметры A , B , C и т.д. могут впоследствии использоваться для оценки влияния отдельных факторов на конечный результат, т.е. являются по сути коэффициентами чувствительности.

В нашем случае, однако, известна природа диэлектрической проницаемости зерна – она обусловлена двумя аддитивными механизмами – диэлектрической проницаемостью сухого зерноматериала (крахмала), которая мала, и аномально высокой диэлектрической проницаемостью воды, которая впитывается в зерновой крахмал. Это обстоятельство позволяет нам конструировать куда более совершенную «внутреннюю» математическую модель, адекватно отражающую реальные механизмы влияния на диэлектрическую проницаемость зерноматериалов как влагосодержания, так и прочих физико-технологических параметров. Построение такой физически содержательной модели позволяет не только существенно упростить сам эксперимент, «расщепив» его на серию однофакторных, но существенно повысить количественную надежность и содержательность обобщаемых опытных данных. В математике такой подход обозначается термином *регуляризация*. Использование регуляризации для построения физически содержательных информационных моделей обеспечивает высокую адекватность и отличные прогностические свойства.

Основу расщепления многофакторного эксперимента на совокупность однофакторных составляет следующая зависимость диэлектрической проницаемости зерноматериалов ε от влажности зерна w , степени измельчения μ и температуры T :

$$\varepsilon(w, T, k) = ((1 - k) + C_{1/2} k (\varepsilon_{\substack{w=0 \\ T=20 \\ k=1}} + (A - BT)w)^{1/2})^2 \quad (9.2)$$

или

$$\varepsilon(w, T, k) = ((1 - k) + C_{1/3} k (\varepsilon_{\substack{w=0 \\ T=20 \\ k=1}} + (A - BT)w)^{1/3})^3 \quad (9.3)$$

В регуляризующие формулы (9.2) и (9.3) входят три пара-

метра – A , B и C . Определять каждый из них мы будем в независимых опытах, т.е. осуществим расщепление и проведем серию однофакторных экспериментов. Впоследствии найденные в этих опытах коэффициенты A , B , C подставим в результирующие формулы. Эксперименты будем проводить для зерноматериалов трех типов: пшеница, ячменя и гречихи. Эти результаты будем сопоставлять, а при возможности обобщать.

В этих формулах мелкость зерноматериала μ будем ассоциировать со степенью заполнения им объема k , которая, с одной стороны, допускает непосредственное измерение, а с другой, явным образом влияет на диэлектрическую проницаемость.

Необходимо особо отметить, что используемые нами регулирующие зависимости (9.2) и (9.3) существенно нелинейны, следовательно, их аппроксимация моделями (9.1) предполагается априорно неудовлетворительной.

9.1 Определение объектов исследования, актуальных параметров и их диапазонов

В практических опытах будем изучать следующие зависимости:

- 1) диэлектрической проницаемости зерноматериалов ε от влажности w ;
- 2) диэлектрической проницаемости от плотности материала и степени заполнения им объема;
- 3) диэлектрической проницаемости от температуры.

Поскольку перечисленные связи являются частными случаями закономерностей (9.2, 9.3), организацию экспериментальных измерений осуществим поэлементно, и полученные результаты, сопоставив, объединим в общие теоретически обоснованные уравнения вида (9.2, 9.3).

Необходимые экспериментальные исследования проведем по описанной выше программе для следующих объектов: пшеница (крупы), ячменя (крупы), гречихи (ядрицы). Их выбор обусловлен важностью в рационе человека, что подтверждается статистическими данными по производству и потреблению перечисленных круп в России.

При изучении всех объектных зерновых культур использовались единые средства измерений, приведенные в таблице 9.1.

Таблица 9.1

№ позиции	Наименование прибора	Оригинальность	Тип методики
1	Измерительная ячейка	Да	Оригинальная
2	Измеритель емкости Ф4320	Модифицирован	Инструктивная
3	Влагомер (тип №№№№)	Стандартный	Инструктивная
4	Весы электронные LU-1319	Стандартный	Инструктивная
5	Мерные емкости (шприц медицинский от 1 до 150 мл)	Стандартный	Оригинальная
6	Рулетка измерительная	Стандартный	Оригинальная
7	Штангенциркуль	Стандартный	Инструктивная
8	Печь духовая бытовая	Стандартный	Оригинальная
9	Термометр ртутный широкодиапазонный ТУ 25-2021.010-89	Стандартный	Инструктивная
0	1 Термометр сопротивления автомобильный	Стандартный	Оригинальная
1	1 Измельчитель зерновых (кофемолка)	Стандартный	Оригинальная
2	1 Измеритель емкости на базе звуковой карты ПК	Оригинальный	Оригинальная

3	1 Средства обработки и систематизации результатов измерений на базе ПК	Стандартный	Оригинальная
---	---	-------------	--------------

Как следует из представленных в таблице 9.1 данных, диссертационное исследование выполнено, в основном, на стандартном оборудовании (76 %) при заметной доле оригинальных методик измерения (61 %).

Важное значение в экспериментальных исследованиях играют параметрические диапазоны – области изменения исследуемых в своей взаимосвязи параметров системы. Нас интересуют такие диапазоны параметров, которые отражают свойства зерновых материалов в практических условиях их производства, хранения, транспортировки, кондиционирования, переработки и потребления. Для влажности зерновых продуктов актуален диапазон от 4 % до 15 %, для температуры – от 0 до 100 °С, для степени заполнения предоставленного объема крахмалом – от 65 до 100 %. Соответственно в нашем исследовании эти диапазоны выбраны максимально приближенными к приведенным реалистичным (к сожалению, их полное покрытие требует более тонкого оборудования и, следовательно, более сложных методик. Их фактическая величина (для всех объектов) составляет: $4\% \leq w \leq 25\%$, $20\text{ °C} \leq T \leq 80\text{ °C}$, $0,75 \leq k \leq 1$.

Структура следующих параграфов выбрана типовой и представляет собой последовательное описание отдельных этапов, выделенных в преамбуле параграфа 9.1.

9.2 Отработка методики и получение фактических данных

Перед измерениями во всех случаях зерновая масса визуально контролировалась на предмет однородности. При изменении некоторого объема зерновой массы, например, при увлажнении опрыскиванием, нагреве в печи или измельчении, подвергшийся модификации зерновой материал тщательно перемешивался, а при необходимости и выдерживался в течение определенного времени – с целью обеспечить однородность физико-технологических свойств во всем объеме. Если какой-либо из измерительных этапов позволял проанализировать одновременно лишь часть исследуемого материала (зерновой массы), вы-

борка этой части выбиралась из соображений обеспечить ее представительность. В случае сомнений, что выборка представительна, соответствующий эксперимент повторялся несколько (2-5) раз, после чего результат осреднялся.

В се первичные экспериментальные данные фиксировались в лабораторном журнале в форме схем, числовых значений, таблиц. Затем эти данные заносились в ПК, преобразовывались в графические образы и по результатам анализа этих образов обобщались с помощью надлежащего математического аппарата. Такое обобщение было нацелено, прежде всего, на физическое обоснование результата, его интерполяцию в области экспериментальных полигонов данных, а, по возможности, и на прогнозирование результата – за пределы исследованного полигона данных. Интерес к прогнозированию в рамках конструируемых предметных моделей обусловлен тем обстоятельством, что исследованный диапазон параметров зерновых материалов в силу ограниченности инструментальных средств и методик оказался несколько уже представляющего практический интерес. Конкретные этапы и результаты частных экспериментов описаны в параграфах 9.2.1 – 9.2.3, а их обобщение – в параграфе 9.2.4.

9.2.1 Зависимость диэлектрической проницаемости зерна от влажности

Зависимость диэлектрической проницаемости ε от влажности и изучалась в первоочередном порядке как наиболее сильная и одновременно практически значимая из подлежащих исследованию в данной диссертационной работе.

Зерновая масса товарного пшена в объеме ~ 1.1 л засыпалась в измерительную ячейку, после чего емкость последней (в пФ) определялась с помощью электроизмерительного модуля (в первых опытах его функции выполнял прибор Ф4320, впоследствии замененный на ноутбук с описанным в разделе 8.4 специальным программным обеспечением). Процедура измерений отображена на рисунке 9.1.

После измерений диэлектрическая проницаемость зерна определялась по формулам главы 1 (1.1–1.18). В этих формулах фигурирует емкость пустого измерительного конденсатора. Ее величина за время проведения опытов (примерно 4 месяца) случайным образом менялась в пределах ± 2 пФ, что вносит дополнительную измерительную погрешность порядка 2 %.



Рисунок 9.1 – Процесс измерения диэлектрической проницаемости зерна

Поскольку стенки измерительной ячейки имеют не достаточную жесткость, при засыпке наблюдалась их деформация. Для оценки ее влияния на емкость конденсатора осуществлялась дополнительная искусственная деформация стенок (рисунок 9.2). Выявлено, что при реалистичных деформациях стенки измерительной ячейки ее емкость изменялась крайне незначительно – в пределах $0,5 \div 1$ %.

Затем часть пробы в количестве 400 г отбиралась для измерения текущей влажности с помощью прибора ***** (рисунок 9.3). Результаты измерений ε и w заносились в лабораторный журнал, после чего подлежали математической обработке с применением ЭВМ.



Рисунок 9.2 – Влияние деформации измерительной ячейки на результат при определении диэлектрической проницаемости.



Рисунок 9.3 – Измерение влажности зерна с помощью прибора
***.

Затем зерно увлажнялось с помощью распылителя (примерно 70÷100 мл/цикл), тщательно перемешивалось и выдерживалось в емкости сроком порядка получаса. В течение этого времени несколько осуществлялось дополнительное перемешивание. После однородного и полного впитывания влаги зерно подвергалось повторному измерению диэлектрической проницаемости и влажности. Процедура увлажнения повторялась 4 раза – вплоть до влагосодержания, не представляющего практического интереса (порядка 25 %).

В целях обеспечить надежность экспериментальных данных описанный эксперимент выполнялся 3 раза. Обобщенные результаты описанных опытов сведены в таблицу 9.2, а их графический образ и результаты математической обработки приведены на рисунке 9.4.

Таблица 9.2 – Первичные
данные по зависимости ди-
электрической проницае-
мости товарного пшена от
влагосодержания

№ опыта	Диэлектрическая про- ницаемость	Влажность, %
1	2.083	4
2	3.438	6.92
3	3.646	7.11
4	3.854	7.45
5	4.792	8.54
6	6.094	10.88
7	6.458	11.25
8	6.563	11.78
9	7.604	13.98
10	8.229	14.72
11	8.802	15.39
12	34.375	29.30



Mathcad - [Диэлектрическая проницаемость Влажность.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10

Пшено I := 1..12

$$V_p := \begin{pmatrix} 4 \\ 6.92 \\ 7.11 \\ 7.45 \\ 8.54 \\ 10.88 \\ 11.25 \\ 11.78 \\ 13.98 \\ 14.72 \\ 15.39 \\ 29.30 \end{pmatrix} \quad C_p := \begin{pmatrix} 200 \\ 330 \\ 350 \\ 370 \\ 460 \\ 585 \\ 620 \\ 630 \\ 730 \\ 790 \\ 845 \\ 3300 \end{pmatrix}$$

$$\epsilon_p := \frac{C_p}{96} \quad \epsilon_p = \begin{matrix} & 1 \\ 1 & 2.083 \\ 2 & 3.438 \\ 3 & 3.646 \\ 4 & 3.854 \\ 5 & 4.792 \\ 6 & 6.094 \\ 7 & 6.458 \\ 8 & 6.563 \\ 9 & 7.604 \\ 10 & 8.229 \\ 11 & 8.802 \\ 12 & 34.375 \end{matrix}$$

$$\ln \epsilon_p := \ln(\epsilon_p)$$

$$B := \text{slope}(V_p, \ln \epsilon_p)$$

$$A := \text{intercept}(V_p, \ln \epsilon_p)$$

$$A := \exp(A)$$

$$A = 1.756$$

$$B = 0.105$$

$$\epsilon_pI := A \cdot \exp(B \cdot V_pI)$$

I := 1..12 X := 0,01..30

Рисунок 9.4 – Результат математической обработки зависимости диэлектрической проницаемости пшена от влажности

Эта зависимость выражается формулой

$$\varepsilon_{\text{пшена}}(w) = 1.756 \cdot e^{0.105 \cdot w}, \quad (9.4)$$

в которой влажность выражена в процентах. Приведенная формула описывает экспериментальные данные с погрешностью порядка 1 % и коэффициентом корреляции 0.998.

Экспоненциальный характер этой зависимости объясняется, по-видимому, «включением» при высокой влажности механизмов проводимости, отличных от учтенного в нашей методике емкостного. Это обстоятельство, однако, не препятствует нелинейной градуировке нашего измерительного комплекса. При ограничении диапазона измерений максимальной влажностью 15 % вместо формулы (9.4) можно воспользоваться линейным вариантом

$$\varepsilon_{\text{пшена}}(w) = 1.756 + 0.184 \cdot w, \quad (9.5)$$

характеризующимся погрешностью 12 % и коэффициентом корреляции 0.95.

Аналогичные результаты для перловой крупы приведены в таблице 9.3 и на рисунке 9.5.

Таблица 9.3 – Первичные данные по зависимости диэлектрической проницаемости перловой крупы от влагосодержания

№ опыта	Диэлектрическая проницаемость	Влажность, %
1	4.375	10.77
2	5.104	11.22
3	5.313	12.11
4	5.938	13.25
5	7.917	15.67
6	9.167	16.88
7	9.583	17.25
8	10.417	18.81
9	11.458	19.98
10	13.542	20.89
11	19.792	24.12

12	26.042	27.66
----	--------	-------

Эти результаты также обобщаются в виде формул:

$$\varepsilon_{\text{перловки}}(w) = 1.516 \cdot e^{0.104 \cdot w}, \quad (9.6)$$

с погрешностью порядка 0.2 % и коэффициентом корреляции 0.997 и

$$\varepsilon_{\text{перловки}}(w) = 1.516 + 0.158 \cdot w, \quad (9.7)$$

характеризующимся погрешностью 27 % и коэффициентом корреляции 0.96.



Mathcad - [Диэлектрическая проницаемость Влажность.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 B I U

$\frac{d}{dx}$ $\frac{d}{dx^0}$ ∞ \int_a^b \sum \prod \int \sum \prod $\lim_{x \rightarrow a}$ $\lim_{x \rightarrow a^+}$ $\lim_{x \rightarrow a^-}$ ∇ f

Перловка $I := 1..12$

10.77	420
11.22	490
12.11	510
13.25	570
15.67	760
16.88	880
17.25	920
18.81	1000
19.98	1100
20.89	1300
24.12	1900
27.66	2500

$V_{per} :=$ $C_{per} :=$

$\epsilon_{per} := \frac{C_{per}}{\%}$

	1
1	4.375
2	5.104
3	5.313
4	5.938
5	7.917
6	9.167
7	9.583
8	10.417
9	11.458
10	13.542
11	19.792
12	26.042

$\ln \epsilon_{per} := \ln(\epsilon_{per})$
 $B := \text{slope}(V_{per}, \ln \epsilon_{per})$
 $A := \text{intercept}(V_{per}, \ln \epsilon_{per})$
 $A := \exp(A)$
 $A = 1.516$
 $B = 0.104$
 $\epsilon_{perI} := A \cdot \exp(B \cdot V_{perI})$

$I := 1..12$ $x := 0, 0.1..30$

Рисунок 9.5 – Результат математической обработки зависимости диэлектрической проницаемости перловой крупы от влажности

Представленные данные свидетельствуют о близости электрофизических свойств ячменя и проса. По-видимому, это связано со сходством химического состава (крахмал – 53-70 %, белок – 10-14 %, для проса и соответственно крахмал – 55-66 %, белок – 14 % – для крупы ячменя), а также одинаковой доминирующей ролью воды, которая обеспечивает доминирующий вклад в диэлектрическую проницаемость крупяных продуктов. Также здесь следует отметить действие альтернативного емкостному механизму проводимости при высокой (свыше ~ 15 %) влажности зерна.

В таблице 9.4 и на рисунке 9.6 приведены исходные экспериментальные данные и результаты их математической обработки для гречневой крупы.

Таблица 9.4 – Первичные данные по зависимости диэлектрической проницаемости гречневой крупы от влагосодержания

№ опыта	Диэлектрическая проницаемость	Влажность, %
1	5.417	13.48
2	7.188	13.72
3	8.438	14.71
4	9.063	15.45
5	8.958	15.67
6	9.896	16.13
7	10.417	16.72
8	10.417	18.81
9	11.458	19.89
10	13.542	20.89
11	15.625	22.52
12	20.833	23.92

Формульный вид этих результатов следующий:

$$\varepsilon_{\text{гречихи}}(w) = 2.013 \cdot e^{0.093 \cdot w}, \quad (9.8)$$

с погрешностью порядка 1.4 % и коэффициентом корреляции 0.96 или упрощенно

$$\varepsilon_{\text{гречихи}}(W) = 2.013 + 0.187 \cdot W, \quad (9.9)$$

характеризующимся погрешностью 22 % и коэффициентом корреляции 0.94.

Эти данные также практически совпадают с данными для двух других исследованных видов зерновой продукции. Отсюда возникает естественная задача обобщить их с целью унифицировать и упростить процедуру градуировки электрической подсистемы измерительного комплекса. Особенно это важно, если для измерения емкости использовать прибор Ф4320. Унификация градуировки подразумевает изготовление единой накладной прозрачной шкалы для непосредственного измерения влажности. В этом случае, конечно, очень важно оценить погрешность подобного обобщения, эквивалентного предположению, что диэлектрическая проницаемость не зависит от сорта зернового материала. Для градуировки измерительной системы на базе ЭВМ данное обстоятельство не критично.

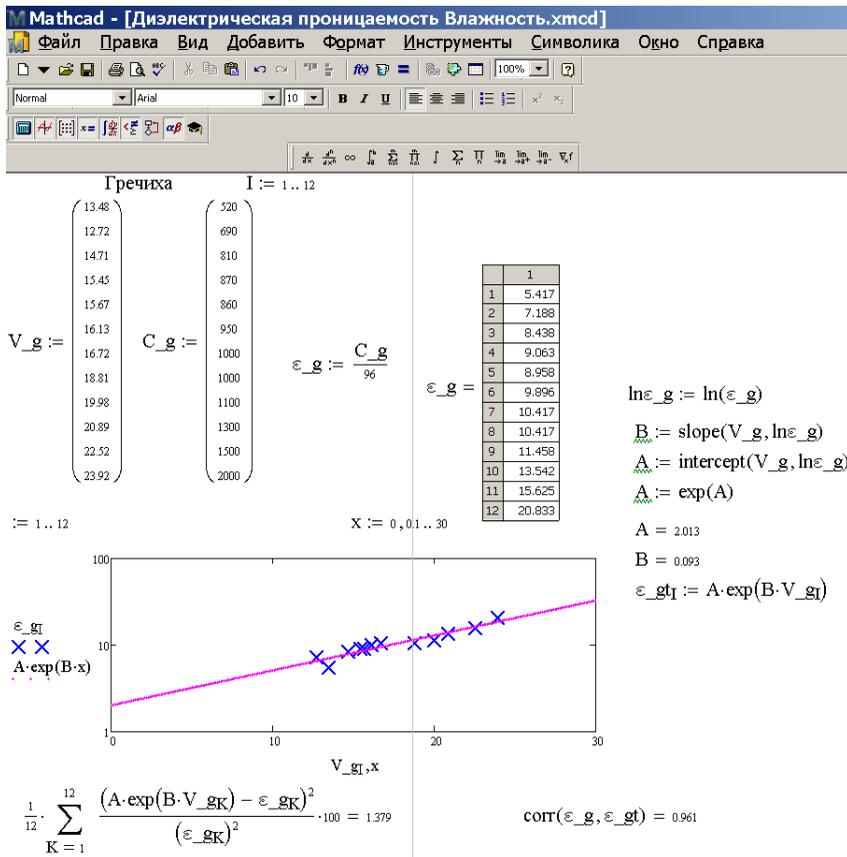


Рис 9.6 – Результат математической обработки зависимости диэлектрической проницаемости перловой крупы от влажности

Алгоритм обобщения результатов приведен на рисунке 9.7. Видно, что отказ как от учета сорта зерна, так и от нелинейной градуировки электроизмерительного прибора приводят к некоторой погрешности при определении влажности зерна на основе измерений его диэлектрической проницаемости.



Mathcad - [Диэлектрическая проницаемость Влажность.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика Окно Справка

Normal Arial 10 B I U

$$A := (A_p \cdot A_per \cdot A_g)^{\frac{1}{3}} \quad B := \frac{(B_p + B_per + B_g)}{3} \quad A = 1.75 \quad B = 0.101 \quad 3.3A \cdot B = 0.581$$

$$\epsilon_ptI := A \cdot \exp(B \cdot V_pI) \quad \epsilon_perI := A \cdot \exp(B \cdot V_perI) \quad \epsilon_gI := A \cdot \exp(B \cdot V_gI)$$

$$\epsilon_plI := A + (B \cdot A \cdot V_pI) \quad \epsilon_perI := A + (B \cdot A \cdot V_perI) \quad \epsilon_glI := (3.3 \cdot B \cdot A \cdot V_gI)$$

$$\frac{1}{36} \left[\sum_{K=1}^{12} \frac{(A \cdot \exp(B \cdot V_gK) - \epsilon_gK)^2}{(\epsilon_gK)^2} + \sum_{K=1}^{12} \frac{(A \cdot \exp(B \cdot V_pK) - \epsilon_pK)^2}{(\epsilon_pK)^2} + \sum_{K=1}^{12} \frac{(A \cdot \exp(B \cdot V_perK) - \epsilon_perK)^2}{(\epsilon_perK)^2} \right] \cdot 100 = 1.234$$

$$\frac{1}{36} \left[\sum_{K=1}^{12} \frac{(\epsilon_gK - \epsilon_glK)^2}{(\epsilon_gK)^2} + \sum_{K=1}^{12} \frac{(\epsilon_pK - \epsilon_plK)^2}{(\epsilon_pK)^2} + \sum_{K=1}^{12} \frac{(\epsilon_perK - \epsilon_perlK)^2}{(\epsilon_perK)^2} \right] \cdot 100 = 1471$$

$$(\text{corr}(\epsilon_g, \epsilon_gI) \cdot \text{corr}(\epsilon_p, \epsilon_pt) \cdot \text{corr}(\epsilon_per, \epsilon_perI))^{\frac{1}{3}} = 0.986 \quad (\text{corr}(\epsilon_g, \epsilon_gl) \cdot \text{corr}(\epsilon_p, \epsilon_pl) \cdot \text{corr}(\epsilon_per, \epsilon_perl))^{\frac{1}{3}} = 0.951$$

$$\begin{matrix} \epsilon_pI & \times \times \\ \epsilon_perI & \square \square \\ \epsilon_gI & \diamond \diamond \\ A \cdot \exp(B \cdot x) & \text{---} \\ 3.3 \cdot A \cdot B \cdot x & \cdots \end{matrix}$$

Рисунок 9.7 – Результат обобщения зависимости диэлектрической проницаемости зерновых от влажности

Итоговые формулы, обобщающие (9.4)-(9.9), а также формулы, позволяющие определять влажность зерновых w по известной диэлектрической проницаемости ε с оценкой их погрешности приведены ниже:

$$\varepsilon_{\text{зерна}}(w) = 1.75 \cdot e^{0.101 \cdot w}, \quad (9.10)$$

Приведенная формула описывает экспериментальные данные с погрешностью порядка 1.3 % и коэффициентом корреляции 0.996.

При ограничении диапазона измерений максимальной влажностью 15 % вместо формулы (9.10) можно воспользоваться линейным вариантом

$$\varepsilon_{\text{зерна}}(w) = 0.581 \cdot w, \quad (9.11)$$

характеризующимся погрешностью 15 % и коэффициентом корреляции 0.95.

Соответственно, влажность от диэлектрической проницаемости с такой же погрешностью зависит как:

$$w_{\text{зерна}}(\varepsilon) = 9.9 \cdot \ln(\varepsilon/1.75) \approx \varepsilon/0.581. \quad (9.12)$$

Уточненные формулы типа (9.12) для различных видов зерна имеют вид:

$$w_{\text{пшеница}}(\varepsilon) = 9.5 \cdot \ln(\varepsilon/1.756) \approx \varepsilon/0.602, \quad (9.13)$$

$$w_{\text{перловки}}(\varepsilon) = 9.6 \cdot \ln(\varepsilon/1.516) \approx \varepsilon/0.565, \quad (9.14)$$

$$w_{\text{речихи}}(\varepsilon) = 10.7 \cdot \ln(\varepsilon/2.013) \approx \varepsilon/0.565 \quad (9.15)$$

с погрешностью порядка ~ 1 % для нелинейного и ~ 15 % для линеаризованных вариантов.

Практически эти градуировочные зависимости использовались для разметки накладных прозрачных шкал прибора Ф4320 и в программе пересчета диэлектрической проницаемости во влажность – при использовании ЭВМ в составе измерительного комплекса.

9.2.2 Зависимость плотности зерна от влажности

Поскольку диэлектрическая проницаемость сыпучей среды связана со степенью заполнения предоставленного ей пространства, т.е. практической плотностью, соответствующие исследования также являются предметом данной диссертационной работы.

Эти исследования также выполнены для круп проса, гречихи и ячменя. Ниже приводится краткое описание методики измерений, анализа данных и полученные результаты.

Измерения практической плотности зерна ρ в зависимости от влажности w осуществлялось следующим образом. Проба сухой ($w < 4\%$) зерновой массы весом 100 г (рисунок 9.8) засыпалась в мерную емкость и по возможности трамбовалась. После уплотнения измерялся ее объем.

б

а



Рисунок 9.8 – Измерение массы пшена: а – тары; б – тары с навеской

Для обеспечения надежности измерений каждый опыт производился трижды, после чего результаты осреднялись. Поскольку объем 100 г сухого пшена составил 116 мл, его практическая

плотность $\rho(w \rightarrow 0) = 862 \text{ кг/м}^3$.

Если для проса принять степень заполнения объема k как для шаров равного размера, т.е. $k = 0.74$, можно определить плотность вещества в собственно зернице $\rho_{\text{зерн}}$. Она равна $\rho_{\text{зерн}}(w \rightarrow 0) = \rho(w \rightarrow 0) / k = 1.165 \text{ кг/м}^3$.

Влияние влажности зерна на практическую плотность и плотность вещества в зернице изучалось следующим образом. Из навески 100 г отбирался 1 г, занимающий в малой мерной емкости 1.16 мл, после чего пересчитывалось число зерен в этой массе (рисунок 9.9).



Рисунок 9.9 – Измерение массы зерновки пшена: a – объема; b – числа зерен

По результатам трех опытов в 1 г навеске оказалось $(269 + 276 + + 262) / 3 = 269$ зерен, что соответствует массе одной зерновки в 3.72 мг. Зная плотность зерновки и предполагая шарообразность формы, можно вычислить ее размер d . Для

сухого пшена получено значение $d = 1.83$ мм, хорошо согласующееся с данными непосредственных измерений (рисунок 9.10).



Рисунок 9.10 – Визуальная оценка диаметра зерновки пшена

После оценки параметров сухого пшена исследовалась зависимость объема навески (изначально 100 г), практической плотности, плотности зерновки и ее диаметра от влажности. С этой целью в заполненную пшеном мерную емкость последовательно вводились по 5 мл воды (рисунок 9.11). После каждой вновь введенной дозы смесь гомогенизировалась интенсивным перемешиванием (встряхиванием, вращением) в течение получа-



Рисунок 9.11 – Дозированное увлажнение пшена

Затем равномерно впитавшее влагу зерно подвергалось описанным выше измерениям. Их результаты сведены в таблице 9.5. Отметим, что кажущаяся плотность и размер зерновки рассчитаны в предположении постоянства $k = 0.74$.



Таблица 9.5 – Объемно-весовые характеристики крупы пшена в зависимости от влажности

№ опыта	Объем воды V , мл	Масса m , г	Объем влажного зерна V , мл	Кажущаяся плотность зерновки $\rho_{\text{зерн}}^{\text{каж}}$, кг/м ³	Размер зерна d , мм
1	0	100	116	116.5	1.83
2	5	105	132	107.0	1.90
3	10	115	134	111.0	1.92
4	15	115	140	111.0	1.94
5	20	120	142	114.0	1.96
6	25	125	146	116.0	1.97

Предварительная математическая обработка этих данных показана на рисунках 9.12-9.13. Вызывает интерес тот факт, что плотность зерновки (не случайно обозначенная в таблице как кажущаяся) должна монотонно убывать при впитывании менее плотной воды. Анализ этого обстоятельства посвящено отдельное исследование.

Зависимость диаметра зерновки от влажности допускает некоторую качественную интерпретацию. При впитывании воды масса зерновки увеличивается на соответствующую величину, а диаметр – пропорционально корню квадратному этой величины. Аппроксимирующая экспериментальные данные формула (рисунок 9.13, график слева) имеет вид:

$$d(w) = d(0) + \xi w^{1/2} \approx 1.83 + 3 \cdot 10^{-4} w^{1/2}. \quad (9.16)$$

Существенная немонотонность зависимости кажущейся плотности зерна от влажности может объясняться лишь деформацией увлажненного зерна и соответствующем увеличении степени уплотнения k . Специально поставленный эксперимент полностью подтверждает эту гипотезу.

Mathcad - [Зерна Влажность 2.xmcd]

Файл Правка Вид Добавить Формат Инструменты Символика

Normal Arial 10 В I U

$\frac{d}{dx}$ $\frac{d^2}{dx^2}$ ∞ \int_a^b $\sum_{n=1}^N$ $\prod_{n=1}^N$ \int \sum \prod $\lim_{x \rightarrow a}$ $\lim_{x \rightarrow a^+}$ $\lim_{x \rightarrow a^-}$ ∇_x

+ Origin := 1
 Число зерен в 1 г $N := 269$

Коэффициент заполнения $k := 0.74$ Вес засыпки 100 г, воды - 0

$\rho_0 := \frac{1}{(1.16 \cdot 10^{-3} \cdot 0.74)}$ Плотность сухой зерновки, кг/м.3 $\rho_0 = 1.165 \times 10^3$

$V_0 := \frac{1.16 \cdot 10^{-6} \cdot 0.74}{N}$ $V_0 = 3.191 \times 10^{-9}$ $d_0 := \sqrt[3]{\frac{V_0}{\pi}}$ $d_0 = 1.827 \times 10^{-3}$

Опыт 1: Диаметр зерновки, мм Вес засыпки 100 г, воды - 5, итого - 105

$V_1 := \frac{1.32 \cdot 10^{-6} \cdot 0.74}{N}$ $V_1 = 3.631 \times 10^{-9}$ $d_1 := \sqrt[3]{\frac{V_1}{\pi}}$ $d_1 = 1.907 \times 10^{-3}$

$\rho_1 := \frac{1 + 0.05}{(1.32 \cdot 10^{-3} \cdot 0.74)}$ Плотность влажной зерновки, кг/м.3 $\rho_1 = 1.075 \times 10^3$

Опыт 2: Диаметр зерновки, мм Вес засыпки 100 г, воды - 10, итого - 110

$V_2 := \frac{1.34 \cdot 10^{-6} \cdot 0.74}{N}$ $V_2 = 3.686 \times 10^{-9}$ $d_2 := \sqrt[3]{\frac{V_2}{\pi}}$ $d_2 = 1.917 \times 10^{-3}$

$\rho_2 := \frac{1 + 0.05 \cdot 2}{(1.34 \cdot 10^{-3} \cdot 0.74)}$ Плотность влажной зерновки, кг/м.3 $\rho_2 = 1.109 \times 10^3$

Опыт 3: Диаметр зерновки, мм

$V_3 := \frac{1.40 \cdot 10^{-6} \cdot 0.74}{N}$ $V_3 = 3.851 \times 10^{-9}$ $d_3 := \sqrt[3]{\frac{V_3}{\pi}}$ $d_3 = 1.945 \times 10^{-3}$

Вес засыпки 100 г, воды - 15, итого - 115

$\rho_3 := \frac{1 + 0.05 \cdot 3}{(1.40 \cdot 10^{-3} \cdot 0.74)}$ Плотность влажной зерновки, кг/м.3 $\rho_3 = 1.11 \times 10^3$

Опыт 4: Диаметр зерновки, мм			
$V4 := \frac{1.42 \cdot 10^{-6} \cdot 0.74}{N}$	$V4 = 3.906 \times 10^{-9}$	$d4 := \sqrt[3]{\frac{6 \cdot V4}{\pi}}$	$d4 = 1.954 \times 10^{-3}$
		Вес засыпки 100 г, воды - 20, итого - 120	
$\rho4 := \frac{1 + 0.05 \cdot 4}{(1.42 \cdot 10^{-3} \cdot 0.74)}$	Плотность влажной зерновки, кг/м ³		$\rho4 = 1.142 \times 10^3$
Опыт 5: Диаметр зерновки, мм			
$V5 := \frac{1.46 \cdot 10^{-6} \cdot 0.74}{N}$	$V5 = 4.016 \times 10^{-9}$	$d5 := \sqrt[3]{\frac{6 \cdot V5}{\pi}}$	$d5 = 1.972 \times 10^{-3}$
		Вес засыпки 100 г, воды - 25, итого - 125	
$\rho5 := \frac{1 + 0.05 \cdot 5}{(1.46 \cdot 10^{-3} \cdot 0.74)}$	Плотность влажной зерновки, кг/м ³		$\rho5 = 1.157 \times 10^3$

Рисунок 9.12 – Предварительный анализ экспериментальных данных: алгоритм

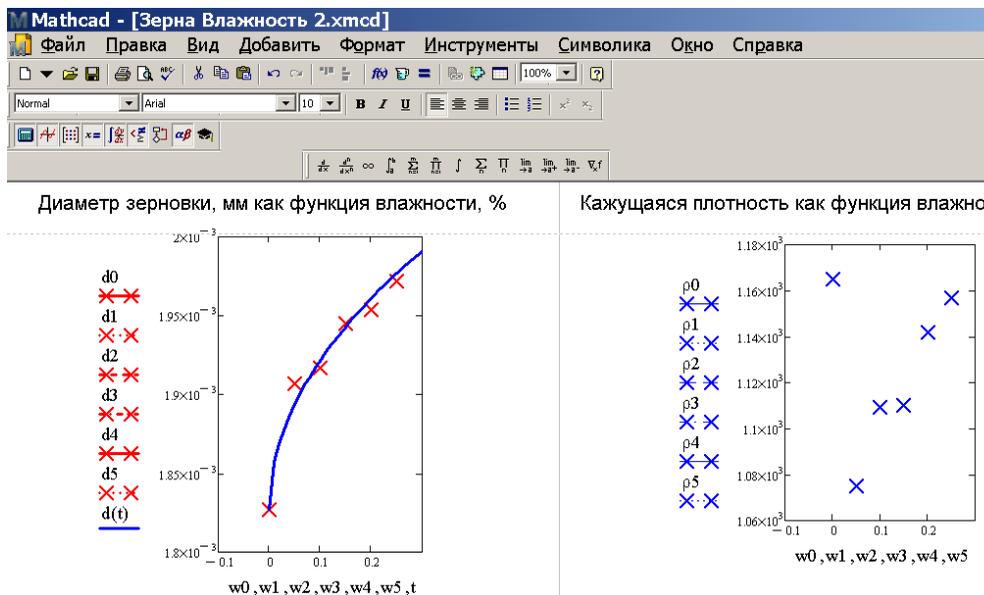


Рисунок 9.13 – Предварительный анализ экспериментальных данных: графическое представление

свойства влажного и сухого зерна. Как видно из данных рисунка 9.14, влажное зерно деформировано и упаковано плотнее, чем сухое, следовательно, коэффициент k должен представлять собой монотонно возрастающую функцию влажности, имеющую своим пределом (для крахмальной каши) единицу.



Рисунок 9.14 – Деформация и уплотнение влажного (20 %) пшена

Способность влажного пшена к деформации и, следовательно, уплотнению при небольшом давлении демонстрирует следующий опыт. Две кучки зерна – одна сухого, другая – влажностью 20 % высыпались на твердую поверхность и подвергались давлению со стороны керамической плитки. Проведение опыта и его результаты показаны на рисунке 9.15. Последние свидетельствуют о справедливости нашей гипотезы о дополнительном уплотнении зерна при увлажнении.

a

б



Рисунок 9.15 – Анализ деформационной способности сухого и влажного зерна: *а* – процесс; *б* – результат

Аналогичные описанным эксперименты проводились также для гречневой и перловой круп. Соответствующие первичные данные приведены в таблицы 9.6 и 3.7. Следует отметить, что все изученные зерновые имеют качественно сходные зависимости $\rho_{\text{зерн}}(w)$ и $d(w)$ при более высокой (по сравнению с пшеном) гигроскопичностью гречихи и существенно более низкой – ячменя.

Важным результатом этих опытов представляется необходимость изучить влияние степени измельчения зерна на коэффициент заполнения объема, от которого в определенной степени зависит диэлектрическая проницаемость. Ниже описаны соответствующие исследования.



Таблица 9.6 – Объемно-весовые характеристики крупы гречихи в зависимости от влажности

№ опыта	Объем воды V , мл	Масса m , г	Объем влажного зерна V , мл	Кажущаяся плотность зерновки $\rho_{\text{зерн}}^{\text{каж}}$, кг/м ³	Размер зерна d , мм
1	0	100	116	116.5	1.83
2	5	105	132	107.0	1.90
3	10	115	134	111.0	1.92
4	15	115	140	111.0	1.94
5	20	120	142	114.0	1.96
6	25	125	146	116.0	1.97

Таблица 9.7 – Объемно-весовые характеристики крупы ячменя в зависимости от влажности

№ опыта	Объем воды V , мл	Масса m , г	Объем влажного зерна V , мл	Кажущаяся плотность зерновки $\rho_{\text{зерн}}^{\text{каж}}$, кг/м ³	Размер зерна d , мм
1	0	100	116	116.5	1.83
2	5	105	132	107.0	1.90



3	10	115	134	111.0	1.92
4	15	115	140	111.0	1.94
5	20	120	142	114.0	1.96
6	25	125	146	116.0	1.97

Исходным положением в приведенной выше интерпретации экспериментальных данных служило, что коэффициент заполнения зерном предоставленного объема есть величина постоянная и равная (для пшена как и для равноразмерных шаров) 0.74. Его непосредственная проверка ставилась целью следующих опытов. Методика состояла в том, чтобы быстро заполнить водой свободный от зерен объем емкости с зерноматериалом и определить количество заполнившей воздушное пространство воды (рисунок 9.16).

Для каждого сорта изучаемого зерноматериала опыт проводился дважды – применительно к цельному и измельченному (среднего помола) образцам в объеме 10 мл.

а

б





Рисунок 9.16 – Определение коэффициента заполнения объема зерном: *a* – помол; *b* – заливка водой

Поскольку мука быстро впитывает воду, коэффициент заполнения объема мукой не производился путем непосредственной заливки. Соответствующее значение пересчитывалось на основании известных массы и объема как первичного, так и измельченного (рисунок 9.17) зерноматериала.



Рисунок 9.17 – Образец исходного и измельченного зерноматериала (гречиха)

Результаты измерений и расчета коэффициента заполнения

объема приведены в таблицах 9.8–9.9. Звездочкой в таблицах помечены значения, пересчитанные по формуле, отражающей сохранение массы при помоле:

$$k_{\text{муки}} = k_{\text{крупы}} \cdot (V_{\text{крупы}} / V_{\text{муки}}) . \quad (9.17)$$



Таблица 9.8 – Упаковочные характеристики пшена

№ опыта	Вид зерна	Объем зерна, мл	Объем воды, мл	Степень заполнения объема k
1	Пшено цельное	10	3.1	0.69
2	Пшено дробленое	10	не заливалась	0.78 *

Таблица 9.9 – Упаковочные характеристики гречихи

№ опыта	Вид зерна	Объем зерна, мл	Объем воды, мл	Степень заполнения объема k
1	Гречиха цельная	10	2.4	0.76
2	Гречиха дробленая	10	не заливалась	0.76 *

Следует отметить, что гречневая крупа имеет сравнительно плотную упаковку, которая не улучшается при помоле, в то время как более правильные по форме зерна просо и ячменя при помоле уплотняются заметным образом.



Таблица 9.10 – Упаковочные характеристики крупы ячменя (перловой)

№ опыта	Вид зерна	Объем зерна, мл	Объем воды, мл	Степень заполнения объема k
1	Ячмень крупа	10	2.8	0.72
2	Ячмень дробленый	10	не заливалась	0.78 *

Погрешность табулированных экспериментальных значений оценивается в 2 %.

Практически значимые вывод из этого исследования следующие:

1) кажущаяся плотность зерновки немонотонно меняется с увеличением влажности;

2) увлажнение зерна сопровождается его уплотнением;

3) измельчение зерна приводит к его уплотнению не во всех случаях – гречиха, например, является исключением, что отражается на электрофизических свойствах – диэлектрическая проницаемость несколько увеличивается;

4) корректно учесть существенно нелинейное влияние всех перечисленных эффектов на диэлектрическую проницаемость зерна не представляется возможным в общем виде: для каждого сорта зерновых требуются отдельные детальные исследования, результаты которых требуют обобщения средствами численного анализа;

5) традиционный многофакторный эксперимент представляется в данном случае не эффективным, т.к. внесет существенное осреднение и «размоет» наблюдавшиеся экспериментально эффекты;

6) брутто-эффект влияния плотности и влажности зерна на диэлектрическую проницаемость наблюдается экспериментально и выражается в более быстром по сравнению с линейным ростом $\varepsilon(\omega)$: это объясняется однонаправленным синергизмом влагосодержания, уплотнения и неемкостного механизма электрической проводимости;

7) разумная погрешность определения $\varepsilon(\omega, \rho, T)$ в контексте пп. 1)-6) допускает исключить их этой зависимости плотность ρ , внося при этом относительную погрешность, вряд ли превышающую 10 %.

9.2.3 Зависимость диэлектрической проницаемости зерна от температуры

Все описанные выше эксперименты выполнялись при комнатной температуре ($18 \div 22$ °C), в то время как термическая обработка в индукционных аппаратах и СВЧ-печах происходит в диапазоне температур $-0 \div 100$ °C или даже более широком. В этом диапазоне диэлектрическая проницаемость основного агента – воды изменяется на 25 %. Соответственно это должно проявляться на связи диэлектрической проницаемости зерна с температурой.

Соответствующее исследование проводилось по нижеописанной схеме. Зерновой материал невысокой влажности $6 \div 10 \%$ нагревался в духовом шкафу до температуры $\sim 100 \text{ }^\circ\text{C}$, после чего извлекался и тщательно перемешивался. Температура измерялась с помощью термометра. Затем зерноматериал засыпался в измерительную ячейку, и определялась его диэлектрическая проницаемость. Затем он снова подвергался измерению температуры, после чего процесс повторялся, пока температура зерна не приближалась к комнатной. За температуру зерноматериала принималась средняя между значениями до и после измерения диэлектрической проницаемости.

Первичные экспериментальные данные для круп пшена, гречихи и ячменя сведены в таблицы 9.11-9.13, а результаты математической обработки этих данных показаны на рисунке 9.18.

Таблица 9.11 – Зависимость диэлектрической проницаемости крупы пшена от температуры

№ опыта	$T_{\text{нач,}}$ $^\circ\text{C}$	$T_{\text{кон,}}$ $^\circ\text{C}$	$T,$ $^\circ\text{C}$	ε
1	76	68	72	2.72
2	68	63	65	2.84
3	63	58	61	2.93
4	58	53	56	3.04
5	53	46	49	3.15
6	46	39	42	3.23
7	39	31	35	3.38
8	31	24	27	3.51
9	24	22	23	3.65

Таблица 9.12 – Зависимость диэлектрической проницаемости гречневой крупы от температуры

№ опыта	$T_{\text{нач,}}$ $^\circ\text{C}$	$T_{\text{кон,}}$ $^\circ\text{C}$	$T,$ $^\circ\text{C}$	ε
---------	---------------------------------------	---------------------------------------	--------------------------	---------------

1	79	69	64	2.69
2	69	62	65	2.89
3	62	55	58	2.95
4	55	49	52	3.05
5	49	43	46	3.17
6	43	35	39	3.29
7	35	29	32	3.43
8	29	25	27	3.54
9	25	23	24	3.69

Таблица 9.13 – Зависимость диэлектрической проницаемости перловой крупы от температуры

№ опыта	$T_{\text{нач}},$ °C	$T_{\text{кон}},$ °C	$T,$ °C	ε
1	81	74	77	2.72
2	74	66	70	2.84
3	66	59	53	2.93
4	59	53	56	3.04
5	53	47	50	3.15
6	47	40	43	3.23
7	40	32	36	3.38
8	32	27	29	3.51
9	27	24	25	3.65

Данные рисунка 9.18 свидетельствуют, что при выбранной одинаковой влажности различные зерновые демонстрируют идентичную температурную зависимость, причем сильно коррелирующую с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости воды. Отмеченное обстоятельство подтверждается повторным опытом, при котором все образцы зерна увлажнялись до $\sim 12\%$, а затем нагревались и охлаждались при пошаговом измерении диэлектрической проницаемости. Результаты качественно повторяют данные таблиц 9.11-9.13, отличаясь лишь числовым множителем в аппроксимирующей формуле. Для приведенных

здесь данных она имеет вид:

$$\varepsilon(T) \approx 4.05 - 0.018 T, \quad (9.18)$$

в которой температура выражена в градусах Цельсия. Отмеченное обстоятельство свидетельствует о справедливости факторизации зависимости $\varepsilon(W, \rho, T)$ для температурной составляющей.

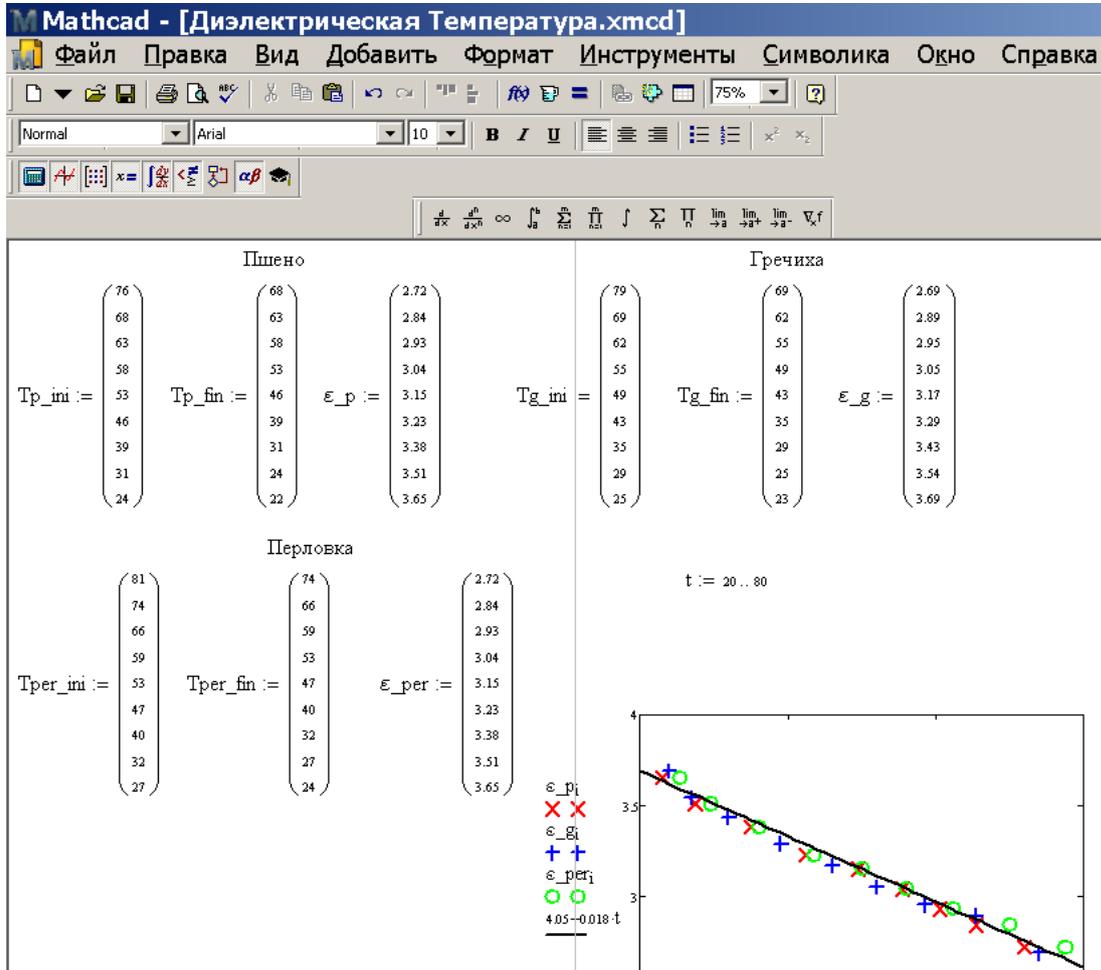


Рисунок 9.18 – Зависимость диэлектрической проницаемости зерна от температуры. Зерно различных видов предварительно увлажнено до $\sim 7\%$

Выводы:

Результаты исследований этой главы можно подытожить следующим образом:

- в силу сложности реальной зависимости $\varepsilon(w, T, k)$ типа регуляризирующих (3n-4n), ее инициализация требует огромного объема экспериментальных данных, существенно превышающего выполненные также в части детальности;

- выполненные исследования, однако, позволяют инициализировать рабочую математическую модель (3n-4n) с некоторыми, выявившимися в ходе экспериментов уточнениями, но, несмотря на это, с относительной погрешностью определения ε на основе теоретической зависимости $\varepsilon(w, T, k)$ с погрешностью порядка 10 %; для этого предлагается обобщающая формула:

$$\varepsilon(w, T, k) \approx \varepsilon(w, T, k = 0.7) \approx 1.75 \cdot (1 - 0.0028 T) \cdot e^{0.101 \cdot w}.$$

ГЛАВА 10. РЕКОМЕНДАЦИИ К ПРАКТИЧЕСКОМУ ИСПОЛЬЗОВАНИЮ РАЗРАБОТКИ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ ВУЗА И ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗА ЗЕРНОВЫХ НА ВЛАЖНОСТЬ

Важными задачами диссертационной работы является внедрение результатов выполненных научных исследований в учебный процесс университета, а также реализация более мобильной по сравнению с описанными методики измерения диэлектрической проницаемости зерноматериалов. Их решение описано в следующих параграфах и служит практическим руководством к широкому внедрению *выносимых на защиту* результатов:

- методики определения диэлектрической проницаемости зерноматериалов путем измерения емкости засыпного конденсатора;
- конструкции экспериментальной установки для быстрого определения диэлектрической проницаемости зерновых и связанных с ними физико-технологических параметров кондуктивным методом;
- результатов экспериментальных исследований связи важных физико-технологических параметров зерноматериалов (сорта зерна, влажности, степени измельчения, температуры) с диэлектрической проницаемостью;
- специализированного программного обеспечения, существенно автоматизирующего процесс определения практически значимых физико-технологических свойств зерноматериалов.

Рекомендации к применению выносимых на защиту результатов описаны в следующем параграфе.

10.1 Измерение диэлектрической проницаемости и влажности зерна в лабораторном практикуме университета

Целью лабораторной работы ставится измерение диэлектрической проницаемости зерна и оценка его влажности по экспериментальным научным данным о связях критичных физико-технологических показателей.

Задачами, обеспечивающими ее реализацию, являются:

- ознакомление с принципом измерений диэлектрической проницаемости кондуктивным методом;
- изучение конструкции установки, особенностей ее схематических решений, функционирования, а также сопутствующих измери-

тельных погрешностей

- уяснение индивидуального задания на мини-исследование;
- самостоятельная сборка установки, при необходимости ее калибровка и/или градуировка;
- подготовка (кондиционирование) надлежащей пробы зерна;
- проведение непосредственных измерений;
- математическая обработка результатов измерений, их интерпретация;
- формулировка содержательных выводов (о результатах опытов, достоинствах и недостатках используемой методики, возможностях ее применения на практике).

Для проведения опытов используется установка в составе:

- измерительная ячейка на основе плоского засыпного конденсатора объемом 1.08 л и электрической емкостью 110 пФ;
- электронный измеритель емкости на базе модифицированного прибора Ф4320 с набором накладных прозрачных градуировочных шкал (или на базе звуковой карты ПК – по выбору преподавателя);
- комплект соединительных проводов с зажимами;
- термометр ртутный широкодиапазонный.

Рекомендуемый порядок выполнения опытов:

1. Собрать установку согласно схеме (*рисунок электрическая схема установки, указать главу*).
2. Измерить емкость пустой ячейки, результаты запротоколировать.
3. Засыпать в ячейку выданную преподавателем пробу зерна; повторить измерения аналогично п.2.
4. Рассчитать диэлектрическую проницаемость образца по *формулам главы 1*, результаты запротоколировать.
5. Измерить температуру зерна, результаты запротоколировать.
6. По формулам главы 3 на основе данных измерений рассчитать влажность зерна, результаты запротоколировать.
7. В соответствии с заданием преподавателя повторить пп.3-6.; результаты обобщить и объяснить.
8. Аккуратно продемонстрировать установку.
9. Оформить надлежащим образом отчет о проделанной работе.

10.2 Адаптация диссертационной разработки к применению в полевых условиях

Описанная в предыдущем параграфе установка подразумевает использование в стационарных (лабораторных) условиях. Полевому применению препятствуют конструктив и габариты измерительной ячейки (засыпного конденсатора). Полевые условия требуют значительно уменьшить габариты измерительного конденсатора: при этом, соответственно, сильно уменьшится его электрическая емкость, что делает невозможным ее определение как модифицированным прибором Ф4320, так и звуковой картой ПК.

Сопутствующим миниатюризации изменением электрической подсистемы является существенное повышение частоты тока, протекающего через конденсатор, – до 1 МГц.

В диссертационной работе реализован действующий макет высокочастотного электронного измерителя емкости согласно схеме рисунка Z. Вид макета показан на рисунке 10.1.



Рисунок 10.1 – Высокочастотный электроизмерительный модуль для определения диэлектрической проницаемости зерна в полевых условиях.

Также разработана управляющая программа, код которой приведен в Приложении Б.

Конструкция измерительного датчика с указанием размеров показана на рисунке 10.2.

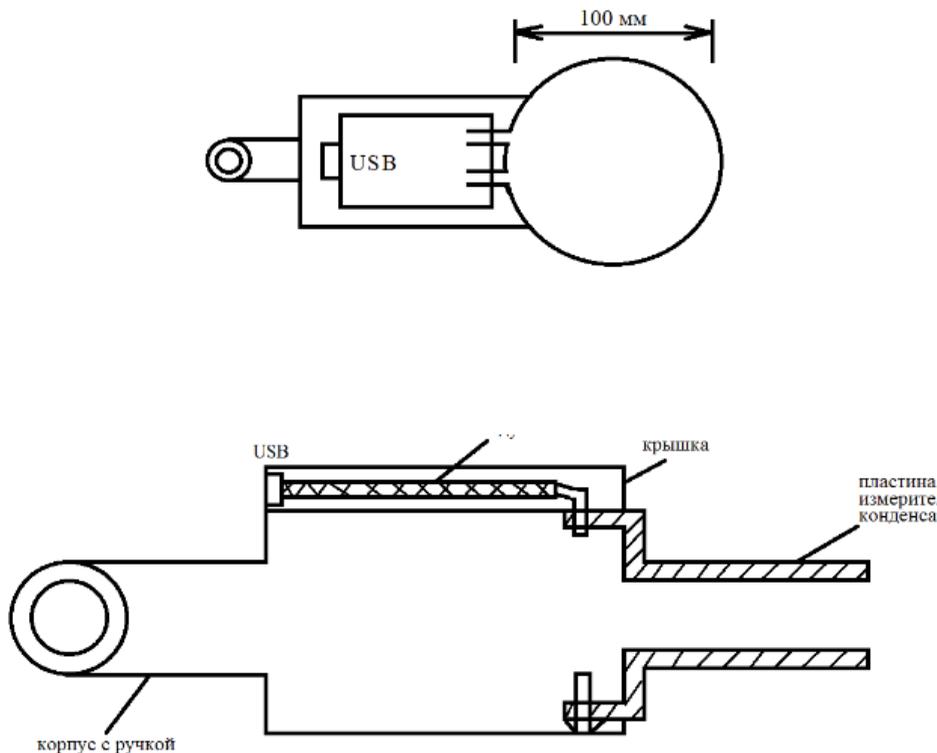


Рисунок 10.2 – Конструкция измерительного датчика для определения диэлектрической проницаемости зерна в полевых условиях

Выводы:

1. Результаты диссертационных исследований и соответствующие инструментально-методические наработки адаптированы к учебному процессу и НИРС университета.
2. Для использования диссертационных результатов в практическом экспресс-анализе физико-технологических свойств зерноматериалов разработан и испытан макет соответствующей установки; разработано необходимое программное обеспечение.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках диссертационной работы произведен монографический и теоретический анализ взаимосвязи физико-

технологических показателей зерноматериалов с их диэлектрической проницаемостью. Комплексно проанализированы современные методы и средства измерения диэлектрической проницаемости сельскохозяйственной пищевой продукции. Разработано приборное и методическое обеспечение измерений диэлектрической проницаемости зерновых, а именно выбрана конструкция и рассчитаны параметры экспериментальной измерительной ячейки (плоского засыпного конденсатора), спроектирована и реализована электрическая часть (электрический тракт установки), проведена тарировка отдельных модулей установки (измерительной ячейки и электроизмерительного прибора), проведены тестовые испытания в целях отработки эффективной методики измерений.

Диссертационное исследование включило в себя проведение ряда экспериментальных исследований для выявления связей диэлектрической проницаемости зерна с основными технологическими показателями нескольких видов зерновых культур.

Важным результатом исследования выступает усовершенствование модуля электрических измерений для определения диэлектрической проницаемости зерновых материалов, которое представляло собой интеграцию измерительного устройства и ЭВМ, обрабатывающей данные. Это решение послужило совершенствованию и удешевлению измерений. Также разработка была адаптирована к экспресс-измерениям влажности зерна потенциальными пользователями (разработка мобильной конструкции зонда).

Составлены методические рекомендации по использованию диссертационной разработки в учебном процессе университета, которые предполагают проведение лабораторных работ на базе электронного измерителя емкости (модифицированный прибор Ф4320), так и на базе звуковой карты ПК.

Список первоисточников к параграфу 9.2

1. ГОСТ 16470-84. Ячмень. Требования при заготовках и поставках.
2. ГОСТ Р 56105-2014. Гречиха. Технические условия.
3. ГОСТ 22983-2016. Просо. Технические условия.
4. Прибор комбинированный Ф4320. Паспорт.
5. Белов, А.А. Совершенствование технологии и сверхвысокочастотных установок для повышения кормовой ценности фуражного зерна: диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук/ А.А. Белов. – Москва, 2016. – 416 с.

6. Определение диэлектрических параметров семян сельскохозяйственных культур с учетом эффектов бокового электрического поля измерительного конденсатора / А.Е. Козырев, В.И. Хайновский, О.С. Копылова, П.В. Никитин // Научный журнал КубГАУ. – 2013. – №85 (01) – 12 с.
7. Serpil Sahin. Physical Properties of Foods / Serpil Sahin, Servet Gülüm Sumnu. – Ankara, 2006. – p. 257.
8. Stuart O. Nelson. Factors Influencing the Dielectric Properties of Agricultural and Food Products / Stuart O. Nelson, Samir Trabelsi // Journal of Microwave Power and Electromagnetic Energy. – 2012. – №46 (2) – pp. 93-107.
9. C. Gabriel. The dielectric properties of biological tissues: I. Literature survey / C. Gabriel,

ГЛАВА 11. ПРАКТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В МИКРОСИСТЕМАХ

11.1. Моделирование квантовых систем (Забелин)

Физики всегда думают о том, как использовать новые идеи и явления в технике. Научившись создавать совершенные полупроводниковые структуры – квантовые ямы и барьеры, в которых движение электронов подчиняется законам квантовой механики, - они сразу же приступили к разработке новых электронных приборов. И хотя эти квантовые приборы еще не заменили обычные диоды, транзисторы и пр., их потенциальные возможности оцениваются очень высоко.

Наиболее успешно квантовые структуры используются для создания лазеров. Уже сегодня эффективные лазерные устройства на квантовых ямах дошли до рынка и применяются в волоконно-оптических линиях связи.

Прошло более 30 лет с тех пор, как началось изучение квантовых эффектов в полупроводниковых структурах. Были сделаны замечательные открытия в области физики низкоразмерного электронного газа, достигнуты поразительные успехи в технологии, построены новые электронные и оптоэлектронные приборы. И сегодня в физических лабораториях активно продолжают работу, направленные на создание и исследование новых квантовых структур и приборов, которые станут элементами больших

интегральных схем, способных с высокой скоростью перерабатывать и хранить огромные объемы информации. Возможно, что уже через несколько лет наступит эра квантовой полупроводниковой электроники.

В данной курсовой работе приведен пример практического расчета поведения электрона в структуре «малой размерности». Приведен пример расчета идеальной невозмущенной потенциальной ямы. На подобных потенциальных ямах и возможно создание абсолютно новой элементной базы квантовой наноэлектроники.

Поэтому целью работы является разработка и исследование аналитических и численных моделей микрочастицы в потенциалах различной формы, представляющих интерес в науке и технике, главным образом, в молекулярной спектроскопии.

Достижение поставленной цели осуществлялось посредством решения следующих задач:

- 1 изучения известных в квантовой механике моделей микрочастицы, удерживаемой потенциальным полем и техники их анализа;
- 2 ознакомления с существующими аналитическими и численными методами решения линейной краевых задач на собственные значения типа Штурма – Лиувилля;
- 3 разработки разнородных алгоритмов численного и аналитического исследования связанных состояний микрочастицы в потенциальных полях различной формы;
- 4 конструирования компьютерных моделей, описывающих поведение актуальных для науки и приложений квантовых осцилляторов;
- 5 выработки стандартов пользовательского интерфейса с учетом действующих санитарных правил и норм и гигиенических рекомендаций в отношении трудового процесса с применением ПК;
- 6 реализации системы моделей в виде расчетных модулей с использованием пакетов прикладной математики MathCAD, Maple и Mathematica;

7 проведение вычислительного эксперимента с разработанными моделями в целях выяснения области их применимости и степени адекватности.

Результат работы, полученный путем решения поставленных задач, следующий:

- с использование аналитических и вычислительных средств прикладной математики разработаны и апробированы методы моделирования одномерных квантовых осцилляторов в силовых полях различной формы, важных для целей спектроскопии;
- расчетами подтверждена корректность осуществленных в работе математических постановок краевой задача для уравнения Шредингера, а также эффективность выбранных методов и средств предметного вычислительного эксперимента;
- проиллюстрирована возможность решения обратных задач молекулярной и др. видов спектроскопии для одномерного квантового осциллятора на основе дипломных разработок (конечно, при надлежащей регуляризации).

ГЛАВА 12. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ СТАЦИОНАРНОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

12.1 Классификация дифференциальных уравнений

Первоначально дифференциальные уравнения возникли из задач механики, в которых требовалось определить координаты тел, их скорости и ускорения, рассматриваемые как функции времени при различных воздействиях. К дифференциальным уравнениям приводили также некоторые рассмотренные в то время геометрические задачи.

Основой теории дифференциальных уравнений стало дифференциальное исчисление, созданное Лейбницем и Ньютоном (1642—1727). Сам термин «дифференциальное уравнение» был предложен в 1676 году Лейбницем.

Дифференциальное уравнение (ДУ) — уравнение, связывающее значение производной функции с самой функцией, значениями независимой переменной, числами (параметрами). Порядок входящих в уравнение производных может быть различен (формально он ничем не ограничен). Производные, функции, независимые переменные и параметры могут входить в уравнение в различных комбинациях или все, кроме хотя бы одной производной, отсутствовать вовсе.

Обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) — это уравнения, зависящие от одной независимой переменной; они имеют вид:

$$F(x, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0 \quad \text{или} \\ F\left(x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2y}{dx^2}, \dots, \frac{d^ny}{dx^n}\right) = 0, \quad (12.1)$$

где F — неизвестная функция (возможно, вектор-функция; в таком случае часто говорят о системе дифференциальных уравнений), зависящая от независимой переменной x штрих означает дифференцирование по x . Число n называется порядком дифференциального уравнения.

Наиболее практически важными являются дифференциальные уравнения первого и второго порядка. Примером такого уравнения является уравнение Шрёдингера для стационарных состояний.

Дифференциальные уравнения в частных производных (ДУЧП) — это уравнения, содержащие неизвестные функции от нескольких переменных и их частные производные. Общий вид таких уравнений можно представить в виде:

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_m, z, \frac{\partial z}{\partial x_1}, \frac{\partial z}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial z}{\partial x_m}, \frac{\partial^2 z}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 z}{\partial x_1 \partial x_2}, \frac{\partial^2 z}{\partial x_2^2}, \dots\right) = 0 \quad (12.2)$$

где x_1, x_2, \dots, x_n — независимые переменные, а $z = z(x_1, x_2, \dots, x_n)$ — функция этих переменных. Порядок уравнений в частных производных может определяться так же, как для обыкновенных дифференциальных уравнений. Ещё одной важной классификацией уравнений в частных производных является их разделение на уравнения эллиптического, параболического и гиперболического типа, в особенности для уравнений второго порядка.

Зависящее от времени уравнение Шрёдингера является типичным ДУ в частных производных:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t). \quad (12.3)$$

где \vec{r}, t — независимые переменные, а волновая функция $\Psi(\vec{r}, t)$ является функцией от времени и координат (радиус вектора), ∇^2 — дифференциальный оператор Лапласа, \hbar — константа Дирака и масса, $V(\vec{r}, t)$ — функция потенциала.

Как обыкновенные дифференциальные уравнения, так и уравнения в частных производных можно разделить на линейные и нелинейные. Дифференциальное уравнение является линейным, если неизвестная функция и её производные

входят в уравнение только в первой степени (и не перемножаются друг с другом). Для таких уравнений решения образуют аффинное подпространство пространства функций. Теория линейных ДУ развита значительно глубже, чем теория нелинейных уравнений. Общий вид линейного дифференциального уравнения n -го порядка:

$$p_n(x)y^{(n)}(x) + p_{n-1}(x)y^{(n-1)}(x) + \dots + p_0(x)y(x) = r(x) \quad (12.4)$$

где $p_i(x)$ — известные функции независимой переменной, называемые коэффициентами уравнения. Функция $r(x)$ в правой части называется свободным членом (единственное слагаемое, не зависящее от неизвестной функции) Важным частным классом линейных уравнений являются линейные дифференциальные уравнения с постоянными коэффициентами.

Из квантовой механики примером линейного дифференциального уравнения служит уравнение Шрёдингера для стационарных состояний:

$$\Delta\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \quad (12.5)$$

Подклассом линейных уравнений являются однородные дифференциальные уравнения — уравнения, которые не содержат свободного члена: $r(x) = 0$. Для однородных дифференциальных уравнений выполняется принцип суперпозиции: линейная комбинация частных решений такого уравнения также будет его решением. Все остальные линейные ДУ называются неоднородными.

Нелинейные дифференциальные уравнения в общем случае не имеют разработанных методов решения, кроме некоторых частных классов. В некоторых случаях (с применением тех или иных приближений) они могут быть сведены к линейным. Кубическое уравнение Шрёдингера, играющее важную роль в нелинейной оптике и физике плазмы, является нелинейным (см. третье слагаемое в левой части) и выглядит следующим

образом:

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \nu |u|^2 u = 0 \quad (12.6)$$

где $u(x,t)$ – комплекснозначная функция.

Общим решением обыкновенного ДУ n -го порядка является n -параметрическое семейство функций. А общее решение ДУЧП определено с точностью до k произвольных функций, где k – порядок уравнения. Для практических целей интересно или же достаточно знать конкретные, т.н. частные решения – решения, удовлетворяющие некоторым дополнительным условиям. Для ОДУ n – порядка таких условий (взаимно не противоречивых) требуется n . Для ДУЧП ситуация более сложная и здесь не рассматривается. Среди дополнительных условий для выбора частного решения ДУ обычно используются краевые или начальные условия. В системе с начальными условиями ДУ обозначается как задача Коши, а с краевыми – как краевая задача.

12.2 Краевые задачи в квантовой механике

В качестве примеров рассмотрим несколько простых потенциалов: прямоугольный потенциал бесконечной и конечной высоты, параболический и потенциал Морзе.

12.2.1 Бесконечно глубокая потенциальная яма

Пусть область нулевого потенциала занимает отрезок от $-L/2$ до $L/2$, вне которого потенциал стремится к $+\infty$, как показано на рисунке 12.1.

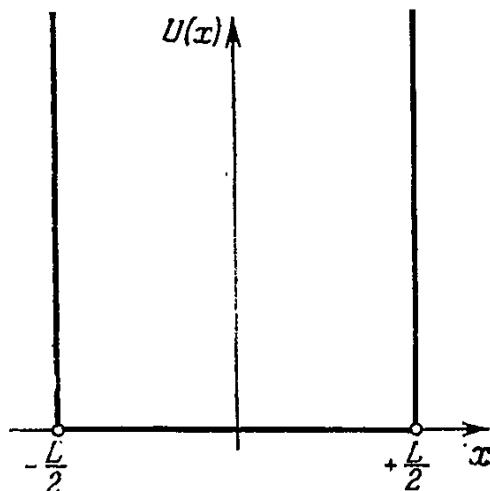


Рисунок 12.1 — Бесконечно глубокая потенциальная яма

Задача о собственных значениях уравнения Шрёдингера (далее УШ) сводится к нахождению $\psi(x)$, обращаящейся в нуль при $x = \pm L/2$ и удовлетворяющей внутри указанного отрезка УШ:

$$\psi'' + \epsilon\psi = 0. \quad (12.7)$$

Общее решение есть линейная комбинация $\sin kx$ и $\cos kx$ ($k = \sqrt{\epsilon}$). Решения, одновременно удовлетворяющие двум граничным условиям, существуют только при некоторых дискретных значениях ϵ , а именно:

$$\epsilon_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \quad (n = 1, 2, \dots, \infty) \quad (12.8)$$

(решения, для которых $kL = n\pi$). Каждому из этих значений ϵ_n соответствует одна и только одна собственная функция (вырождения нет).

Этот простой результат вызывает целый ряд общих замечаний. Во-первых, данный результат принципиально отличается от результата классической механики. В том же потенциале классическая частица может двигаться при любой положительной энергии. Это будет периодическое движение туда и обратно между двумя потенциальными стенками, находящимися на концах интервала $(-L/2; +L/2)$. В квантовой механике движение может иметь место только при некоторых определенных дискретных значениях энергии: энергия частицы квантуется.

Второе замечание касается четности собственных функций. Функции четные, если n нечетно и нечетные, если n четно. То обстоятельство, что собственные функции обладают определенной четностью, связано со свойствами потенциала, который является четной функцией относительно начала координат: $U(x) = U(-x)$

Последнее замечание относится к числу узлов собственных функций. По определению узлы суть точки, в которых функция обращается в нуль (за исключением нулей на концах интервала $(-L/2; +L/2)$). Число узлов монотонно растет с ростом собственного значения энергии, оно увеличивается на единицу при переходе от некоторого собственного значения к ближайшему последующему: собственная функция основного состояния не имеет узлов, собственная функция $n - 1$ -го возбужденного состояния ψ_n имеет $n-1$ узел и т. д. Полезно подчеркнуть аналогию с числом узлов стационарных состояний закрепленной на концах колеблющейся струны. Сходство здесь полное, так как математически обе задачи тождественны.

12.2.2 Бесконечно глубокая параболическая яма

Гармоническим осциллятором называется система, способная совершать гармонические колебания. Примером таких колебаний в квантовой механике являются колебания атомов в твёрдых телах, молекулах и т.д.

На рисунке 12.2 слева изображена потенциальная энергия U взаимодействия атомов в двухатомной молекуле (типа NaCl) в зависимости от расстояния r между ядрами атомов. Из вида кривой $U(r)$ следует, что атомы в молекуле могут совершать колебания относительно равновесного расстояния r_0 между ядрами.

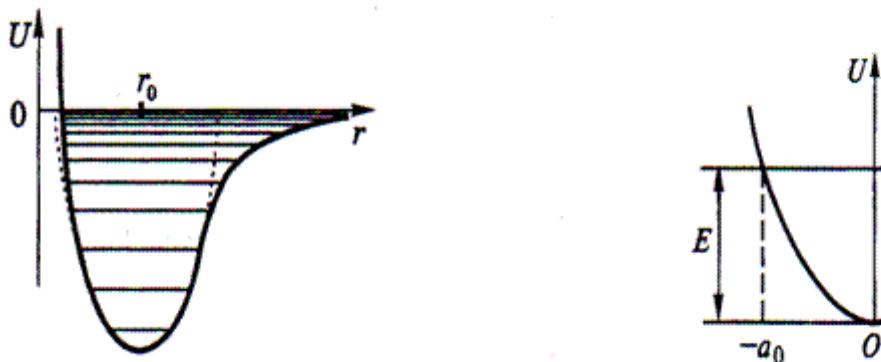


Рис.12.2. Реальный межмолекулярный потенциал (слева) и его гармоническое приближение (справа)

Квантово-механическая задача о гармоническом осцилляторе сводится к задаче о движении частицы вдоль оси Ox в параболической потенциальной яме под действием возвращающей квазиупругой силы $F(x) = -kx$ (рисунок 12.2 справа). Выражение для потенциальной энергии такого осциллятора имеет вид:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m_0\omega^2}{2}x^2 \quad (12.9')$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$$

где ω – собственная частота классического гармонического осциллятора.

Графиком этой функции $U(x)$ является парабола. Точки $x = -a_0$ и $x = a_0$, в которых полная энергия $E = U(x)$, являются для частицы точками поворота.

Амплитуду колебаний находим из выражения

$$a_0 = \sqrt{\frac{2E}{m_0\omega^2}}, \quad (12.10)$$

Уравнение Шрёдингера в данном случае имеет вид:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E - \frac{m_0\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0 \quad (12.11)$$

Это уравнение имеет конечные, однозначные, непрерывные и гладкие решения (собственные функции) при собственных значениях E , равных:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (12.12)$$

где $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Энергетические уровни расположены на одинаковом расстоянии друг от друга $\Delta E = \hbar\omega$.

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Минимальная энергия и её называют нулевой энергией.

Отличие от нуля минимальной энергии осциллятора характерно для всех квантовых систем и является следствием принципа неопределённости.

Для квантового осциллятора возможны переходы лишь между соседними «стационарными» уровнями, при которых квантовое число n изменяется на единицу $\Delta n = \pm 1$ (правило отбора). При каждом из этих переходов

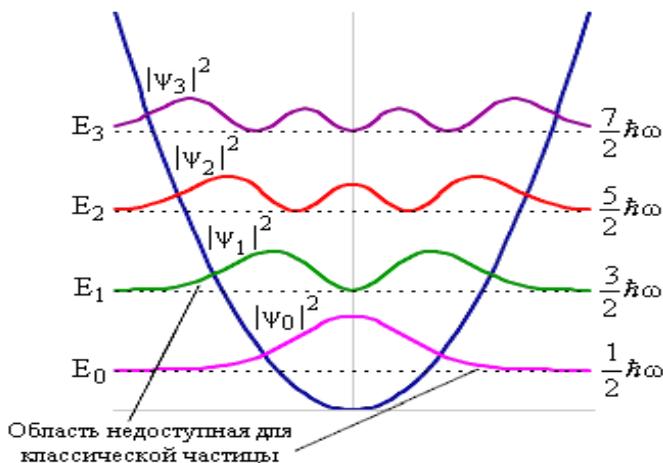
дов испускается или поглощается фотон с энергией $\hbar\omega$, где ω – его циклическая частота.

Собственные функции – решения задачи выражаются через полиномы Эрмита $H_n(Q)$:

$$\sqrt{(2^n n!)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{Q^2}{2}} H_n(Q)} \quad (12.13)'$$

где $H_n(Q) = (-1)^n e^{Q^2} \left(\frac{d^n}{dQ^n} e^{-Q^2} \right)$ $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$, а

$Q = \sqrt{m(x/\hbar)}$. На рисунке 12.3 приведены графики распределения плотности вероятности месторасположения частицы при $n = 0, 1, 2, 3$.



Рисунке 12.3 — Квадраты волновых функций бесконечно глубокой потенциальной ямы параболической формы.

Жирными отрезками на оси ox показаны интервалы, на концах которых $E = U$. Классическая частица при колебаниях за пределы интервала заходить не может. Квантовая частица может быть обнаружена и вне пределов этих интервалов. Аналогичное отли-

чие этого потенциала от прямоугольной бесконечной ямы, за пределы которой квантовая частица также выйти не может.

Если стенки гармонического осциллятора ограничены по высоте, то энергетические связанные состояния сместятся вверх тем больше, чем ниже стенки. Ситуация аналогична яме с прямоугольными стенками (там их ограничение по высоте также приводит к поднятию уровней). Естественно, что число уровней в яме ограниченной высоты конечно.

В таблице 12.1 сведены нормированные собственные функции для собственных значений энергии.

Таблица 12.1 — Конечный вид решения задачи

n	Собственные значения энергии E_n	Нормированные собственные функции Ψ_n
0	$E_0 = \hbar\nu/2$	$\Psi_0 = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-a^2x^2/2}$
1	$E_1 = 3\hbar\nu/2$	$\Psi_1 = \left(\frac{a}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2ax e^{-a^2x^2/2}$
2	$E_2 = 5\hbar\nu/2$	$\Psi_2 = \left(\frac{a}{8\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (4a^2x^2 - 2)e^{-a^2x^2/2}$
3	$E_3 = 7\hbar\nu/2$	$\Psi_3 = \left(\frac{a}{48\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (8a^3x^3 - 12ax)e^{-a^2x^2/2}$
n	$E_n = (n + 1/2)\hbar\nu$	$\Psi_n = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{1/2} H_n(ax)e^{-a^2x^2/2}$

12.2.3 Конечная потенциальная яма прямоугольного профиля со стенками разной высоты

Эту модель рассмотрим особенно подробно, поскольку она служит

базовой для нашей постановки задачи.

В качестве нового примера возьмем потенциал, изображенный на рисунке 12.4. Здесь функция $U(x)$ принимает вид:

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & x > a \quad (\text{область I}) \\ U_2 & a > x > b \quad (\text{область II}) \\ U_3 & b > x \quad (\text{область III}) \end{cases}; \quad (12.14)$$

причем $U_2 < U_1 < U_3$

Задача о собственных значениях представляется различной в зависимости от величины ε по сравнению с постоянными U_1 , U_2 и U_3 .

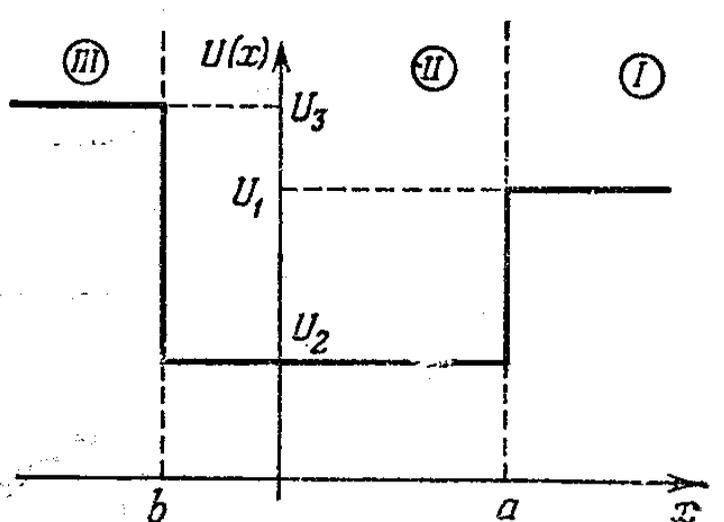


Рисунок 12.4 — Схема потенциала модельной задачи

Рассмотрим случай $U_2 < \varepsilon < U_1$. Общее решение ведет се-

бя экспоненциально во внешних областях I и III, а во внутренней области характер его поведения осцилляторный. Чтобы быть приемлемым в качестве собственной функции, решение должно экспоненциально затухать в обеих внешних областях. Существует одно и только одно решение, экспоненциально затухающее в области I, а также одно и только одно решение, затухающее в области III; эти два решения согласованно сшиваются только при некоторых определенных дискретных значениях ε . Мы делаем заключение, что энергетический спектр по необходимости дискретен и не вырожден.

Функция ψ , по предположению вещественная, в каждой из трех областей имеет вид:

$$\psi = \begin{cases} A_1 e^{-\chi_1 x} & x > a, \\ A_2 \sin(k_2 x + \varphi) & a > x > b, \\ A_3 e^{\chi_3 x} & b > x. \end{cases} \quad (12.15)$$

Если фаза φ известна, то два условия непрерывности функции определяют постоянные A_1 , A_2 и A_3 (с точностью до постоянного множителя).

Что же касается φ , то она должна удовлетворять одновременно двум условиям непрерывности логарифмических производных:

$$k_2 \operatorname{ctg}(k_2 a + \varphi) = -\chi_1, \quad k_2 \operatorname{ctg}(k_2 b + \varphi) = \chi_3; \quad (12.16)$$

Это возможно в том и только в том случае, когда правые части двух последних уравнений равны. Указанное равенство может быть реализовано только при некоторых дискретных значениях ε_n величины ε , а именно при тех значениях, которые удовлетворяют уравнению:

$$n\pi - k_2(a - b) - \arctg \frac{k_2}{\chi_1} + \arctg \frac{k_2}{\chi_3} = 0, \quad (12.17)$$

Введем следующие обозначения:

$$K = \sqrt{U_1 - U_2}$$

$$\cos \gamma = \sqrt{\frac{U_1 - U_2}{U_3 - U_2}} \quad \left(0 < \gamma < \frac{\pi}{2} \right) \quad (12.18)$$

и новую переменную:

$$\xi = \frac{k_2}{K} = \sqrt{\frac{\varepsilon - U_2}{U_1 - U_2}}. \quad (12.19)$$

Уравнение может быть записано в виде условия для ξ :

$$n\pi - \xi KL = \arcsin \xi + \arcsin(\xi \cos \gamma) \quad (12.20)$$

Последнее уравнение графически решено на рисунке 1.5. Когда ε растет от U_2 до U_1 , ξ растет от 0 до 1, а правая часть уравнения растет от 0 до π , следуя кривой C (которая зависит только от параметра γ). В то же время левая часть уравнения уменьшается от $n\pi$ до $n\pi - KL$, следуя отрезку прямой D_n , чтобы C и D_n пересекались, необходимо и достаточно, чтобы целое число n было достаточно малым:

$$KL \geq (n-1)\pi + \gamma \quad (12.21)$$

Если $KL < \gamma$, собственных значений нет; если $\gamma \leq KL \leq \pi + \gamma$, то существует одно собственное значение ε_1 ; если $\pi + \gamma \leq KL \leq 2\pi + \gamma$, имеется два собственных значения ε_1 и ε_2 ($\varepsilon_1 < \varepsilon_2$) и т. д. Легко видеть, что собственные значения располагаются в порядке возрастания. Они образуют дискретную и конечную последовательность — от основного собственного значения ε_1 до максимального собственного значения, соответствующего наибольшему целому числу, не превосходящему $1 + (KL - \gamma)/\pi$.

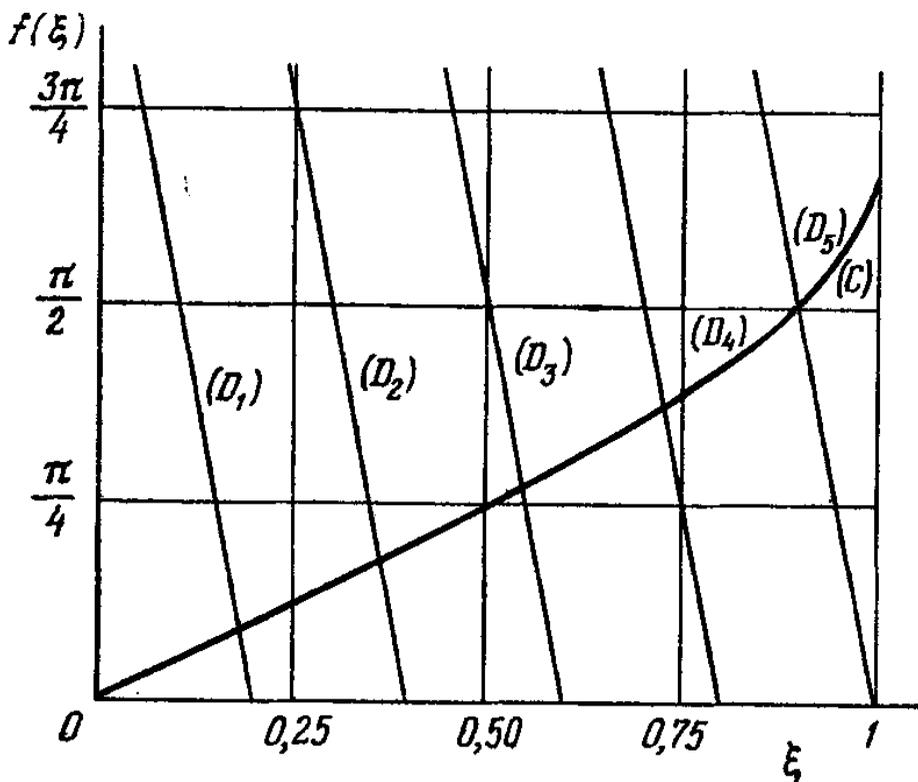


Рисунок 12.5 — Собственным значениям ξ соответствуют точки пересечения кривых

Квантовое число n имеет вполне определенный математический смысл: функция $\sin(k_2x + \varphi)$ обращается в нуль $n - 1$ раз, когда x пробегает интервал (a, b) , а нули этой функции совпадают с нулями ψ . Следовательно, число узлов собственной функции, соответствующей n -му собственному значению ε_n , есть $n - 1$.

В заключение можно провести сравнение с классической ситуацией, как это было сделано в случае бесконечно глубокой потенциальной ямы. Теперь помимо квантования энергии следует отметить дополнительное отличие; поскольку волновая функция сохраняет отличные от нуля значения в областях I и III, существует отличная от нуля вероятность найти частицу и в этих областях, куда доступ классической частице полностью запрещен.

В случае $U_1 < \varepsilon < U_3$ спектр непрерывный и невырожден-

ный. Каждому значению ε соответствует одно и только одно всюду ограниченное решение, именно то, которое экспоненциально затухает в области III: в интервале (U_1, U_3) спектр собственных значений непрерывный и невырожденный.

Мы ищем решение в виде:

$$\psi = \begin{cases} e^{-ik_1x} + e^{i(k_1x+2\varphi_1)} & x > a, \\ 2Ae^{i\varphi_1} \sin(k_2x + \varphi_2) & a > x > b, \\ 2Be^{i\varphi_1} e^{\lambda_3x} & b > x. \end{cases} \quad (12.22)$$



Как и в предшествующих задачах, условия непрерывности логарифмической производной определяют фазы φ_1 и φ_2 . Находим:

$$\varphi_2 = -k_2 b + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\chi_3}, \quad \varphi_1 = -k_1 a - \frac{\pi}{2} + \operatorname{arctg} \left[\frac{k_1}{k_2} \operatorname{tg} \left(k_2 L + \operatorname{arctg} \frac{k_2}{\chi_3} \right) \right], \quad (12.23)$$

в то же время непрерывность самой функции позволяет определить А и В.

Далее мы будем предполагать, что $U_3 - \varepsilon \gg \varepsilon - U_2$ откуда $k_2 \ll k_3$ и, следовательно, $k_1 \ll k_3$. Все происходит так, как если бы область III характеризовалась бесконечно отталкивающим потенциалом, так что $B = 0$. Интересующими нас величинами являются φ_1 и A^2 .

Условимся, что $a = 0$, $b = -L$, и положим:

$$\eta = \frac{k_1}{K} = \sqrt{\xi^2 - 1}. \quad (12.24)$$

тогда после элементарного расчета:

$$\varphi_1 = \arctg\left(\frac{\eta}{\xi} \operatorname{tg} \xi KL\right) - \frac{\pi}{2},$$

$$A^2 = \frac{\eta^2}{\eta^2 + \cos^2 \xi KL}. \quad (12.25)$$

При возрастании энергии фаза φ_1 более или менее регулярным образом растет, в то время как величина A^2 , измеряющая относительную интенсивность волны в области II, осциллирует между значениями $\eta^2/(\eta^2 + 1)$ и 1. Осцилляции тем более значительны, чем больше KL и чем меньше η . Поэтому предположим в дальнейшем, что:

$$KL \gg \zeta \ll 1; \quad (12.26)$$

В этом случае A^2 как функция η^2 (т. е. энергии) обнаруживает серию острых максимумов ширины $4\eta/KL$, отстоящих друг от

друга на $2\pi/KL$. На рисунке 12.6 показано это замечательное поведение A^2 , а также φ_1 в условиях нашего приближения.

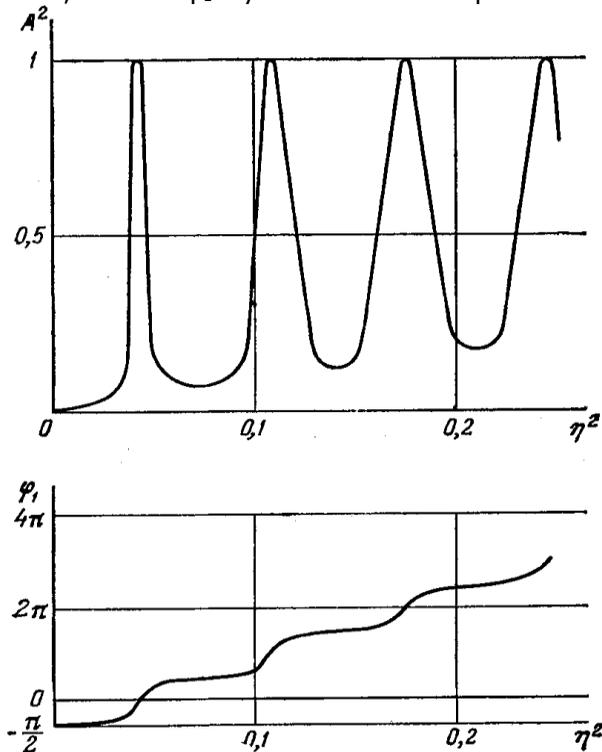


Рисунок 12.6 — Резонансы отражений. Изменение A^2 и φ_1 в зависимости от энергии

Мы сталкиваемся с явлением типично волнового характера – резонансом. Для некоторых ограниченных областей энергии ширины $4\eta/KL$ интенсивность волны порядка 1: положения резонансов соответствуют $\varphi_2 = (n + 1/2)\pi$, т.е. область II содержит $n + 1/2$ полуволн. Вне резонансов интенсивность очень мала.

12.3 Метод малого параметра в решении дифференциальных уравнений

Среди приближенных методов решения дифференциаль-

ных уравнений достаточно распространенным является метод разложения по малому параметру. Идея, положенная в основу метода, проста: в уравнении (или системе) выделяется малый параметр, а решение ищется в виде ряда по этому параметру. К сожалению, далеко не в каждом уравнении такой малый параметр можно выделить.

Точное аналитическое решение уравнения Шредингера можно найти только для очень небольшого числа задач. Во многих случаях удаётся решить задачу численно, но для этого нужны достаточно глубокие знания численных методов, в частности, методов решения дифференциальных уравнений. В то же время, довольно часто удаётся решить уравнение Шредингера приближенно, но с достаточной степенью точности, чтобы объяснить или даже рассчитать количественно какой-либо физический эффект. В квантовой механике метод малого параметра реализуется для одного из приближенных методов решения уравнения Шредингера. Это метод теории возмущений.

Этот метод удобно применять тогда, когда рассматриваемая физическая система незначительно отличается от другой системы, для которой известно аналитическое решение уравнения Шредингера, известны собственные значения энергии и соответствующие собственные функции.

В таком случае первый шаг в решении поставленной физической задачи состоит в точном решении упрощенной задачи, а второй - в приближенном вычислении поправок, обусловленных малыми членами, отброшенными в упрощенной задаче. Предположим, что гамильтониан данной физической системы имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (12.27)$$

где \hat{V} представляет собой малую поправку (возмущение) к «невозмущенному» оператору \hat{H}_0 .

В данной работе мы рассматриваем возмущения \hat{V} , не зависящие явно от времени (то же самое предполагается и в отношении \hat{H}_0). Условия, необходимые для того, чтобы можно было рассматривать оператор \hat{V} как «малый», по сравнению с оператором \hat{H}_0 будут определены ниже.

Задача теории возмущений для дискретного спектра может

быть сформулирована следующим образом. Предполагается, что собственные функции $\psi_n^{(0)}$ и собственные значения $E_n^{(0)}$ дискретного спектра невозмущенного оператора \hat{H}_0 известны, то есть известны точные решения уравнения (1.5). Требуется найти приближенные решения уравнения:

$$\tilde{H}\psi = (\tilde{H}_0 + \tilde{V})\psi = E\psi, \quad (12.28)$$

то есть приближенные выражения для собственных функций ψ_n и значений E возмущенного оператора \hat{H} . Предполагается, что собственные значения оператора \hat{H}_0 не вырожденные, и считаем, что имеется дискретный спектр уровней энергии.

Вычисления удобно производить в матричном виде, для этого разложим искомую функцию ψ по функциям $\psi_n^{(0)}$:

$$\psi = \sum_m C_m \psi_m, \quad (12.29)$$

подставляя это разложение в (12.28) получим:

$$\sum_m C_m (E_m^{(0)} + \tilde{V})\psi_m^{(0)} = \sum_m C_m E \psi_m^{(0)}, \quad (12.30)$$

а умножив это равенство с обеих сторон на $\psi_k^{(0)}$ и интегрируя, найдем:

$$(E - E_k^{(0)})C_k = \sum_m V_{km} C_m, \quad (12.31)$$

Здесь выведена матрица V_{nm} , оператора возмущения \tilde{V} , определенная с помощью невозмущенных функции $\psi_m^{(0)}$:

$$V_{km} = \int \psi_k^{(0)} \tilde{V} \psi_m^{(0)} dq \quad (12.32)$$

Будем искать значения коэффициентов C_m и энергии E в виде рядов:

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots, \quad C_m = C_m^{(0)} + C_m^{(1)} + C_m^{(2)} + \dots \quad (12.33)$$

где величины $E^{(1)}$, $C_m^{(1)}$ - того же порядка малости, что и возмущение \tilde{V} . Величины $E^{(2)}$, - второго порядка малости и т.д.

Определим поправки к n -му собственному значению и собственной функции, в соответствии с чем полагаем, что:

$$C_n^{(0)} = 1, C_m^{(0)} = 0, m \neq n \quad ; \quad (12.34)$$

Для нахождения первого приближения подставим в уравнение (12.31) выражение (12.33), сохранив только члены первого порядка. Уравнение с $m = n$ дает:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \tilde{V} \psi_n^{(0)} dq \quad (12.35)$$

Таким образом, поправка первого приближения к собственному значению $E_n^{(1)}$ равна среднему значению возмущения в состоянии $\psi_n^{(0)}$. Уравнение (1.31) при $m \neq n$ дает:

$$C_m^{(1)} = \frac{V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad m \neq n; \quad (12.36)$$

а $C_n^{(1)}$ остается произвольным и должно быть выбрано так, чтобы функция $\psi_m = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$ была нормирована с точностью до членов первого порядка включительно. Для

$$C_n^{(1)} = 0$$

этого надо полагать $C_n^{(1)} = 0$. Действительно, функция

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}, \quad (12.37)$$

ортогональна к $\psi_n^{(0)}$, а поэтому интеграл от $|\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}|^2$

отличается на единицу лишь на величину второго порядка малости.

Формула (12.37) определяет поправку первого приближения к волновым функциям. Из нее видно условие применимости рассматриваемого метода:

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|, \quad (12.38)$$

то есть матричные элементы возмущения должны быть малы по сравнению с соответствующими разностями невозмущенных уровней энергии. Определим еще поправку второго приближения к собственному значению $E_n^{(0)}$. Для этого подставим в выражение (12.27) равенство (12.33) и рассмат-

риваем члены второго порядка малости. Уравнение при $m = n$ дает:

$$E_n^{(2)} C_n^{(0)} = \sum_{m \neq n} V_{mn} C_m^{(1)}, \quad (12.39)$$

откуда:

$$E_m^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (12.40)$$

Отметим, что поправка второго приближения к энергии нормального состояния всегда отрицательна. Действительно, если $E_n^{(0)}$ соответствует наименьшему значению, то все члены в сумме (12.40) отрицательны. Дальнейшие приближения можно вычислить аналогичным образом. Полученные результаты непосредственно обобщаются на случай наличия у оператора \hat{H}_0 также и непрерывного спектра (причем речь идет по-прежнему о возмущенном состоянии дискретного спектра). Для этого надо только к суммам по дискретному спектру прибавить соответствующие интегралы по непрерывному спектру. Будем отличать различные состояния непрерывного спектра индексом ν , пробегаящим непрерывный ряд значений. Под ν условно подразумевается совокупность значений величин, достаточных для полного определения состояния (если состояние непрерывного спектра вырождены, что почти всегда и бывает, то задание одной только энергии не достаточно для определения состояния; при этом волновые функции $\psi_\nu^{(0)}$ должны быть нормированы на дельта-функцию от величин ν). Тогда, например, вместо (12.37) надо будет писать:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + \int \frac{V_{\nu n}}{E_n^{(0)} - E_\nu} \psi_\nu^{(0)} d\nu, \quad (12.41)$$

И аналогично для других формул.

12.4 Численное интегрирование краевой задачи для уравнения Шрёдингера

Простейшим способом решить краевую задачу для УШ с потенциалом $U(x)$ произвольного вида

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (E - U(x)) \cdot \psi(x) = 0 \quad (12.42)$$

служит метод пристрелки. Как отмечалось выше, частица может находиться в стационарных состояниях с энергией E_n , каждое из которых описывается волновой функцией: допустимые значения энергии E_n образуют дискретный спектр, являясь собственными значениями краевой задачи для УШ.

Решить УШ численно означает подобрать такие значения энергии E_n , при которых функция $\psi(x)$ не расходится, то есть всюду сохраняет конечные значения. Только при этом интеграл от квадрата модуля ψ будет конечной величиной. Величина E_n служит параметром пристрелки. Сначала выбирается некоторое пробное значение E_n , и задача интегрируется, например, методом Эйлера по схеме:

$$\begin{cases} d\psi(x)/dx = \varphi(x), \\ d\varphi(x)/dx = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - U(x)) \cdot \psi(x), \end{cases} \quad (12.43)$$

которая дискретизируется следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{i+1} - \Psi_i / \Delta = \Phi_i, \\ \Phi_{i+1} - \Phi_i / \Delta = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - U(x_{\min} + \Delta \cdot (i-1))) \cdot \Psi_i, \\ i = 1, \dots, I, \quad \Delta = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{I}. \end{array} \right. \quad (12.44)$$

Описанный алгоритм легко реализуем в любом из математических пакетов – MathCAD, Maple или Mathematica.

Описанный алгоритм требует по результатам каждого интегрирования ОДУ (12.43) строить график зависимости $\psi(x)$ и $|\psi(x)|^2$ и контролировать, чтобы $\psi(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm \infty$. Подходящее для этого значение E_n принимается за собственное значение краевой задачи для УШ. Вследствие визуальной оценки качества решения (метод требует построения графиков $\psi(x)$ и $|\psi(x)|^2$ на каждой итерации – см. рис. 12.7) расчет получается приближенным. Однако получаемые таким способом решения устойчивы по отношению к E_n , что позволяет использовать данный метод, например, в учебных целях.

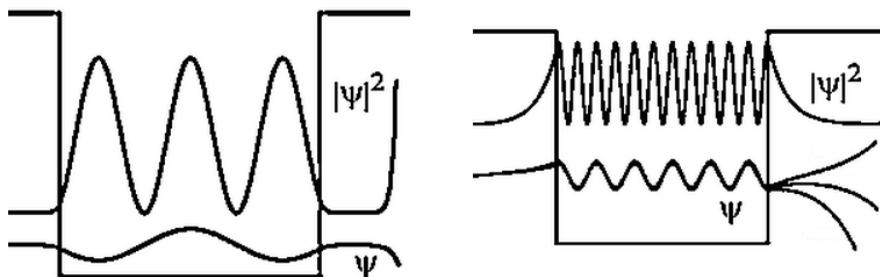


Рис. 12.7 — Результат интегрирования краевой задачи УШ при-
стрелкой



Более тонкий подход предложен Нумеровым. Он состоит во встречном интегрировании (12.43): слева – направо и справа – налево. В некоторой точке $x_i^* = x_{\min} + \Delta \cdot i^*$, где при интегрировании, например, слева $\psi(x)$ принимает локально максимальное значение осуществляется сшивка левого и правого «полурешений». Гладкость сшивки можно обеспечить лишь правильным выбором собственного значения E_n .

Интегрирование в методе Нумерова осуществляется по явной схеме:

$$\psi_{i+1} = \frac{[2 - \frac{5}{6}\Delta^2 \cdot (E_n - U(x_i))] \cdot \psi_i - [1 - \frac{\Delta^2}{12} \cdot (E_n - U(x_{i-1}))] \cdot \psi_{i-1}}{1 + \frac{\Delta^2}{12} \cdot (E_n - U(x_{i+1}))}, \quad (12.45)$$

которая аппроксимирует исходное ОДУ на порядок лучше, чем схема Рунге – Кутты. Естественно в точке сшивки следует отнормировать левое и правое «полурешения» так, чтобы $\psi_-(x_i) = \psi_+(x_i)$: это не проблематично, т.к. УШ – линейное, и, если не вводить дополнительных ограничений, все решения краевой задачи определены с точностью до произвольной постоянной. После такой перенормировки поправка к собственному значению краевой задачи E_n вычисляется по формуле:

$$\Delta E_n = U(x_{i^*}) - E_n + \frac{\hbar^2}{m\Delta^2} \cdot \left[1 - \frac{\Psi_{i-1} + \Psi_{i+1}}{2 \cdot \Psi_i} \right]. \quad (12.46)$$

Когда удовлетворительная точность собственного значения E_n достигнута, описанный итерационный процесс завершается. Программная реализация алгоритма приведена на рисунке 12.8.

Следует отметить, что в окрестности классических точек поворота $E_n = U(x_{n\pm})$ значения $\psi_i = \psi(x_i)$ экспоненциально возрастают с увеличением или уменьшением номера i , и требуется (возможно, неоднократно) перенормировать уже рассчитанные значения. Эта процедура корректна в силу линейности УШ.

```
xwmill[ll_h1_, weil_, xrat1_, ww1_] := Module[{l=ll, h=h1, weit=weil, xrat=xrat1, ww=w
w1}, del=h/10;
  xs=xrat;
  If[xs<del, Goto[11]];
  If[l<1, Goto[3]];
  Label[1];
  If[xs<weit+del, xs=del; Goto[2]];
  ms=ww*vl[xs]+l*(l+1)/xs^2;
  rs=ww*vl[xs+weit]+l*(l+1)/(xs+weit)^2;
  ls=ww*vl[xs-weit]+l*(l+1)/(xs-weit)^2;
  If[rs>ms&&ms>ls, xs=xs-weit; Goto[1]];
  If[rs<ms&&ls>ms, xs=xs+weit; Goto[1]];
  If[rs=ls, Goto[2]];
  If[rs>ms&&ls>ms, If[weit<h, Goto[2]];
  weit=weit/10; Goto[1]];
  Print["SOMETHING IS WRONG, ANALYZE POTENTIAL"];
  Goto[10];
  Label[3];
  Label[1 a];
  If[xs<weit+del, xs=del; Goto[2]];
  ms=ww*vl[xs];
  rs=ww*vl[xs+weit];
  ls=ww*vl[xs-weit];
  If[rs>ms&&ms>ls, xs=xs-weit; Goto[1 a]];
  If[rs<ms&&ls>ms, xs=xs+weit; Goto[1 a]];
  If[rs=ls, Goto[2]];
  If[rs>ms&&ls>ms, If[weit<h, Goto[2]];
  weit=weit/10; Goto[1 a]];
  Print["SOMETHING IS WRONG, ANALYZE POTENTIAL"];
```

```

Goto[10];
Label[11];
Print["XMIN TOO SMALL"];
Goto[10];
Label[2];
xwmin=xs;
Label[10];
Return["end"]],
schroe[el1,eu1,n01,l1,h1,m1,m2]:=Module[{el=e1*ww,eu=e1*ww,n0=n01,l=11,h=h1,
w1=m1,w2=m2},ww=2*w1*w2/(w1+w2);
xwmil1[1,h,0.5,20,ww];
xwmin=xwmin+h;
del=h/10;
feh=0.00001*ww;
diff1[xxx,l,een]:=ww*v1[xxx]+1*(1+1)/xxx 2-een;
Label[300];
seh=eu-el;
eps=(el+eu)/2;
x=del;
y=x (1+1);
yp=(1+1)*x 1;
yold=1;
n0x=0;
If[seh<feh,Goto[1]];
Label[2];
a1=yp*h;b1=diff1[x,l,eps]*h*y;
a2=(yp+b1/2)*h;hh=diff1[x+h/2,l,eps]*h;
b2=hh*(y+a1/2);a3=(yp+b2/2)*h;b3=hh*(y+a2/2);
a4=(yp+b3)*h;
x=x+h;u2=diff1[x,l,eps];b4=u2*h*(y+a3);
y=y+(a1+2*a2+2*a3+a4)/6;
yp=yp+(b1+2*b2+2*b3+b4)/6;
If[y*yold>0,Goto[3]];
n0x=n0x+1;
If[n0x>n0,Goto[4]];
Label[3];
yold=y;
If[(u2<0||x<xwmin),Goto[2]];
z=y*yp;
If[z<0,Goto[2]];
el=eps;
Goto[300];
Label[4];
eu=eps;
Goto[300];
Label[1];
ep=eps;
j=0;
Label[20];
j=j+1;
feld1[j]=y;
xcoord[j]=del+(j-1)*h;
j1=j;
xmax=xcoord[j1];
a1=yp*h;b1=diff1[x,l,eps]*h*y;
a2=(yp+b1/2)*h;hh=diff1[x+h/2,l,eps]*h;
b2=hh*(y+a1/2);a3=(yp+b2/2)*h;b3=hh*(y+a2/2);
a4=(yp+b3)*h;
x=x+h;u2=diff1[x,l,eps];b4=u2*h*(y+a3);
y=y+(a1+2*a2+2*a3+a4)/6;
yp=yp+(b1+2*b2+2*b3+b4)/6;
If[y*yold>0,Goto[30]];
n0x=n0x+1;
If[n0x>n0,Goto[40]];
Label[30];
yold=y;
If[(u2<0||x<xwmin),Goto[20]];
z=y*yp;
If[z<0,Goto[20]];
Label[40];
yschr=Interpolation[Table[{xcoord[j],feld1[j]},{j,1,j1}]];
xmax=xcoord[j1];
Print[
]
Return[];
    
```

Рис. 12.8 — Реализация численного интегрирования краевой задачи УШ по Нумерову

Альтернативным подходом является матричный вариант метода Нумерова. Дискретизованное уравнение (1.43) имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot A \cdot \psi + B \cdot (U - E) \cdot \psi = 0, \quad (12.47)$$

где

$$A = \frac{1}{\Delta^2} \cdot \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & -2 & 1 & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad B = \frac{1}{12} \cdot \begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & 10 & 1 & \dots \\ 0 & 1 & 10 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} U_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & U_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & U_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \end{pmatrix}.$$

Соответственно краевая задача для УШ сводится к задаче на собственные числа и собственные значения для системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) (1.47), переменными которой служат узловые значения дискретизованной волновой функции $\psi_i = \psi(x_i)$. Собственные числа E_n образуют энергетический спектр задачи

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (B^{-1} \cdot A + U) \cdot \psi = E \cdot \psi, \quad (12.48)$$

а соответствующие $\psi_i^n = \psi_n(x_i)$ — приближают на выбранном разбиении искомые волновые функции. Решение (1.48) удобно отыскивать средствами Maple, MathCAD или Mathematica (см. рисунок 12.9).

Этот метод вследствие ограниченной точности и недостаточной мелкости разбиения области интегрирования также интересен, главным образом, с методической точки зрения. В частности, разработаны его модификации, имеющие повышенный порядок аппроксимации решения.

Благодаря простоте все описанные методы будем использовать в дипломной работе при получении численных решений УШ для рассмотренных ниже практически значимых постановок.



```
Zabelin_3.nb

V[s_] := Abs[s]; em = 20.0;
st = FindRoot[V[s] == em, {s, em}] [[1, 2]];
ds = 1 /  $\sqrt{2 * em}$ ;
n = Round[2 * (st / ds + 4 *  $\pi$ )];
s = Table[-ds * (n + 1) / 2 + ds * i, {i, n}];
one[n_, d_] :=
  DiagonalMatrix[1, 0 Range[n - Abs[d]], d];
B = (one[n, -1] + 10 * one[n, 0] + one[n, 1]) /
  12.;
A = (one[n, -1] - 2 * one[n, 0] + one[n, 1]) /
  ds^2; KE = -Inverse[B] * A / 2;
H = KE + DiagonalMatrix[V[s]];
{eval, evec} =
  Eigensystem[DiagonalMatrix[KE]];

00% ▸ ◀
```

Рисунок 12.9 — Реализация матричного метода Нумерова в Mathematica

Выводы по разделу

Проанализированы классические постановки краевой задачи для линейного одномерного уравнения Шрёдингера. Рассмотрены известные методы решения задачи на собственные значения и функции, выявлены их ограничения.

Уяснена важность приближенных асимптотических и численных подходов, в т.ч. при их глубоком сочетании. Такой комплексный подход демонстрирует разносторонность и эффективность даже на самых простых постановках.

Изучена качественное влияние характера потенциальной функции и граничных условий на вид решения.

Систематизированы основные свойства решений: ортогональность, ограниченность в пространстве, дискретность и, возможно, ограниченность спектра.

12.5 Постановка задач дипломной работы и техника их решения

Реализация целей дипломной работы требует корректной постановки и аккуратного решения следующих задач:

1. Отработать технику метода возмущений применительно к потенциальным ямам с вертикальными стенками

2. Получить решение краевой задачи для уравнения Шрёдингера с симметричным и асимметричным треугольными потенциалами.

3. Получить и исследовать решения УШ для гармонического осциллятора (квадратичный параболический потенциал).

4. Рассмотреть и исследовать модель с потенциалом Морзе.

5. На основании решений уравнения Шрёдингера с модельными потенциалами, близкими к потенциалу взаимодействия атомов в двухатомной молекуле вычислить вероятности квантовых переходов между уровнями (прямая задача молекулярной спектроскопии).

6. Изучить возможность решать обратную задачу молекулярной спектроскопии, используя для регуляризации мате-

риалы дипломной работы.

7. Содержательные результаты вычислительного эксперимента обобщить и систематизировать.

Решение поставленных задач предлагается осуществлять по приведенной ниже схеме, рационально сочетая надлежащие аналитические и численные методы. В качестве модели исследовательского подхода рассмотрим следующую задачу.

Требуется исследовать краевую задачу для УШ с потенциалом отображенном на рисунке 12.10. В ходе исследования найти собственные значения первых трех энергетических уровней связанного состояния микрочастицы в потенциальной яме с точностью до первой поправки. Найти явный вид волновых функций первых трех энергетических уровней связанных состояний. Расчеты выполнить для квантовой ямы шириной 0,4 нм и глубиной по левой стенке 15 эВ, а по правой 10 эВ. Возмущенный потенциал имеет наклонное дно, как показано на рисунке 12.10.

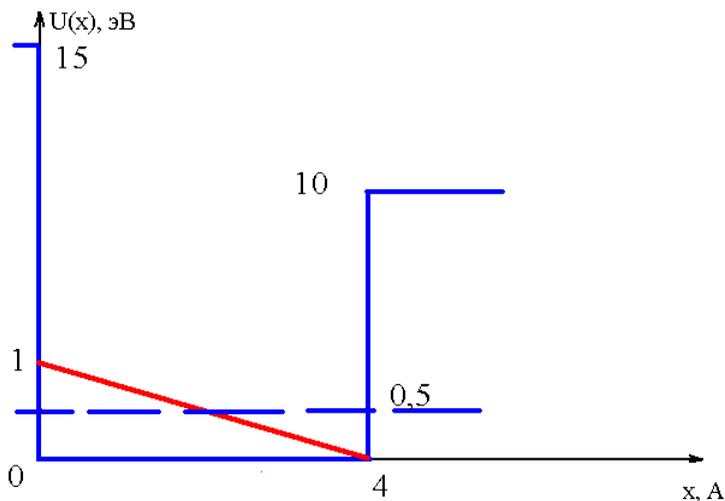
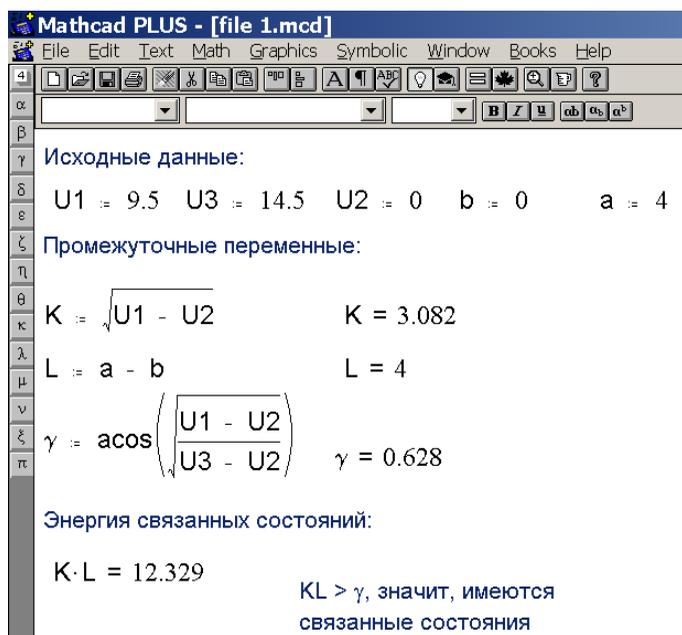


Рисунок 12.10- Сплошная синяя линия в изображении базового потенциала – исходная постановка, а штриховое дно – постановка в новых переменных. Красная линия – дно возмущенного потенциала.

12.6 Решение с базовым (невозмущенным) потенциалом

Находим собственные значения задачи (энергию связанных состояний, а также их число), зная, что собственные функции определяются по выражению (12.15). Введем промежуточные переменные (рисунок 12.11), найдем энергию связанных состояний (рисунок 12.12) и убедимся в отсутствии прочих связанных состояний (рисунок 12.13) в системе MathCAD.



Mathcad PLUS - [file 1.mod]

File Edit Text Math Graphics Symbolic Window Books Help

Исходные данные:

$$U1 := 9.5 \quad U3 := 14.5 \quad U2 := 0 \quad b := 0 \quad a := 4$$

Промежуточные переменные:

$$K := \sqrt{U1 - U2} \quad K = 3.082$$

$$L := a - b \quad L = 4$$

$$\gamma := \arccos\left(\frac{\sqrt{U1 - U2}}{\sqrt{U3 - U2}}\right) \quad \gamma = 0.628$$

Энергия связанных состояний:

$$K \cdot L = 12.329$$

$KL > \gamma$, значит, имеются связанные состояния

Рисунок 12.11 — Ввод промежуточных переменных

Mathcad PLUS - [file 1.mcd]

File Edit Text Math Graphics Symbolic Window Books Help

α β γ δ ε ζ η θ κ λ μ ν ξ π

Энергия первого уровня:

$\xi = 0$
 given
 $1 \cdot \pi - \xi \cdot K \cdot L = \text{asin}(\xi) + \text{asin}(\xi \cdot \cos(\gamma))$
 $\xi 1 := \text{find}(\xi) \quad \xi 1 = 0.222$
 $\varepsilon 1 := \xi 1^2 \cdot (U 1 - U 2) + U 2 \quad \varepsilon 1 = 0.468$

Энергия второго уровня:

$\xi = 0$
 given
 $2 \cdot \pi - \xi \cdot K \cdot L = \text{asin}(\xi) + \text{asin}(\xi \cdot \cos(\gamma))$
 $\xi 2 := \text{find}(\xi) \quad \xi 2 = 0.443$
 $\varepsilon 2 := \xi 2^2 \cdot (U 1 - U 2) + U 2 \quad \varepsilon 2 = 1.862$

Энергия третьего уровня:

$\xi = 0$
 given
 $3 \cdot \pi - \xi \cdot K \cdot L = \text{asin}(\xi) + \text{asin}(\xi \cdot \cos(\gamma))$
 $\xi 3 := \text{find}(\xi) \quad \xi 3 = 0.66$
 $\varepsilon 3 := \xi 3^2 \cdot (U 1 - U 2) + U 2 \quad \varepsilon 3 = 4.141$

Энергия верхнего четвертого уровня:

$\xi = 0$
 given
 $4 \cdot \pi - \xi \cdot K \cdot L = \text{asin}(\xi) + \text{asin}(\xi \cdot \cos(\gamma))$
 $\xi 4 := \text{find}(\xi) \quad \xi 4 = 0.87$
 $\varepsilon 4 := \xi 4^2 \cdot (U 1 - U 2) + U 2 \quad \varepsilon 4 = 7.195$

Рисунок 12.12 — Нахождение энергии связанных состояний

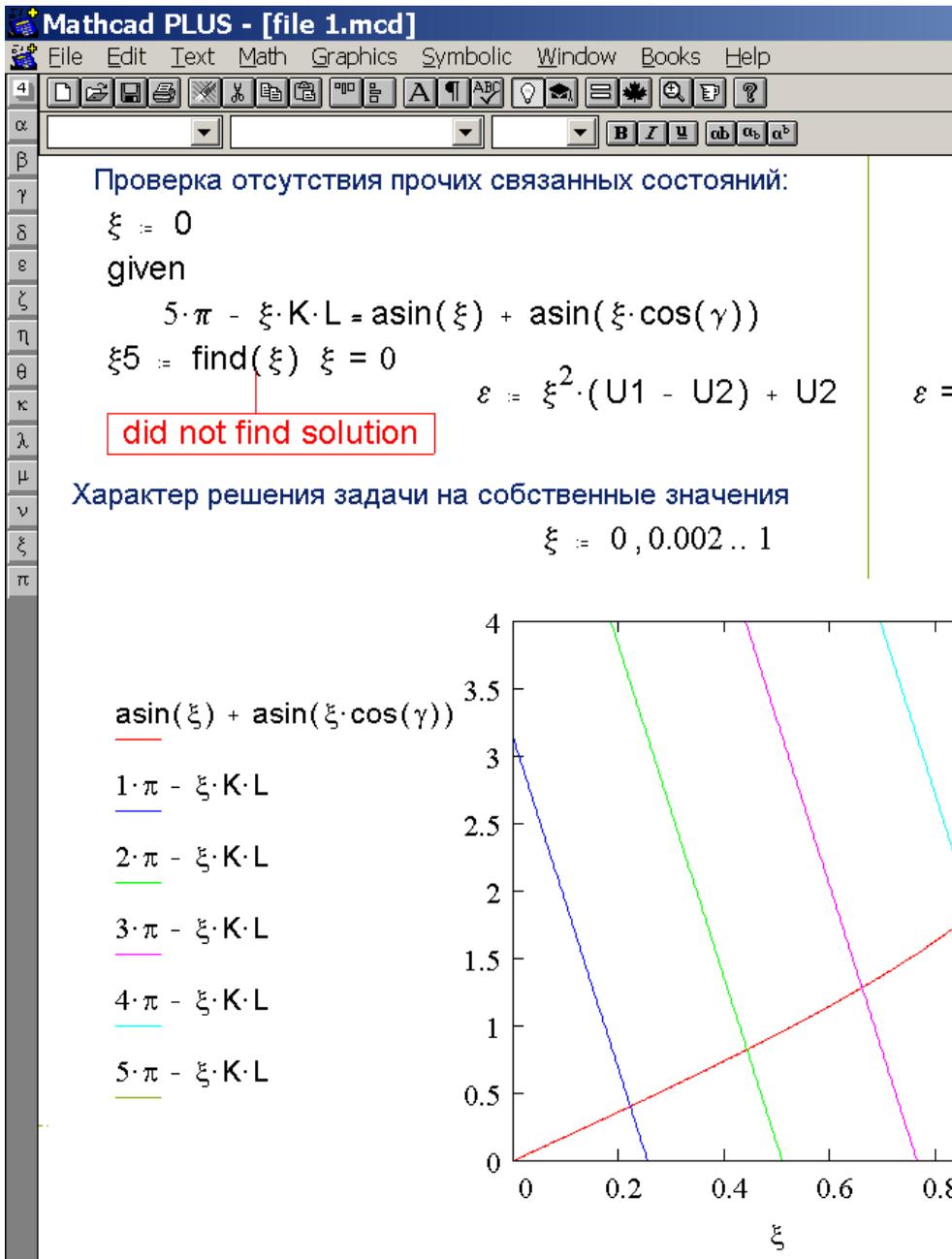
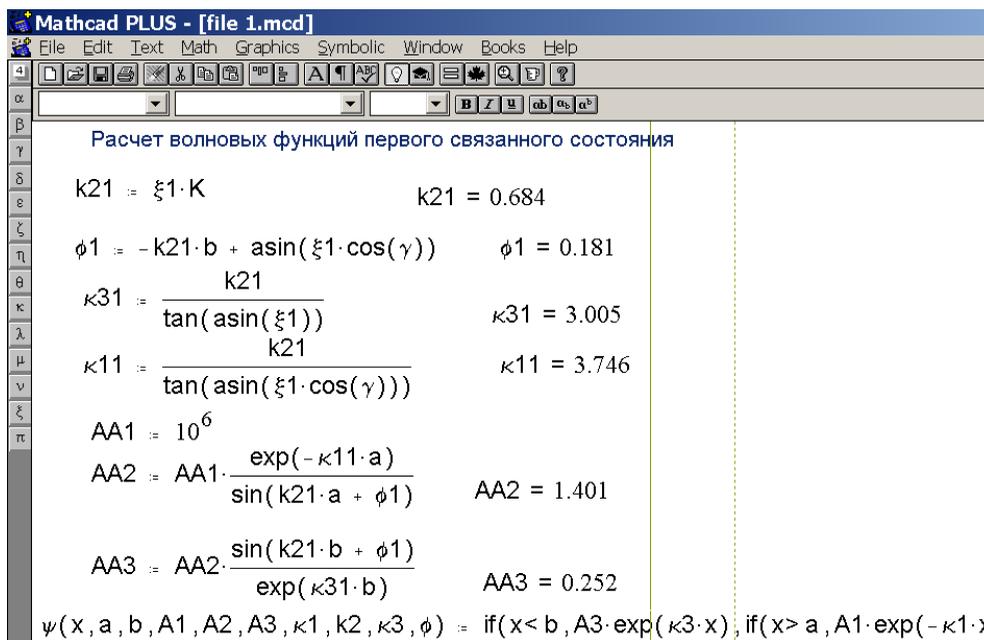


Рисунок 12.13 — Удостоверимся в отсутствии прочих связанных

СОСТОЯНИЙ

Расчет волновых функций производили согласно алгоритму пп.12.3. Выполнена инициализация вычислительной модели (рисунок 12.14). Отображение первого решения представлено на рисунке 12.15, а его нормировка на рисунке 12.16. Отнормированная функция приведена на рисунке 12.17.



Mathcad PLUS - [file 1.mcd]

File Edit Text Math Graphics Symbolic Window Books Help

Расчет волновых функций первого связанного состояния

$$k_{21} := \xi_1 \cdot K \quad k_{21} = 0.684$$

$$\phi_1 := -k_{21} \cdot b + \text{asin}(\xi_1 \cdot \cos(\gamma)) \quad \phi_1 = 0.181$$

$$k_{31} := \frac{k_{21}}{\tan(\text{asin}(\xi_1))} \quad k_{31} = 3.005$$

$$k_{11} := \frac{k_{21}}{\tan(\text{asin}(\xi_1 \cdot \cos(\gamma)))} \quad k_{11} = 3.746$$

$$AA_1 := 10^6$$

$$AA_2 := AA_1 \cdot \frac{\exp(-k_{11} \cdot a)}{\sin(k_{21} \cdot a + \phi_1)} \quad AA_2 = 1.401$$

$$AA_3 := AA_2 \cdot \frac{\sin(k_{21} \cdot b + \phi_1)}{\exp(k_{31} \cdot b)} \quad AA_3 = 0.252$$

$$\psi(x, a, b, A_1, A_2, A_3, k_1, k_2, k_3, \phi) := \text{if}(x < b, A_3 \cdot \exp(k_3 \cdot x), \text{if}(x > a, A_1 \cdot \exp(-k_1 \cdot x))$$

Рисунок 12.14 — Инициализация вычислительной модели

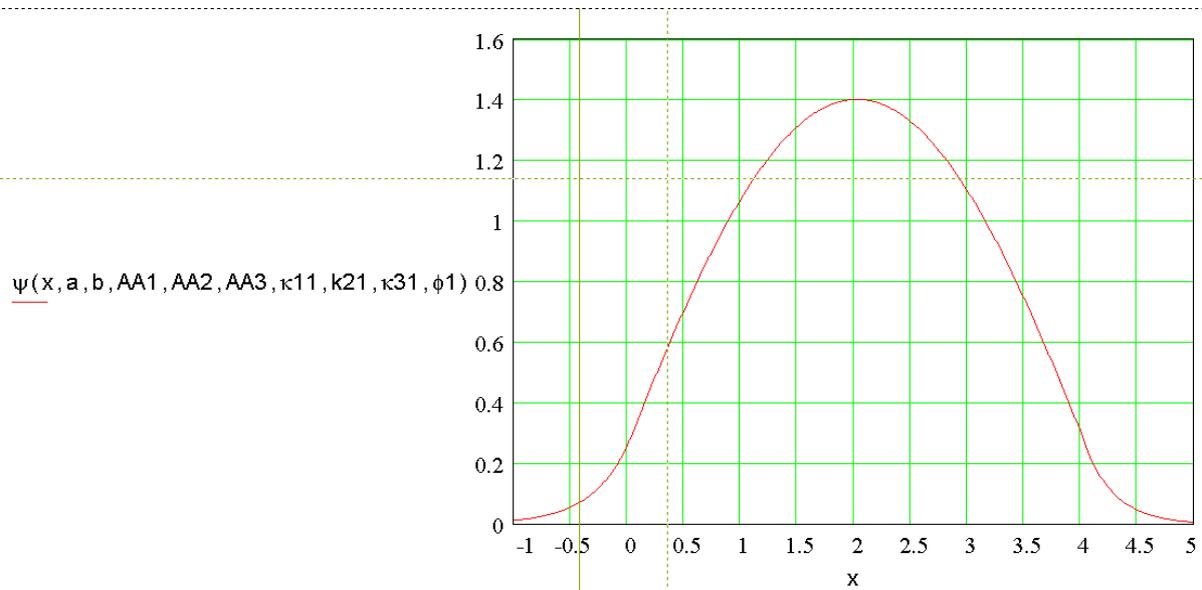




Рисунок 12.15 — Отображение первого решения

Mathcad PLUS - [file 1.mcd]

File Edit Text Math Graphics Symbolic Window Books Help

Norm1 := $\int_{-3}^7 \psi(x, a, b, AA1, AA2, AA3, \kappa_{11}, k_{21}, \kappa_{31}, \phi_1)^2 dx$ Norm1 = 4.511

A1 := $\frac{AA1}{\sqrt{Norm1}}$ A1 = $4.708 \cdot 10^5$ a11 := A1

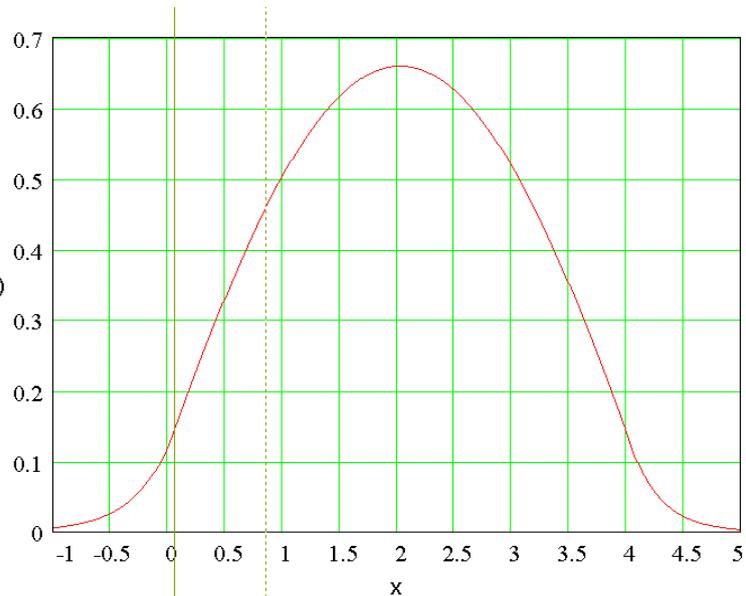
A2 := $A1 \cdot \frac{\exp(-\kappa_{11} \cdot a)}{\sin(k_{21} \cdot a + \phi_1)}$ A2 = 0.659 a12 := A2

A3 := $A2 \cdot \frac{\sin(k_{21} \cdot b + \phi_1)}{\exp(\kappa_{31} \cdot b)}$ A3 = 0.119 a13 := A3

Рисунок 12.16 — Нормировка первого решения



$\psi(x, a, b, A1, A2, A3, \kappa11, k21, \kappa31, \phi1)$



$$\text{Norm11} := \int_{-3}^7 \psi(x, a, b, A1, A2, A3, \kappa11, k21, \kappa31, \phi1)^2 dx \quad \text{Norm11} = 1$$

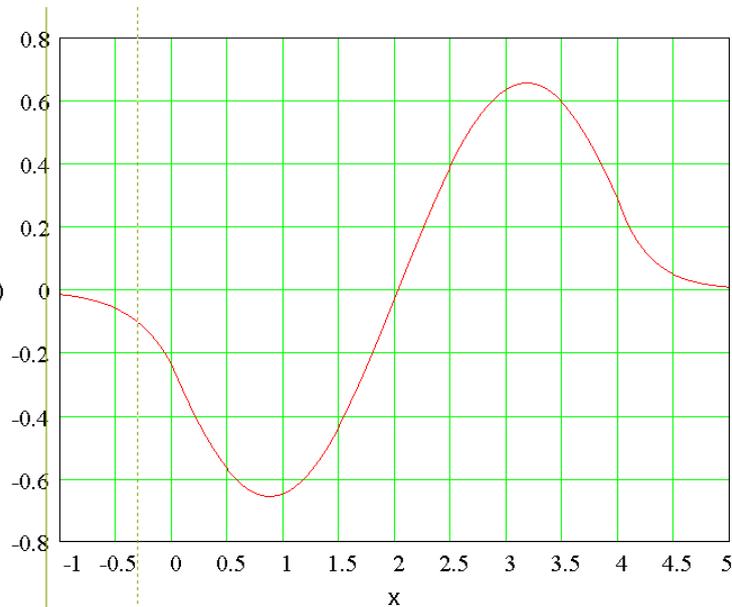


Рисунок 12.17 — Первая нормированная функция

Аналогично рассчитываются три прочие волновые функции. Вторая нормированная функция приведена на рисунке 12.18, третья на рисунке 12.19 и четвертая на рисунке 12.20.



$\psi(x, a, b, A1, A2, A3, \kappa12, k22, \kappa32, \phi2)$

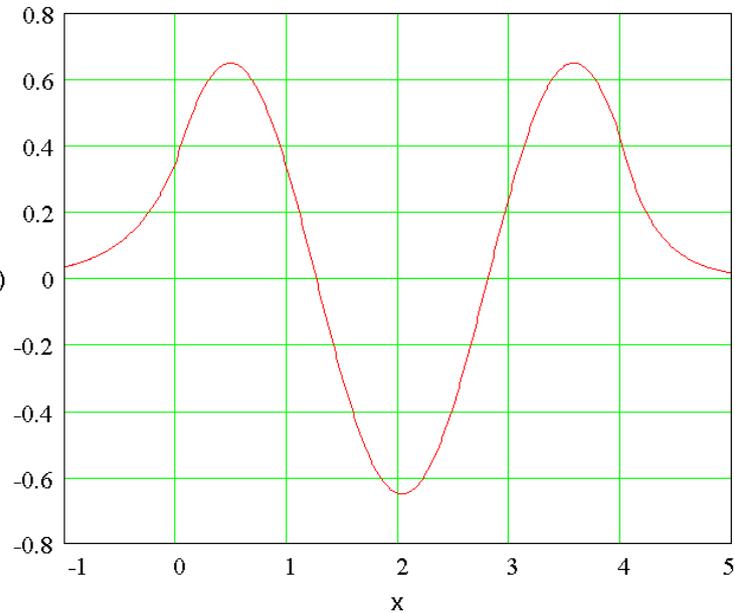


$$\text{Norm22} := \int_{-3}^7 \psi(x, a, b, A1, A2, A3, \kappa12, k22, \kappa32, \phi2)^2 dx \quad \text{Norm22} = 1$$

Рисунок 12.18 — Вторая нормированная волновая функция



$\psi(x, a, b, A1, A2, A3, \kappa13, \kappa23, \kappa33, \phi3)$



$$\text{Norm33} = \int_{-3}^7 \psi(x, a, b, A1, A2, A3, \kappa13, \kappa23, \kappa33, \phi3)^2 dx \quad \text{Norm33} = 1$$



Рисунок 12.19 — Третья нормированная волновая функция

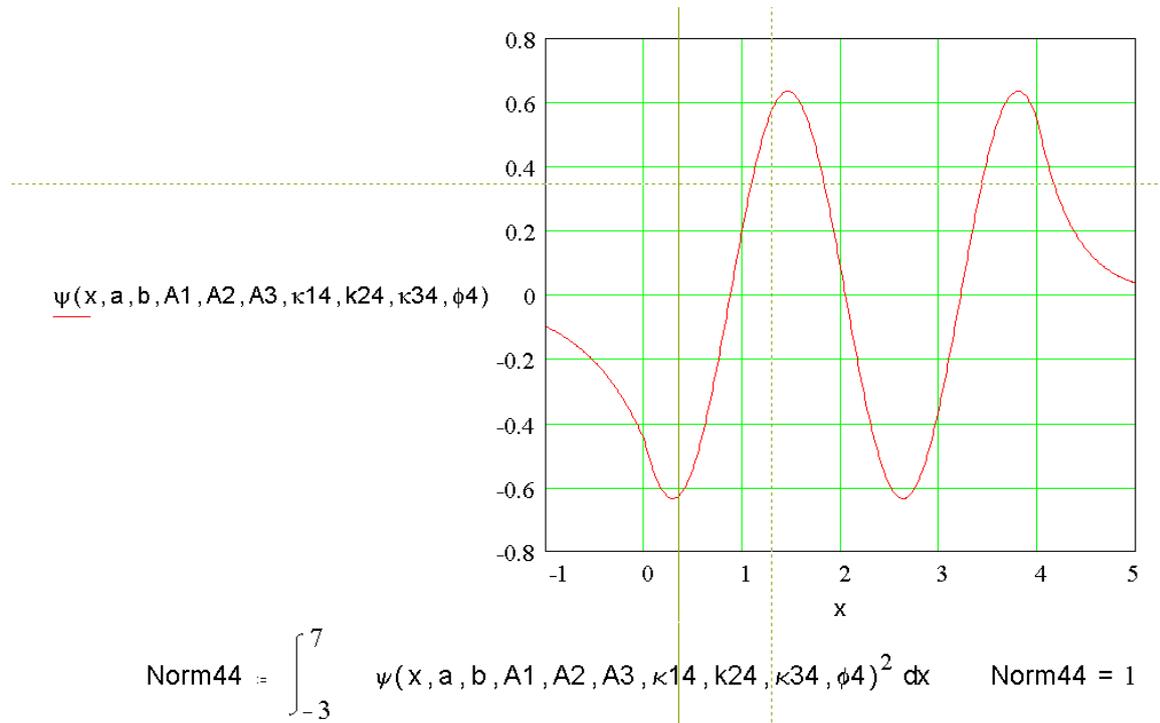


Рисунок 12.20 — Четвертая нормированная волновая функция



Итог вычислений отображен на рисунке 12.21.

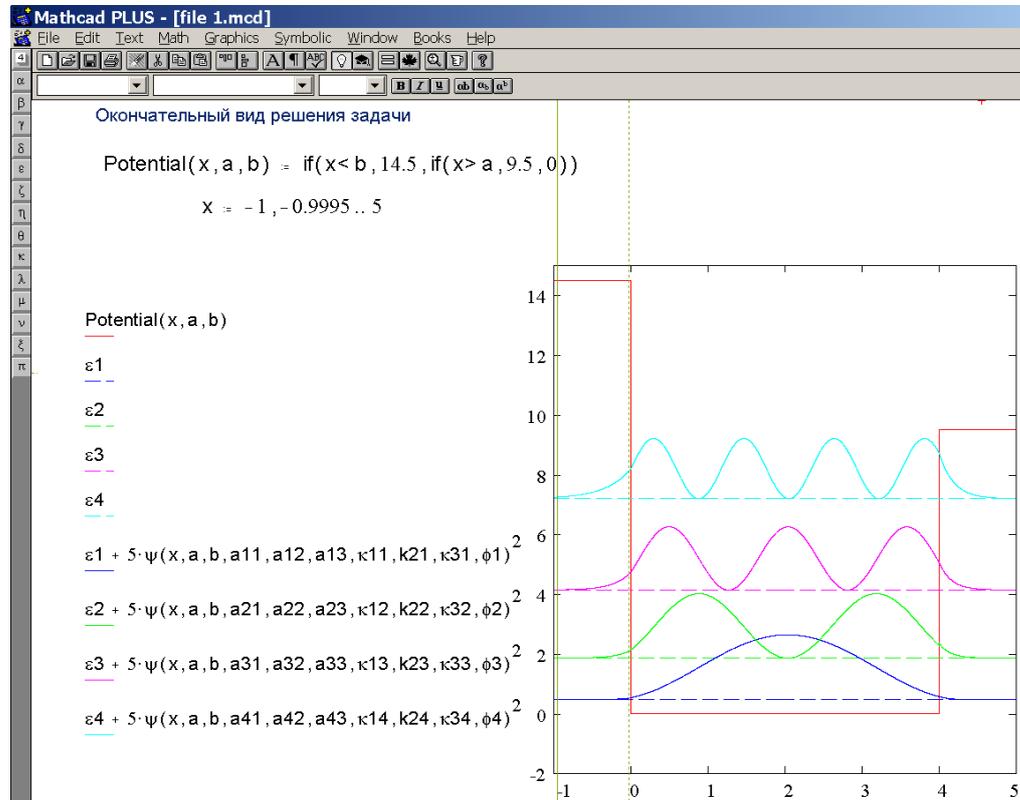




Рисунок 12.21 — Вид волновых функций в прямоугольном потенциале

Числовые параметры полученного решения сведены в таблицу 12.1.

Таблица 12.1 — Значения числовых параметров для разрешенных в
задаче энергетических уровней

Параметр	ε	A_1	A_2	A_3	κ_1	k_2	κ_3	ϕ
Уровень								
1	0,468	$4,708 \cdot 10^5$	0,659	0,119	3,746	0,684	3,005	0,181
2	1,862	$4,357 \cdot 10^5$	-0,657	-0,235	3,555	1,365	2,764	0,366
3	4,141	$1,676 \cdot 10^5$	0,651	0,348	3,219	2,035	2,315	0,564
4	7,195	$2,742 \cdot 10^5$	-0,635	-0,448	2,703	2,682	1,578	0,782

Таким образом, установлены структура и параметры решения задачи для всех существующих связанных состояний. Приведенные изображения свидетельствуют о его соответствии законам квантовой механики. Поэтому это решение будем использовать как базовое при нахождении собственных энергий и функций для возмущенного потенциала. Отметим, что наш выбор базового потенциала обусловлен стремлением обеспечить примерно равную точность решения в левом и правом углах ямы.

12.7 Возмущение по первому приближению

Для начала найдем уравнение прямой, по которой задается возмущение $V(x)$ по двум точкам: $(0; 0,5)$ и $(4; -0,5)$. Итак, $V(x) = -0,25x + 0,5$

Потенциальная энергия частицы в такой яме равна:

$$U(x) = V(x) = \begin{cases} U_1, & \text{при } x \geq a \\ -0,25x + 0,5, & \text{при } b \leq x \leq a; \\ U_3, & \text{при } x \leq b \end{cases} \quad (12.49)$$

$$U_1 = 10 \text{ эВ}, U_3 = 14 \text{ эВ}, a = 0 \text{ \AA}, b = 4 \text{ \AA}.$$

Далее необходимо найти поправки к энергии по следующей формуле:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \tilde{V} \psi_n^{(0)} dq, \quad (12.50)$$

Поправка для первого уровня приведена на рисунке 12.22.



$$\Delta E_1 = \int_{-3}^7 \psi(x, a, b, A_1, A_2, A_3, \kappa_{11}, k_{21}, \kappa_{31}, \phi_1)^2 \cdot V(x) dx$$

$$\Delta E_1 = 0.011$$

Рисунок 12.22 — Вычисление поправки для первого энергетического уровня

Но при расширении пределов интегрирования наблюдается стремление ΔE_1 к нулю (рисунок 12.23).

$$\Delta E_1 = \int_{-1000}^{1004} \psi(x, a, b, A_1, A_2, A_3, \kappa_{11}, k_{21}, \kappa_{31}, \phi_1)^2 \cdot V(x) dx$$

$$\Delta E_1 = 0$$

Рисунок 12.23 — Вычисление поправки для первого энергетического уровня с расширением пределов интегрирования

Из этого следует, что мы имеем дело с некоторой машинной вычислительной ошибкой, а это значит, что следует принять $\Delta E_1 = 0$.

Аналогично определяем, что $\Delta E_2 = 0$, $\Delta E_3 = 0$, $\Delta E_4 = 0$. Этого результата следовало ожидать при нашем выборе базового потенциала.

Теперь необходимо составить матрицу V_{km} оператора возмущений \tilde{V} , определив каждый элемент с помощью невозмущенных функций $\psi_m^{(0)}$ по формуле:

$$V_{km} = \int \psi_k^{(0)} \tilde{V} \psi_m^{(0)} dq \quad (12.51)$$

Получаем следующую матрицу:

$$\begin{bmatrix} 0 & -0.208 & 0.003 & -0.016 \\ -0.208 & 0 & -0.228 & 0.011 \\ 0.003 & -0.228 & 0 & -0.237 \\ -0.016 & 0.011 & -0.237 & 0 \end{bmatrix} \quad (12.52)$$

Получив матрицу оператора возмущений, можем отыскать поправку $\Delta \psi_n^{(0)}$ для каждой, известной ранее, волновой функции ψ . Поправка вычисляется следующим образом:

$$\Delta\psi_n = \sum \frac{V_{mn}}{E_n - E_m} \cdot \psi_m^{(0)} \quad (12.53)$$

Поочередно вычисляем поправки к волновым функциям и построим графики для этих поправок. Графики приведены на рисунках 12.24, 12.25, 12.26 и 12.27.

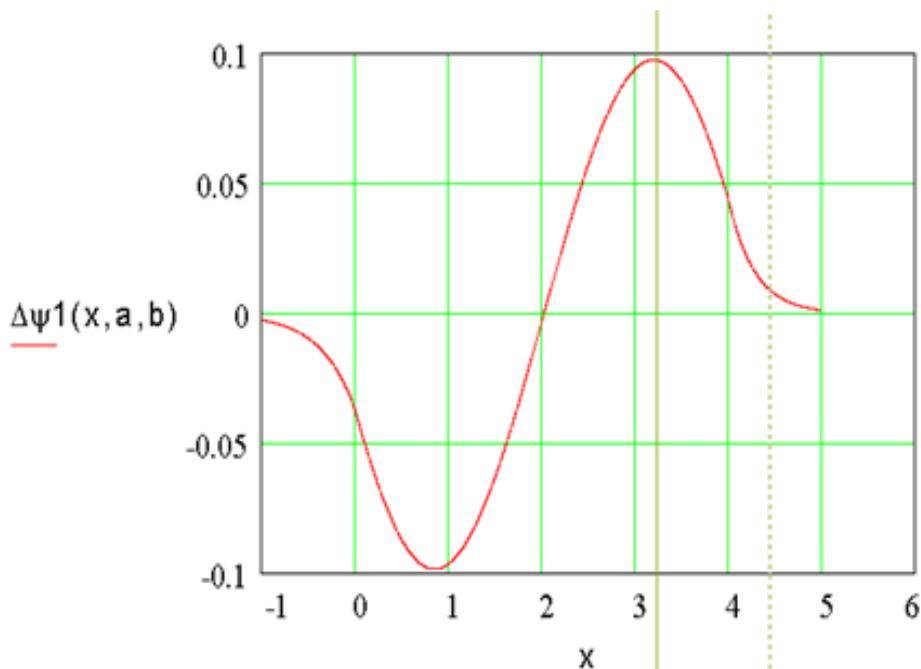


Рисунок 12.24 — Поправка к первой волновой функции

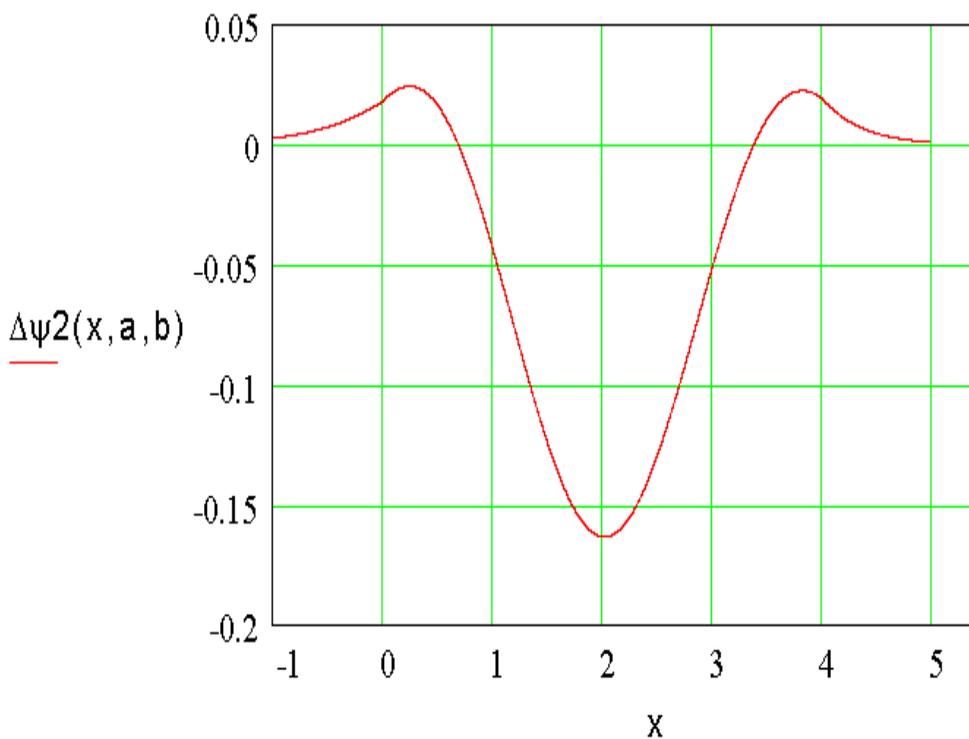


Рисунок 12.25 Поправка ко второй волновой функции

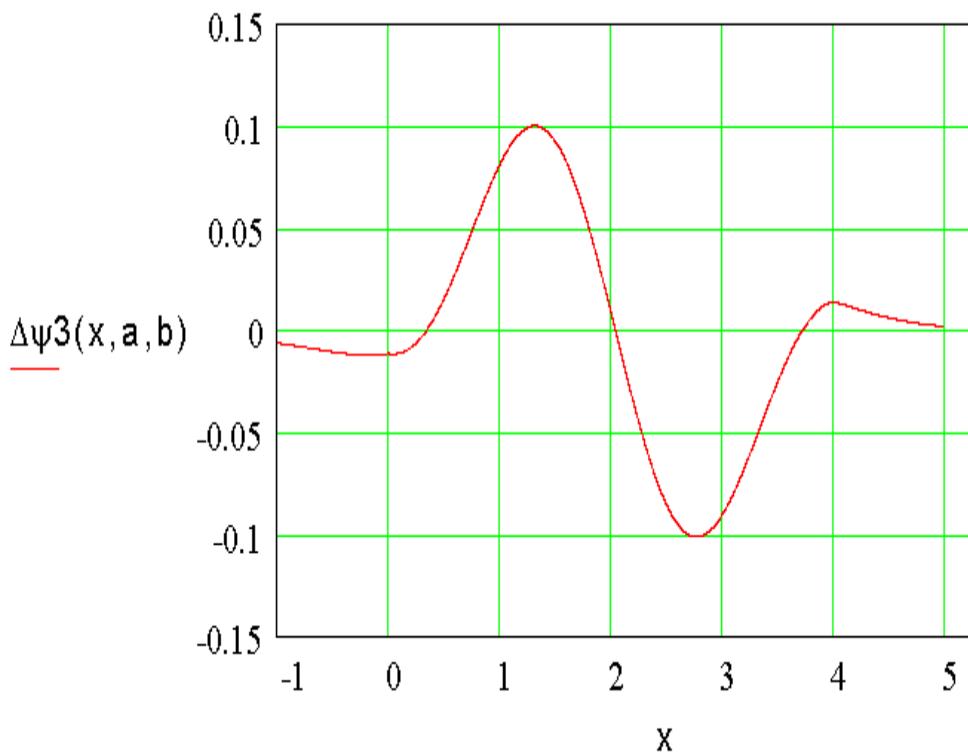


Рисунок 12.26 Поправка к третьей волновой функции

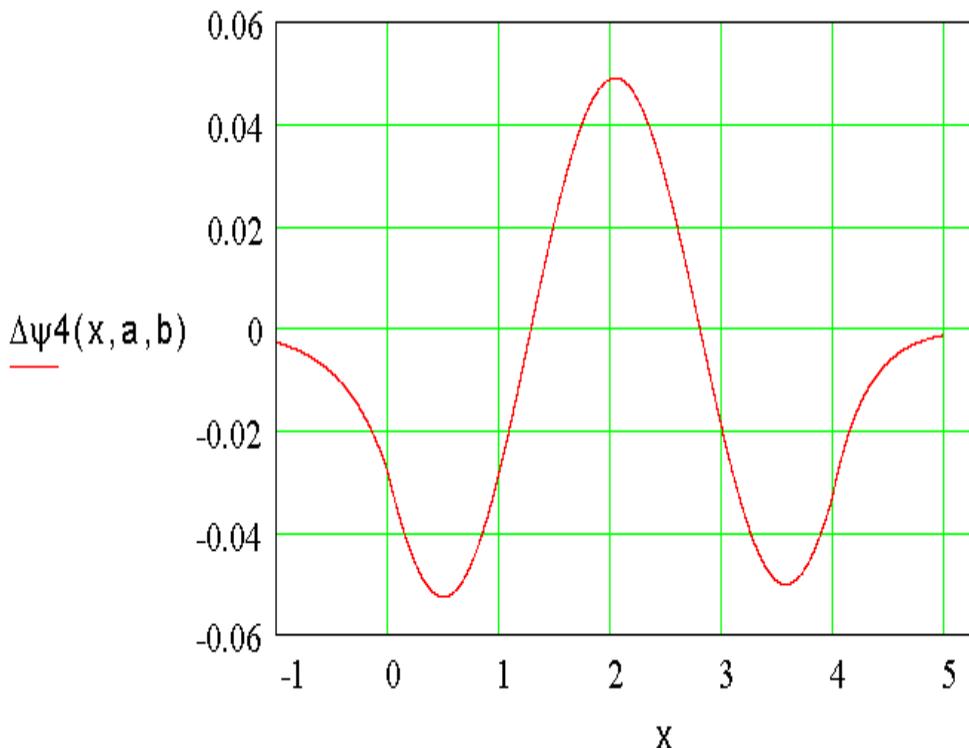


Рисунок 12.27 Поправка к четвертой волновой функции

Видим, что во всех случаях амплитуда функций-поправок меньше, чем амплитуда базовых волновых функций. Однако, это обстоятельство не гарантирует того, что характер известной ранее нам волновой функции качественно не меняется при возмущении потенциала.

Чтобы убедиться в этом, приведем парциальные вклады нулевого и первого приближения в итоговые волновые функции (синим пунктиром обозначены невозмущенные волновые функции и возмущающие поправки, красная сплошная линия – результирующая волновая функция) для всех четырех уровней (рисунки 12.28, 12.29, 12.30, 12.31).

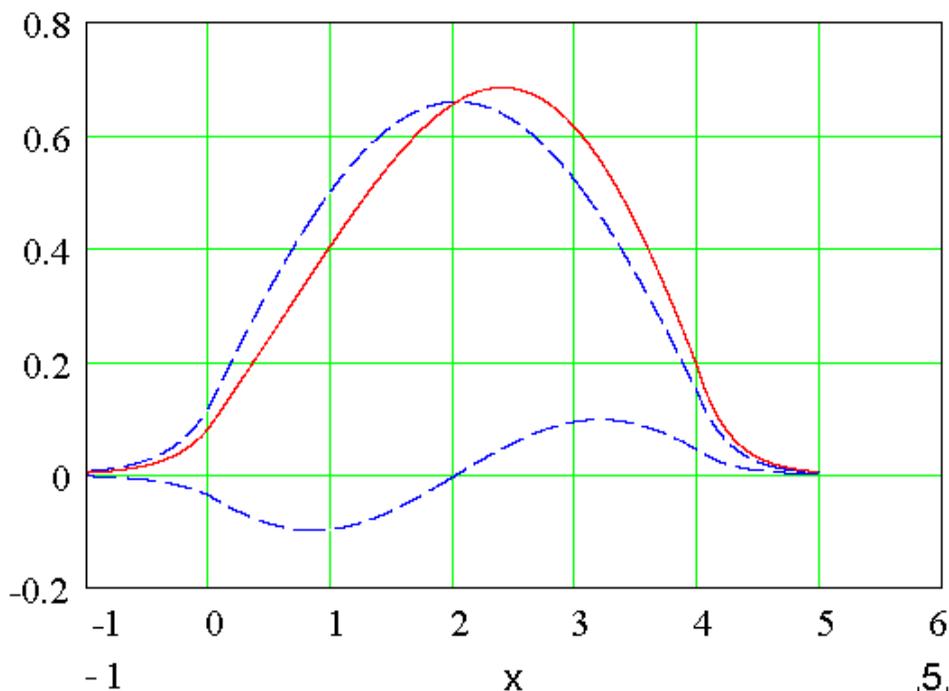


Рисунок 12.28 — Вклад невозмущенной волновой функции и возмущающей поправки в результирующую функцию (красная линия) для первого уровня.

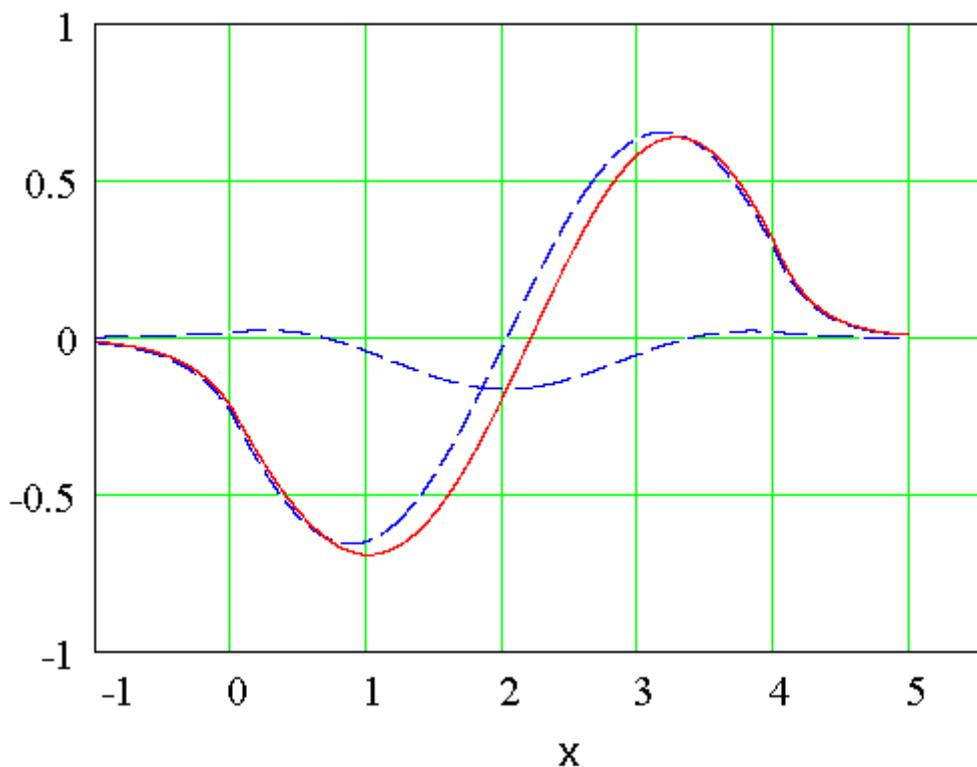


Рисунок 12.29— Вклад невозмущенной волновой функции и возмущающей поправки в результирующую функцию (красная линия) для второго уровня.

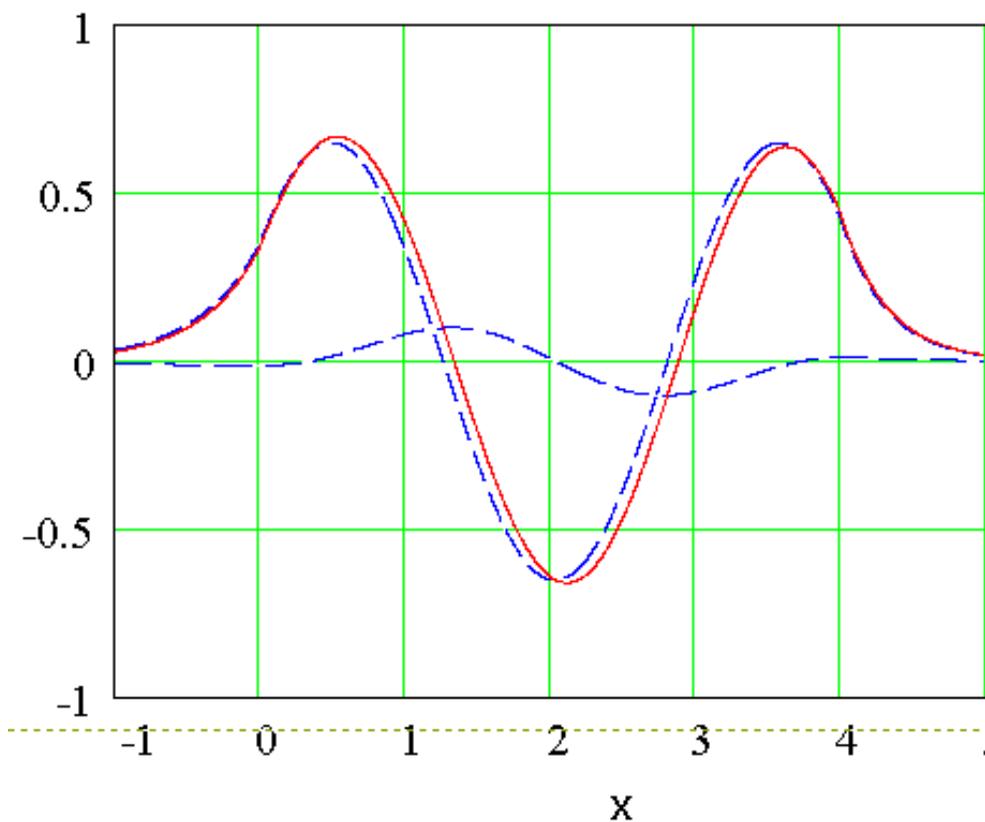


Рисунок 12.30— Вклад невозмущенной волновой функции и возмущающей поправки в результирующую функцию (красная линия) для третьего уровня.

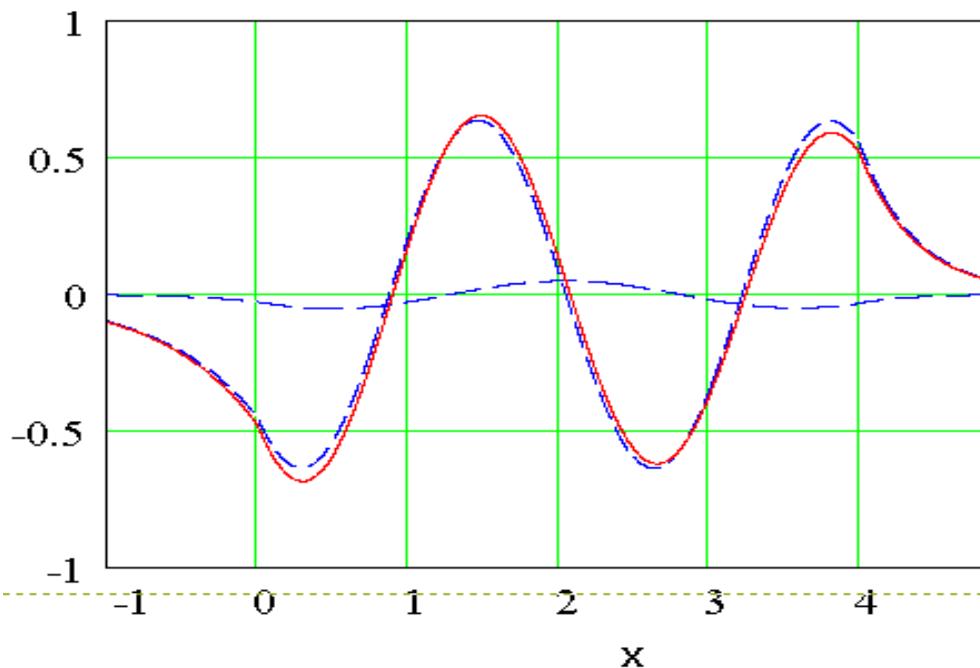


Рисунок 12.31— Вклад невозмущенной волновой функции и возмущающей поправки в результирующую функцию (красная линия) для четвертого уровня.

Представленные данные свидетельствуют, что возмущение потенциала действительно мало (не меняет качественно характер всех базовых волновых функций), из чего следует, что примененный для решения задачи метод возмущений ситуационно корректен.

В заключение приведем общую картину волновых функций с учетом возмущения (рисунок 12.32).

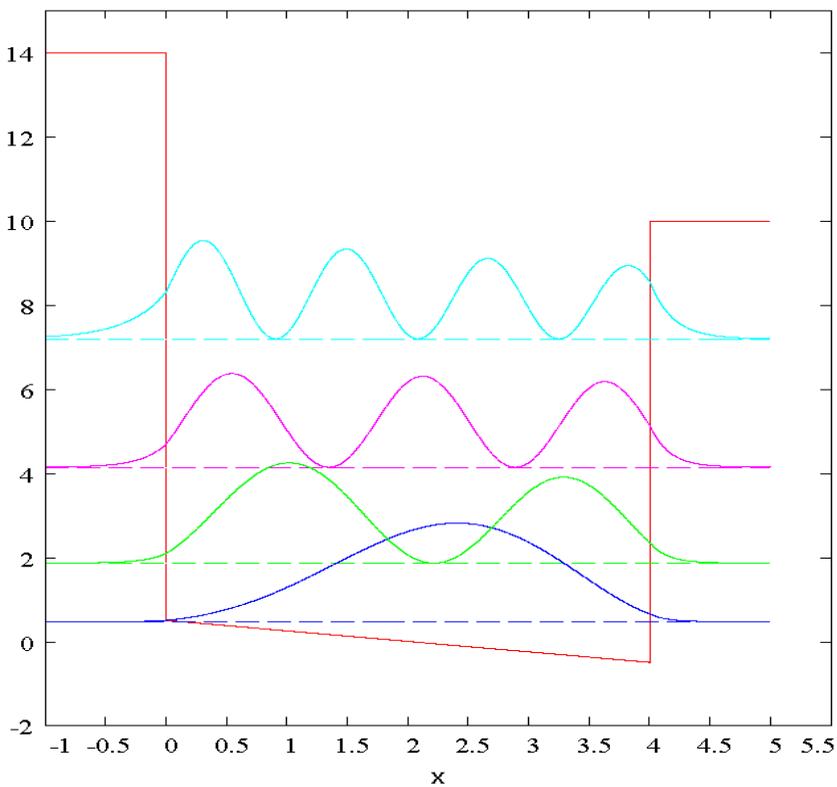


Рисунок 12.32 — Волновые функции в возмущенном потенциале.

12.8 Методы, средства и результаты вычислительного эксперимента

Объектом исследования выберем задачу о микрочастице в потенциальном поле. Особенностью таких задач является то, что в зависимости от запаса энергии частица может быть как локализована в пространстве, так и совершать инфинитное движение. Характер локализации (зависит от соотношения потенциальной и кинетической энергий) всегда в большей или меньшей степени отличается от такового в классической механике и определяется видом потенциала. Поэтому рассмотрим несколько различных связывающих потенциалов, имеющих отношение к реальным объектам или же представляющих методический интерес. Рассмотрение будем вести от простейших функций $U(x)$ – до наиболее сложных, соответственно усиливая привлекаемый математический аппарат и вспомогательные информационные технологии. В целях систематизации изложения сначала коротко опишем инструментальные методы, реализующие алгоритмы и специализированные вычислительные пакеты.

12.8.1 Треугольная асимметричная потенциальная яма в полупространстве

В физике полупроводников представляет интерес следующая постановка краевой задачи для УШ:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E - q \varepsilon x) \cdot \psi(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq \infty, \quad \psi(0) = \psi(\infty) = 0. \quad (12.54)$$

Несимметричный треугольный потенциал отражает действие электрического поля напряженностью ε на заряд q (см. рисунок 12.33).

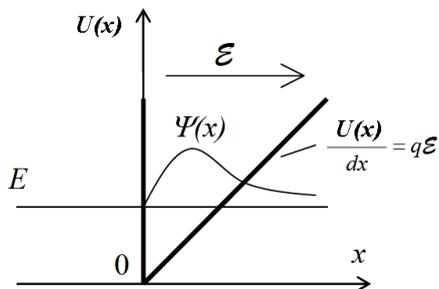


Рисунок 12.33 — Несимметричный – вертикально-треугольный потенциал в краевой задаче для УШ

Уравнение (12.54) линейной заменой переменных приводится к виду:

$$y''(x) - x \cdot y(x) = 0 \quad (12.55)$$

Решением последнего служит специальная функция Эйри, связанные с функциями Бесселя порядка $-2/3$, $-1/3$, $1/3$ и $2/3$ (см. рисунок 12.34).

The image shows two software windows. The top window is Maple V Release 4, titled 'Zabelin_2.mws'. The command prompt shows the command `dsolve(diff(y(x), x$2) - x*y(x) = 0, y(x));` and the resulting solution: $y(x) = _C1 \sqrt{x} \text{BesselI}\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}x^{3/2}\right) + _C2 \sqrt{x} \text{BesselK}\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}x^{3/2}\right)$. The bottom window is Mathematica, titled 'Zabelin-2.nb *'. It shows the input `DSolve[y''[x] - x*y[x] == 0, y[x], x]` and the output `{{y[x] -> AiryAi[x] C[1] + AiryBi[x] C[2]}}`.

Рисунке 12.34 — Решение краевой задачи для УШ в постановке (12.55)

В исходных физических переменных соответствующее решение имеет вид:



$$\psi(x) = A \cdot \text{Ai}\left[\left(\frac{2m}{\hbar^2 q^2 \varepsilon^2}\right)^{1/3} \cdot (q \cdot \varepsilon \cdot x - E_n)\right], \quad E_n = -\left(\frac{2m}{\hbar^2 q^2 \varepsilon^2}\right)^{1/3} a_n, \quad (12.56)$$

где a_n – нули функции Эйри. Характер решения краевой задачи показан на рисунке 12.35. Отметим, что Maple и Mathematica не находят аналитической формы решения данной краевой задачи, отличной от тривиального.



```
Zablelin-2.nb *  
  
In[25]:=  
DSolve[{yy''[x] - x*yy[x] == 0, yy[0] == 0,  
yy[∞] == 0}, yy[x], x]  
  
DSolve::bvlim :  
For some branches of the general solution,  
unable to compute the limit at  
the given points. Some of the
```

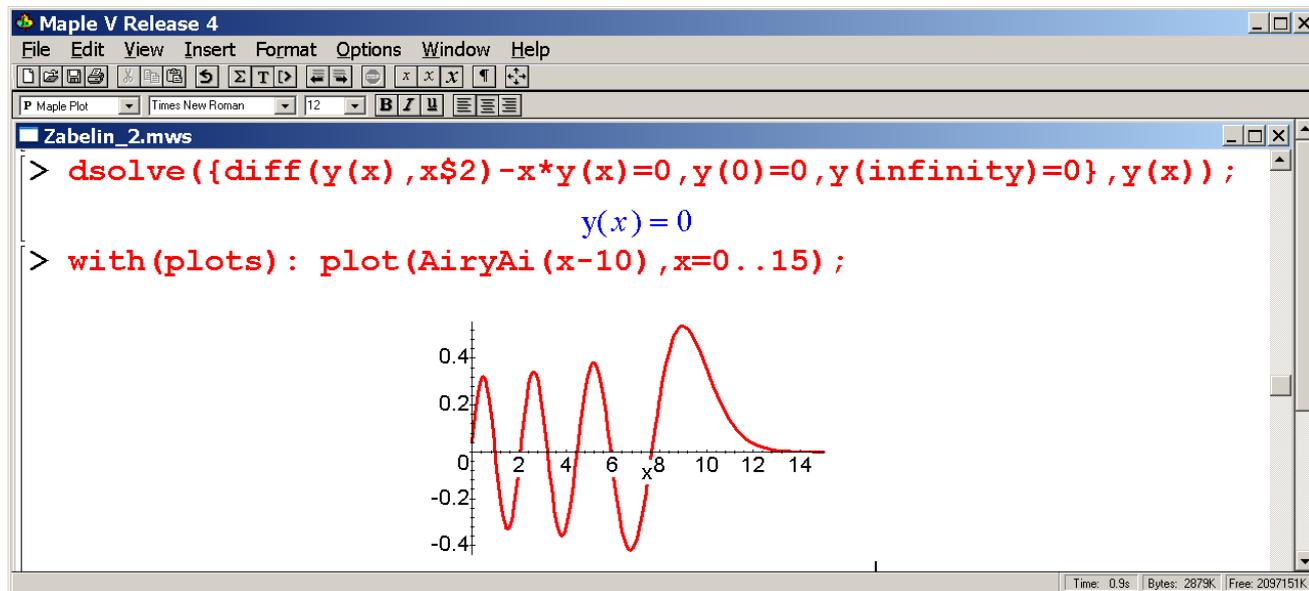


Рисунок 12.35— Волновая функция – решение краевой задачи для УШ в постановке (12.55)

Практически определить нули функции Эйри и соответственно собственные значения задачи (12.55) можно приближенно, воспользовавшись асимптотическими формулами:



$$a_n \approx -\left[\frac{3\pi}{2} \cdot \left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{2/3}, \quad E_n \approx \left(\frac{2m}{\hbar^2 q^2 \varepsilon^2}\right)^{1/3} \cdot \left[\frac{3\pi}{2} \cdot \left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{2/3}, \quad n = 1, 2, \dots$$

(12.57)

Несколько младших волновых функций задачи (12.55) показаны на рисунке 12.36.

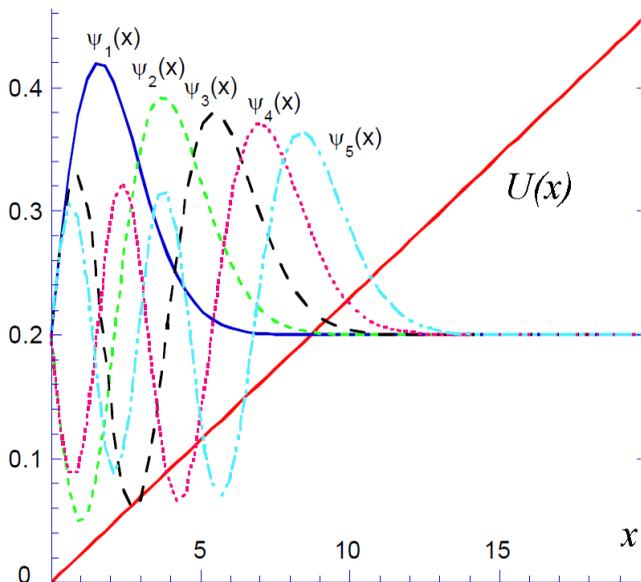


Рисунок 12.36 — Волновые функции для УШ с асимметричным треугольным потенциалом

12.8.2 Треугольная симметричная потенциальная яма

Отличие данной математической постановки от предыдущей в бесконечной области определения искомых решений. Потенциальная функция при этом задается формулой $U(x) = k \cdot |x|$. Оказалось, что постановка



$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E - k \cdot |x|) \cdot \psi(x) = 0, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad \psi(-\infty) = \psi(\infty) = 0,$$

(12.58)

описывает взаимодействие субэлементарных частиц (кварков). Очевидно, здесь по сравнению с предыдущей постановкой возникают еще четные решения $\psi(x)$, удовлетворяющие условию $\psi'(0) = 0$. К четным относится и решение, соответствующее минимальной энергии, т.е. волновая функция основного состояния. Объединить четные и нечетные решения (12.58) можно с помощью формулы:

$$\psi(x) \approx A \cdot \text{Ai}\left[\left(\frac{2m}{\hbar^2 k^2}\right)^{1/3} \cdot (k \cdot |x| - E_n)\right], \quad E_n \approx \left(\frac{2m}{\hbar^2 k^2}\right)^{1/3} \cdot \left[\frac{3\pi}{2} \cdot \left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{2/3},$$
$$E_n \approx \left(\frac{2m}{\hbar^2 k^2}\right)^{1/3} \cdot \left[\frac{3\pi}{2} \cdot \left(n - \frac{2}{4}\right)\right]^{2/3},$$

(12.59)

где первая последовательность E_n отвечает нечетным решениям, вторая – четным. Получение приведенного результата потребовало сочетать «ручную» аналитику с машинной в среде Mathematica.

При вычислениях функцию Эйри можно заменить асимптотическими:



$$\text{Ai}(x < 0) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot (-x)^{-1/4} \cdot \sin(-2/3 \cdot x \sqrt{-x}), \quad \text{Ai}(x > 0) \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cdot x^{-1/4} \cdot e^{-2/3 \cdot x \sqrt{x}} \quad (12.60)$$

Качество приближения показано на рис. 12.37

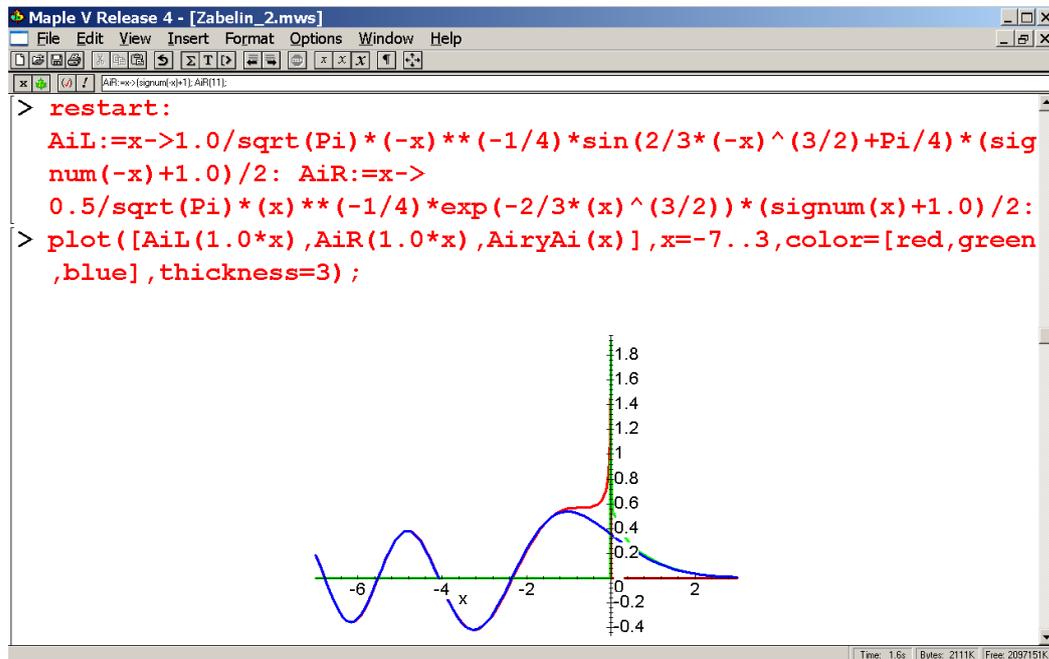




Рисунок 12.37 — Асимптотическое поведение функции Эйри

12.8.3 Гармонический осциллятор

Малые колебания молекулярных связей описываются моделью типа УШ:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E - \frac{1}{2} k \cdot x^2) \cdot \psi(x) = 0, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad \psi(-\infty) = \psi(\infty) = 0, \quad (12.61)$$

в которой параметр k осмысливается как силовая постоянная. Чтобы решить это уравнение, предположим вид решения:

$$\psi(x) = f(x) \cdot e^{-\gamma x^2/2}, \quad (12.62)$$

где $\gamma = (m k)/2\hbar$, m – масса молекулы. Подстановкой (12.62) в (12.61) получаем:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2 \cdot \gamma \cdot x \cdot \frac{d}{dx} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \gamma \right) \right] f(x) = 0. \quad (12.63)$$

Этому уравнению удовлетворяют многочлены порядка $n - 1$, если выполняется условие $\frac{2mE_n}{\hbar^2 \gamma} + 1 - 2n = 0$ или

$$E_n = \hbar \omega \cdot (n - 1/2) \text{ при } n = 1, 2, \dots \text{ Здесь } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \text{ – частота}$$

собственных колебаний. Полученные (см. рисунки 12.38 и 12.39) решения известны как многочлены Эрмита порядка n .



The screenshot shows the Maple V Release 4 interface with the following content:

```
> restart:  
dsolve(diff(f(x), x$2) - 2*gamma*x*diff(f(x), x) + (2*m*E/h^2 - gamma) *  
f(x) = 0, f(x));  
  
f(x) = DESol({ (d^2/dx^2 - Y(x)) - 2*gamma*x (d/dx - Y(x)) + 2*n - Y(x)}, { _Y(x) })  
> dsolve(diff(f(x), x$2) - 2*gamma*x*diff(f(x), x) + (2*n) *f(x) = 0, f(x))  
;  
  
f(x) = DESol({ (d^2/dx^2 - Y(x)) - 2*gamma*x (d/dx - Y(x)) + 2*n - Y(x)}, { _Y(x) })  
> dsolve(diff(f(x), x$2) - 2*gamma*x*diff(f(x), x) + 2*f(x) = 0, f(x));  
  
f(x) = DESol({ (d^2/dx^2 - Y(x)) - 2*gamma*x (d/dx - Y(x)) + 2 - Y(x)}, { _Y(x) })
```

At the bottom right of the window, the status bar shows: Time: 0.5s | Bytes: 2943K | Free: 2097151K

Рисунок 12.38 — Неразрешимость модели «гамонический осциллятор» в Maple



```
Zablelin-2.nb *
DSolve[
  f''[x] - 2 * γ * x * f'[x] +
  (2 * m * E / h^2 - γ) * f[x] == 0, f[x], x

Out[2]=
{{f[x] -> C[1] HermiteH[2 * m - h^2 * γ / (2 * h^2 * γ), x * Sqrt[γ]] +
  C[2] Hypergeometric1F1[
  -2 * m - h^2 * γ / (4 * h^2 * γ), 1/2, x^2 * γ]}}
```

Рисунок 12.39 — Модель гамонического осциллятора в Mathematica

В общепринятых обозначениях полученное решение краевой задачи для УШ (12.61) имеет вид:

$$\psi_n(x) = H_{n-1}(\sqrt{\gamma} \cdot x) \cdot e^{-\gamma \cdot x^2 / 2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (12.64)$$

и показано на рисунке 12.40.

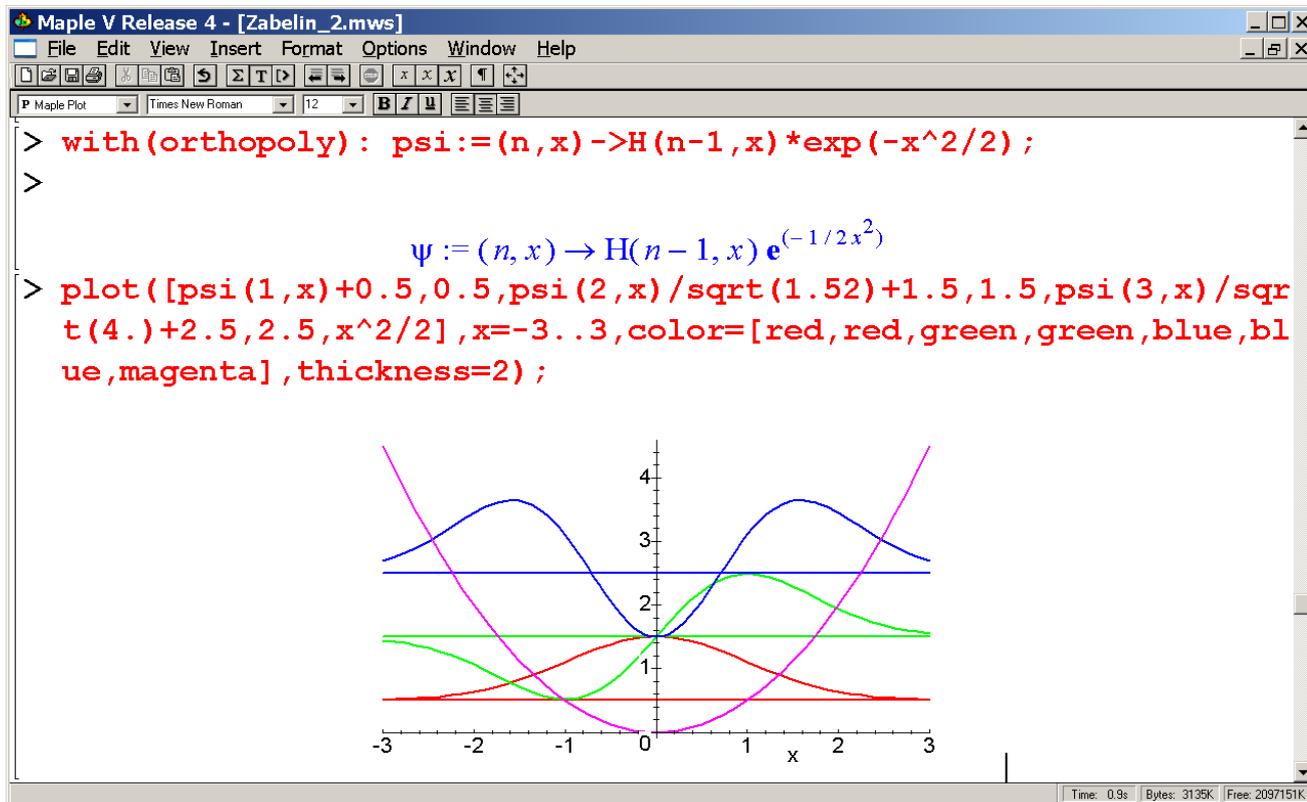




Рисунок 12.40 — Собственные значения и собственные функции УШ для гармонического осциллятора

После важной для физиков нормировки, т.е. обеспечения $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1$ получаем окончательное выражение для собственной функции:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!} x_0} H_{n-1}\left(\frac{x}{x_0}\right) \cdot e^{-x^2/(2x_0^2)}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}},$$

$$n = 1, 2, \dots \quad (12.65)$$

С позиций квантовой физики модель гармонического осциллятора несовершенна, по меньшей мере, в двух отношениях: реальные молекулярные связи не бесконечно прочны, а переходы происходят не только между соседними квантовыми уровнями. Эти недостатки устраняются комбинированными потенциалами, обеспечивающими притяжение бесконечно разнесенных атомов и отталкивание близко сведенных. Один из таких актуальных в физике потенциалов рассмотрен в следующем параграфе.

12.8.4 Квантовый осциллятор в потенциале Морзе

Аналитически разрешимой делает краевую задачу для УШ постановка реалистичного потенциала Морзе $U(x) = D [1 - (1 - e^{-x/a})^2]$. Этот потенциал описывает притяжение и отталкивание атомов, а также важные свойства молекулы: равновесную длину связи и энергию диссоциации. Результирующая постановка краевой задачи для УШ с потенциалом Морзе имеет вид:



$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [E - D(e^{-2x/a} - 2e^{-x/a})^2]\psi(x) = 0, \quad 0 < x \leq \infty, \quad \psi(0) \rightarrow \infty, \quad \psi(\infty) = 0, \quad (12.66)$$

Как свидетельствуют данные рисунков 12.41 и 12.42, Maple и Mathematica не позволяют найти аналитическое решение (12.66).

```

Maple V Release 4 - [Zabelin_2.mws]
File Edit View Insert Format Options Window Help
[Icons]
> restart:
dsolve(diff(f(x), x$2) + m/2/h^2 * (E - Diss*(exp(-2*x/a) - 2*exp(-x/a))) * f(x) = 0, f(x));
f(x) =
DESol( ( ( (∂² / ∂x² - Y(x) ) + ( 1 m E / (2 h²) - 1 m Diss e^(-2x/a) / h² + m Diss e^(-x/a) / h² ) - Y(x) ) ), { _Y(x) } )
Time: 0.3s Bytez: 1407K Free: 2097151K

```

Рисунок 12.41 — Попытка найти собственные значения и собственные функции УШ для осциллятора Морзе в



Maple

```
Zablelin-2.nb *
In[3]:=
DSolve[
  {f''[x] - 2 * m / h^2 *
    (En - D * (Exp[-2 * x / a] - 2 * Exp[-x / a])) *
    f[x] == 0, f[0] == 0, f[∞] == 0}, f[x],
  x]
Out[3]=
DSolve[
  {- 2 ( -D ( e-2x/a - 2 e-x/a ) + En ) m f[x]
    / h2 + f''[x] == 0,
    f[0] == 0, f[∞] == 0}, f[x], x]
```

Рисунок 12.42 — Попытка найти собственные значения и собственные функции УШ для осциллятора Морзе в Mathematica

Тем не менее решение (12.66) существует и известно в физике. Собственные значения E_n равны:

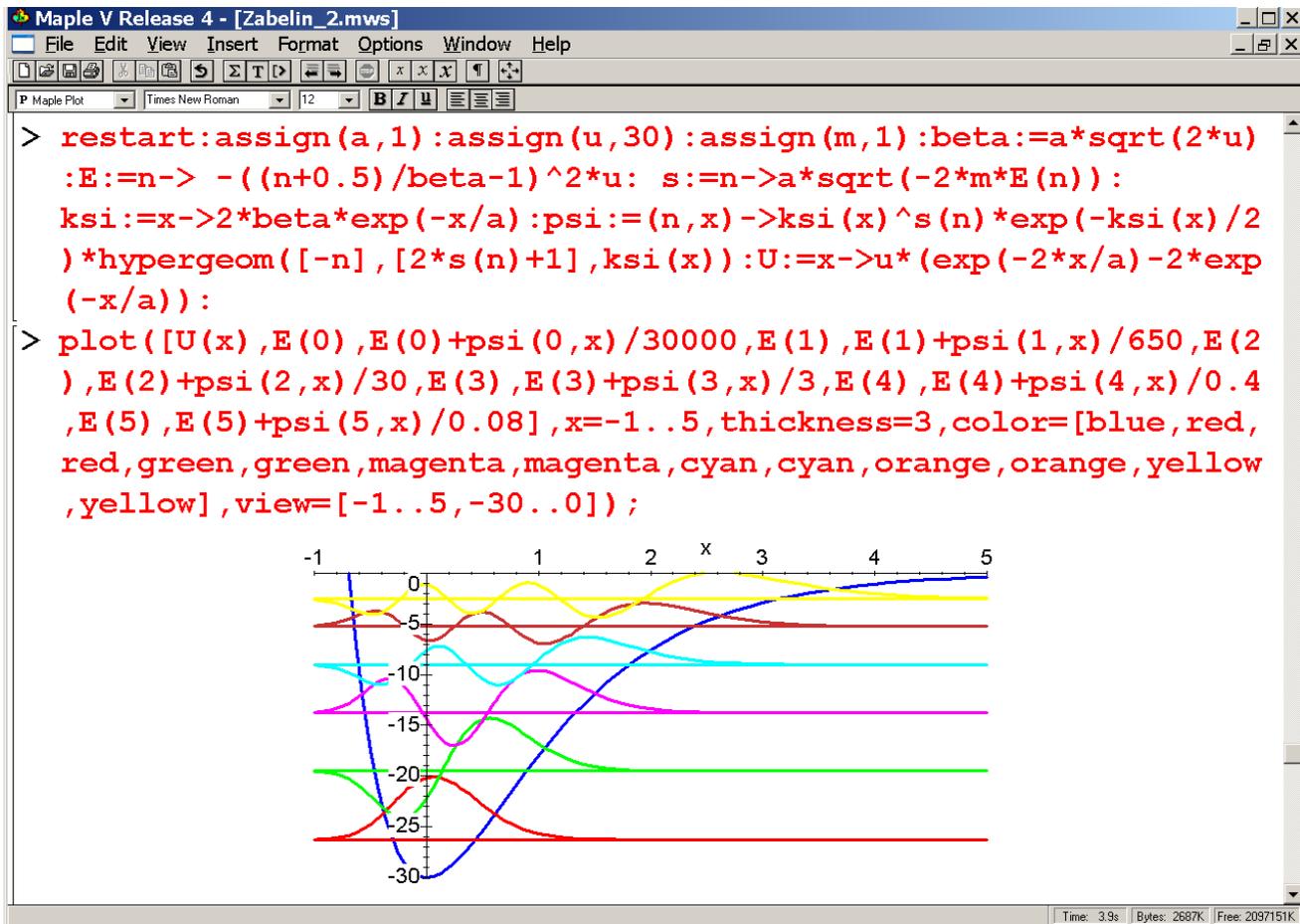
$$E_n = -D \cdot [1 - \beta^{-1}(n + 1)]^2, \quad \beta = \frac{a\sqrt{2mD}}{\hbar}, \quad 0 \leq n < \beta - 2 \quad (12.67)$$

Число связанных состояний в этой модели конечно и определяется параметрами потенциальной ямы a и D .

Соответствующие E_n собственные функции задачи (12.66) выражаются через вырожденную гипергеометрическую функцию $\Phi(a, b, \xi)$:

$$\psi_n(x) = \xi^s \cdot e^{-\xi/2} \cdot \Phi(-n, 2s + 1, \xi), \quad \xi = 2 \cdot \beta \cdot e^{-x/a}, \quad s = \frac{a\sqrt{-2mE_n}}{\hbar} \quad (12.68)$$

Вид потенциала Морзе и характер решений краевой задачи (12.66) показан на рисунке 12.43.



Рисунке 12.43 — Собственные значения и собственные функции УШ для осциллятора Морзе

Практическая ценность этой модели состоит в возможности определить параметры потенциала по экспериментальным спектрам (излучения и/или поглощения) двух- и некоторых малоатомных молекул. Эти параметры, в свою очередь однозначно связаны с такими характеристиками молекулы как длина связи в основном состоянии r_0 и энергия диссоциации D .

Параметр r_0 в рассмотренной модели не фигурировал, что не является принципиальным в силу линейности УШ: приведенные результаты исследования модели (12.66) полностью справедливы и при замене переменной $x \rightarrow r/r_0 - 1$. В параграфе 12.8.6 рассмотрим обратную задачу – восстановление потенциала межмолекулярного взаимодействия по экспериментально наблюдаемым частотам переходов.

12.8.5 Прямая задача молекулярной спектроскопии

Переходы квантового осциллятора из одного состояния в другое сопровождаются изменением энергии системы на величину $\Delta E = E_{\text{fin}} - E_{\text{ini}}$, где E_{ini} и E_{fin} – соответственно энергия начального и конечного состояний. В гетероядерных двухатомных молекулах, например, этот переход сопровождается изменением дипольного момента (произведение неравномерности заряда на пространственный масштаб этой неравномерности). В результате испускается или поглощается фотон с энергией ΔE .

Вероятность перехода между начальным и конечным состояниями (интенсивность соответствующей линии в спектре излучения/поглощения) равна:

$$W_{\text{ini} \rightarrow \text{fin}} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\text{ini}}(x) \cdot D(x) \cdot \psi_{\text{fin}}(x) dx, \quad (12.68)$$

где $D(x)$ – зависимость дипольного момента от межъядерного расстояния. В нулевом приближении $D(x) = \alpha \cdot x$ и

$$W_{\text{ini} \rightarrow \text{fin}} = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\text{ini}}(x) \cdot x \cdot \psi_{\text{fin}}(x) dx . \quad (12.69)$$

На рисунке 12.44 рассчитаны вероятности таких оптических переходов с нижнего на следующий и вышележащие уровни для модели гармонического осциллятора.

Рисунок 12.44 — Интенсивность переходов в гармоническом осцилляторе с линейным дипольным моментом

Выполненный расчет (см. рисунок 12.44) подтвердил известный факт: в такой модели разрешены переходы только между соседними уровнями, следовательно, энергетический спектр вырожден в единственную линию. Вырождение снимается двумя способами – нелинейностью в дипольном моменте (см. рисунок 12.45) и агармоничностью потенциала. Практически гетероядные молекулы неидеальны в обоих отношениях.

Рис. 12.45 — Интенсивность переходов в гармоническом осцилляторе с нелинейным дипольным моментом

12.8.6 Обратная задача молекулярной спектроскопии

Пусть имеются наблюдаемые линии излучения, например, гипотетической молекулы XY с длинами волн (волновыми числами) согласно данным рисунка 12.46. Требуется определить параметры потенциала межатомного взаимодействия в этой молекуле. Для регуляризации используем потенциал Морзе. Частота колебаний, параметр ангармонизма и энергия диссоциации восстанавливались на основании данных из рисунка 12.46 в соответствии с регуляризующей формулой (12.68). Отметим, что из этих параметров лишь два независимы.

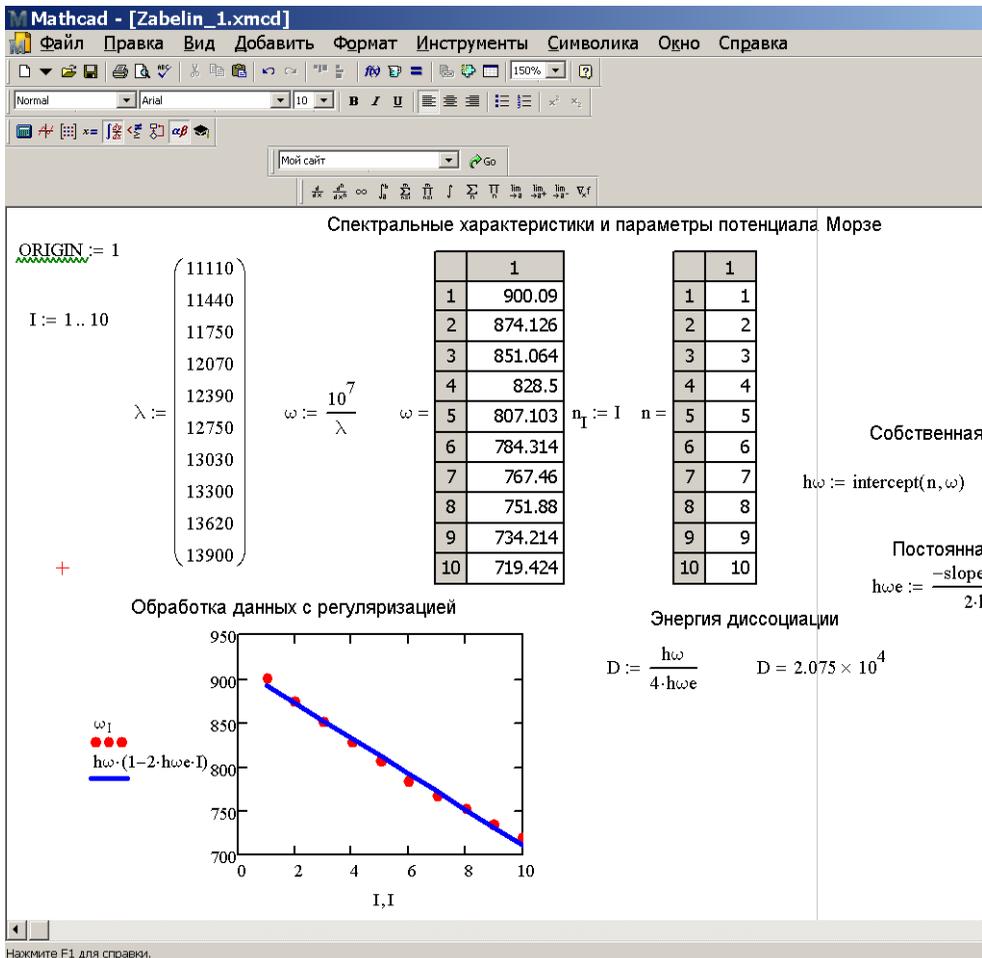


Рисунок 12.46 — Параметры потенциала Морзе, восстановленные по спектральным данным

Отметим, что определить равновесное расстояние r_0 , отвечающее длине связи, не удастся: краевая задача для УШ с потенциалом Морзе инвариантна относительно r_0 .

Выводы по разделу

Последовательно и разносторонне рассмотрены краевые задачи для уравнения Шрёдингера с актуальными для

науки и техники потенциалами: асимметричным треугольным (физика полупроводников, твердотельная электроника), симметричным треугольным (взаимодействие субэлементарных частиц типа кварк), параболический (спектроскопия малых и больших молекул), потенциалом Морзе (спектроскопия двухатомных молекул). Для всех потенциалов получены аналитические и/или численные решения уравнения Шрёдингера (значение энергии связанных состояний и соответствующую им волновую функцию). Для получения решений использовался математический аппарат специальных функций (полиномы Эрмита и вырожденная гипергеометрическая функция), а также вычислительные средства систем MathCAD, Maple и Mathematica.

Во всех случаях решение уравнения Шрёдингера качественно сходно – имеются дискретные разрешенные энергетические состояния. В зависимости от высоты потенциальной стенки (конечной или бесконечной) этот спектр также конечен или бесконечен.

Применительно к задачам молекулярной спектроскопии модель гармонического осциллятора и осциллятора Морзе позволяют надежно рассчитывать вероятности переходов между различными разрешенными квантовыми состояниями. В модели с параболическим потенциалом и линейным дипольным моментом разрешены переходы только между соседними уровнями.

Переходы между несоседними состояниями в двух и более атомных молекулах обусловлены ангармоничностью и нелинейностью дипольного момента.

Принципиально, что потенциал Морзе и полученные для него решения уравнения Шрёдингера могут использоваться для решения обратной задачи молекулярной спектроскопии – восстановления потенциала по наблюдаемым спектрам.

Список первоисточников к параграфу 12.8

1. Моисеев Н.Н. Математические задачи системного анализа. – М.: Наука, 1981.

2. Моисеев Н.Н. Математика ставит эксперимент. М.:

Наука, 1979.

3. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2001.

4. Van Zeghbroeck B. Energy bands: www.ece-www.colorado.edu/~bart/book/book/chapter2/ch2_3.htm.

5. Mohandas Pillai M., Goglio J, Walker T.G. Matrix Numerov Method for Solving Schroedinger's Equation: www.physics.wisc.edu/~tgwalker/448-9Mathematica/448%20Mathematica/MatrixNumerov.pdf.

6. Чернушкин В.В. Использование среды Maple для решения задач квантовой механики: методические указания. Воронеж: ВГУ, 2005.

7. Поршневу С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB: www.exponenta.ru/educat/systemat/porshnev/matlab.asp.

8. Fowler M. Schrödinger's Equation in 1-D: Some Examples: galileo.phys.virginia.edu/classes/751.mf1i.fall02/OneDimSchr.htm.

9. Lucha W. Solving the Schroedinger equation for bound states with Mathematica 3.0: <http://library.wolfram.com/infocenter/Articles/2455>.

10. Майер Р.В. Использование компьютерных моделей при изучении квантовой физики: http://cdn.scipeople.com/materials/57195/Mayer_Komp_mod_mikromir_DL.pdf.

11. Одномерное стационарное уравнение Шрёдингера: www.ru.wikipedia.org/wiki/Одномерное_стационарное_уравнение_Шрёдингера.

12. Семинар 5. Уравнение Шрёдингера: ncphys.sinp.msu.ru/sem2/sem05.html.

13. Квантовая механика: lectoriy.mipt.ru/course/TheoreticalPhysics-QuantumMechanics-13L.

12.9 Оценка параметров генерирующей среды CO₂-лазера с оптической накачкой (Чакуров)

В научных исследованиях и технике широкое применяются мощные молекулярные лазеры ИК-диапазона, в наиболее известных из них используется CO₂-N₂-He-смесь в качестве рабочей среды и тлеющий разряд как средство создания инверсной населенности. Для таких лазеров характерны, с одной стороны, высокие мощность и КПД, а с другой, сложность конструкции, обусловленная необходимостью охлаждать рабочую смесь и удалять из нее образующиеся в столбе разряда побочные продукты. Охлаждение лазерной смеси и очистка ее от реагентов, затрудняющих или срывающих генерацию, осуществляется, как правило, прокачкой через рабочий объем. Хотя реализация проточного режима смеси сильно усложняет конструкцию лазера, без нее не удастся предотвратить перегрев рабочего газа, ведущий к термализации лазерных уровней.

Для ряда современных приложений, наоборот, интерес представляют маломощные лазеры ИК-диапазона. При создании таких лазеров важно обеспечить простоту конструкции и технологические (эксплуатационные) удобства. Теоретически доказана и подтверждена экспериментально возможность создания CO₂-лазера с оптической накачкой излучением черного тела. КПД такого лазера не превышает 0.1 %, что связано с низкой эффективностью радиационной накачки газовой рабочей среды в полосе поглощения 4.3 мкм CO₂: тепловое излучение источника инверсии широкополосно, в то время как его "захват" осуществляется в пределах линейчатого – по существу узкополосного спектра. Перспективным представляется осуществление накачки CO₂-содержащей лазерной смеси излучением тела, на поверхность которого нанесено покрытие с оптически селективными свойствами, позволяющее повысить КПД лазера в четыре раза.

Особо актуальны способы информационного моделирования и параметрической оптимизации подобных лазерных систем. Здесь важно соблюсти соответствие размерности моделей – уровню исполнимости вычислений на современных ЭВМ.

Поэтому целью работы является разработка разноуровневых (аналитических, и численных) моделей поуровневой кинетики в активных средах газовых лазеров, в частности CO₂-лазера.

Достижение поставленной цели осуществлялось посредством решения следующих задач:

- изучения известных моделей газофазной лазерной среды и техники их анализа;
- ознакомления с существующими аналитическими и численными методами решения нелинейных краевых задач физико-химической динамики (реакций и переноса излучения);
- разработки разнородных алгоритмов численного и аналитического исследования кинетики газофазной лазерной среды;
- конструирования компьютерной модели, описывающей образование инверсной населенности в CO_2 -лазере с оптической накачкой и позволяющей оптимизировать термохимические параметры лазерной среды;
- выработки стандартов (шаблонов и форм) пользовательского интерфейса с учетом действующих санитарных правил и норм и гигиенических рекомендаций в отношении трудового процесса с применением ПК;
- реализации системы моделей в виде расчетных модулей с использованием пакетов инженерной математики;
- проведение вычислительного эксперимента с разработанными моделями в целях выяснения области их применимости и степени адекватности.
- Результат работы, полученный путем решения поставленных задач, следующий:
- с использование аналитических и вычислительных средств прикладной математики разработаны и апробированы методы моделирования параметров газофазной лазерной среды, в т.ч. оптимизации ее параметров;
- расчетами показано, что предварительные оценки эффективности рассмотренной в работе перспективной конструкции существенно завышены.

12.9.1 Конструкция и процесс генерации в газовом CO₂-лазере

Целью раздела является аналитический обзор моделей газофазной лазерной среды и методов ее моделирования.

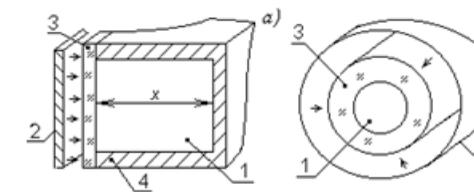
Эффективным способом повышения КПД газовых лазеров является установление оптимальных параметров рабочей смеси – температуры и химического состава – и выбор конструктивной схемы генератора. Этим вопросам посвящен вычислительный эксперимент данной главы: исследование нацелено на установление физического механизма образования инверсии, а также выявление ведущих факторов и процессов, определяющих принципиальные пределы эффективности CO₂-лазера с накачкой широкополосным источником (теплового излучения). Для оценки радиационно-кинетических показателей разноразмерных конструкций подобного типа предлагаются 1) достаточно подробная ИММ лазерной среды и 2) техника выделения механизма образования инверсии.

12.9.1.1 Описание конструкции и процесса

Выбор оптимальной лазерной смеси в значительной мере определяется схемой и функциональными особенностями установки, поэтому решать подобную задачу целесообразно применительно к известным особенностям практической реализации. Возможны два базовых варианта конструкции, изображенные на рис. 12.49, *а* и *б* соответственно. В первом варианте (рис. 12.49, *а*) охлаждение лазерной смеси происходит за счет контакта с металлическими стенками камеры, дополнительное – воздушное или водяное – охлаждение которых технически не сложно. Недостатком этой конструкции является приблизительно втрое меньшая по сравнению с максимально возможной эффективность накачки – следствие “радиационной пассивности” охлаждаемых стенок рабочей камеры (см. рис. 12.50, *а-б*). Второй вариант конструкции (рис. 12.49, *б*) позволяет в 3 ÷ 4 раза уплотнить поток накачивающего излучения, однако чтобы предотвратить перегрев лазерной смеси, требуется осуществлять ее прокачку через рабочий объем со скоростью, превышающей 10 м/с. Поэтому на поисковом этапе исследований конструкции рис. 12.49, *а* следует отдать предпочтение как сравнительно легко реализуемой.

Рисунок 12.49 – Варианты конструкции лазерной установки: *a* – с конвективным охлаждением лазерной смеси; *b* – с проточным режимом работы

Обозначения: 1 – лазерная смесь; 2 – источник накачивающего теплового излучения; 3 – часть рабочей камеры, прозрачная для ИК-квантов накачки; 4 – охлаждаемая металлическая часть рабочей камеры; стрелками указано направление потока накачивающего излучения



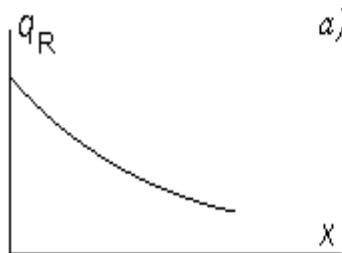
277

4 – охлаждаемая металлическая часть рабочей камеры; стрелками указано направление потока накачивающего излучения

С целью конкретизировать результаты объектом моделирования выбрано устройство, схема которого изображена на рис. 12.49, *a*. Поперечный размер камеры с рабочей средой x равен 1 см, температура металлической пластины – источника накачки – 1000 К. Лазерная генерация осуществляется на переходе $\text{CO}_2(00^0_1) \rightarrow \text{CO}_2(10^0_0)$ (полоса 10.6 мкм), накачка – на переходе $\text{CO}_2(00^0_0) \rightarrow \text{CO}_2(00^0_1)$; коэффициент усиления пропорционален величине инверсии $\Delta N = N_{\text{CO}_2(00^0_1)} - N_{\text{CO}_2(10^0_0)}$. Устройство типа показанного на рис. 12.49, *a* реализовано «в железе» и успешно апробировано в 80-90-е гг. прошлого столетия сотрудниками НО «ИВТАН» РАН Э.Э. Шпильрайном и В.Н. Щегловым.

Рисунок 12.50 – Распределение потока накачивающего излучения в объеме лазерной среды для конструкций рис. 1, *a-b* соответственно.

x – расстояние от источника накачки



в допущения, структура и состав

Предлагаемая в данной работе усовершенствованная ИММ объединяет большинство надежно известных элементарных физико-химических процессов в рабочей среде, в т. ч. перенос ИК-излучения в CO_2 – оптически активном молекулярном газе. Существенным отличием модели от разработанных ранее для мощных газоразрядных CO_2 -лазеров является доступно полный учет всевозможных, а не только наиболее значимых, элементарных квантово-химических процессов и процессов передачи колебательного возбуждения, а также обратных к каждому из этих процессов. Необходимость расширения номенклатуры первично вовлеченных в рассмотрение квазиреакций обусловлена нацеленностью исследования на 1) факторный анализ лазерной кинетики и 2) оптимизацию конструктивно-функциональных показателей установки посредством КМ.

Математический каркас модели задается системой дифференциальных уравнений переноса излучения и поуровневой кинетики:

$$\nabla I_\omega = -\kappa'_\omega I_\omega, \quad I_\omega(0) = I_\omega^b(T), \quad \kappa'_\omega = \kappa'_\omega(c_j), \quad \frac{dc_j}{dt} = f_j(c_j, T, I_\omega), \quad (12.72)$$

где символами c_j и f_j обозначены населенность отдельного колебательного уровня частицы и темп ее изменения в процессах переноса возбуждения и релаксации; I_ω и κ'_ω – соответственно интенсивность излучения и подправленный на вынужденное испускание коэффициент поглощения квантов с частотой ω ; T – температура лазерной смеси.

Следует отметить, что уравнения (12.72) описывают кинетику заселения/очистки лазерного уровня в отсутствии лазерной генерации, сопровождающейся, естественно, его дополнительной депопуляцией. По существу это означает, что генерация слабо “шунтирует” верхний из лазерных колебательных уровней, и блочная ИММ типа показанной на рис. 12.51 оказывается вполне адекватной. Фрагментация модели на однонаправленно связанные блоки правомочна благодаря тому, что 1) лазерная генерация осуществляется на отдельном колебательно-вращательном переходе, 2) заселение вращательных подуровней лазерного колебательного состояния осуществляется неселективно, 3) распределение молекул по вращательным энергетическим подуровням термализуется за несколько парных столкновений, что на два порядка быстрее колебательной больцманизации. Таким образом, процесс генерации на единственной колебательно-вращательной линии может вызвать снижение интегральной населенности

верхнего колебательного лазерного уровня на $3 \div 10$ % по сравнению с ситуацией, когда интенсивная индуцированная депопуляция отсутствует (генерации нет). Степень снижения населенности, очевидно, соответствует относительному вкладу лазерной линии в суммарную силу всех колебательно-вращательных линий соответствующей полосы.



Рисунок 12.51 – Схема фрагментации ИММ СО₂-лазера с накачкой тепловым излучением. ЛУ – аббревиатура термина “лазерный (колебательно-вращательный) уровень”

12.9.1.2 Динамика инверсной населенности в рабочей среде CO₂-лазера

В зависимости от соотношения характерных времен колебательного и вращательного энергообмена, а также от силы линии, выбранной в качестве лазерной, и параметров оптической системы – резонатора принципиально возможна различная динамика генерации (см. рис. 12.52, *а-в*). Смысл приведенных здесь временных диаграмм достаточно очевиден: если оптическая система позволяет расселять лазерный уровень со скоростью, заметно превышающей производительность системы накачки, мощность генерации колеблется в релаксационном режиме (рис. 12.52, *в*: модель – генератор Ван-дер-Поля с малым параметром при старшей производной); когда имеет место обратное соотношение, мощность лазера стабильна (рис. 12.52, *а*), но КПД низок; промежуточному случаю соответствуют незначительные колебания мощности (рис. 12.52, *б*) и приемлемая эффективность.

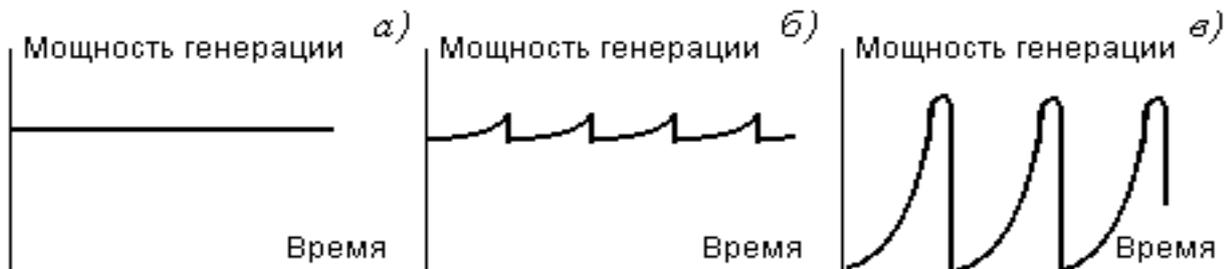


Рисунок 12.52 – Варианты динамических режимов газового CO_2 -лазера (не обязательно с оптической накачкой тепловым излучением):

а – стационарный; *б* – слабо осциллирующий; *в* – импульсно-периодический

Для наших целей, однако, важно другое – динамика генерации полностью описывается соответствующим модулем на рис. 12.51, не возмущая модуль накачки (там же, слева) сколько-нибудь заметным образом. Это обстоятельство позволяет сосредоточить внимание на объекте исследования – активной лазерной среде $\text{CO}_2 - \text{N}_2 - \text{He}$ и ее модели – в поисках ответа на вопрос о возможности и эффективности генерации когерентного излучения системами подобного рода. Детализация «генераторного» блока ИММ рис. 12.51, составляющая предмет лазерной физики и техники, выходит далеко за рамки данной монографии, поэтому придание главе смысловой и числовой завершенности осуществлено на уровне примитивов – посредством минимального числа соответствующих элементарных оценок.

12.9.1.3 Кинетическая модель среды CO_2 -лазера и первичные данные

Особое внимание в ИММ CO_2 -лазера следует уделить выбору кинетических данных, что принципиально важно при низкой интенсивности накачки. Каждому элементарному процессу в кинетической схеме ставится в соответствие обратный, константа скорости которого вычисляется на основе принципа детального равновесия. Вследствие неполноты и неопределенности информационной базы относительно квантовой кинетики CO_2 -содержащих лазерных смесей строятся два кинетических блока ИММ – базовый, объединяющий достаточно хорошо изученные 12 обратимых реакций, и расширенный – включающий дополнительно 13 плохо изученных элементарных процессов. Кинетические параметры малоизученных квантовых процессов, расширяющих потенциальные возможности энергообмена, оценены руководителем разработки специально. Сопоставление результатов ВЭ, отвечающих базовому и расширенному кинетическим блокам, позволяют судить о полноте кинетической картины, обеспечиваемой первичными показателями ИММ – структурой и данными. Отвечающие базовому и расширенному кинетическим блокам схемы колебательных уровней CO_2 приведены на рис. 12.53, *а-б*.

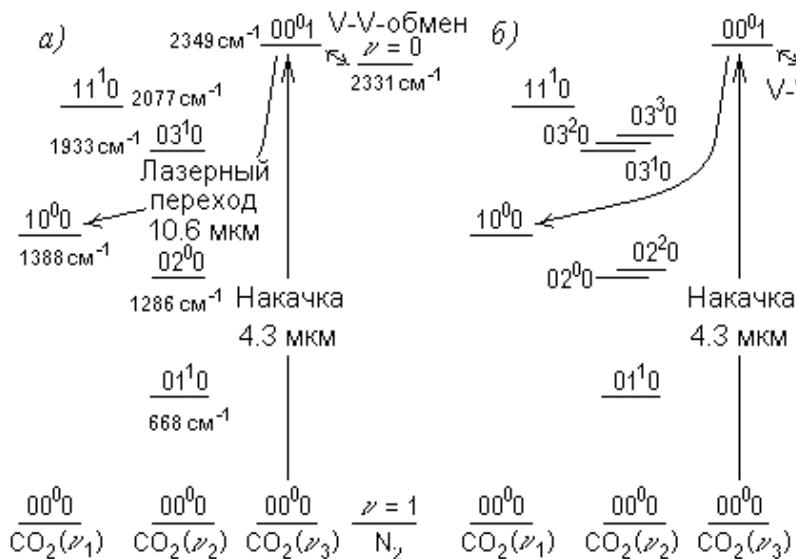
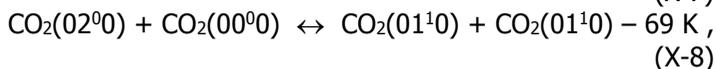
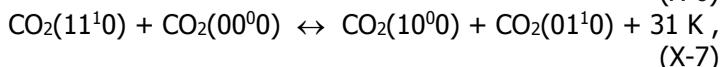
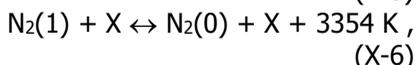
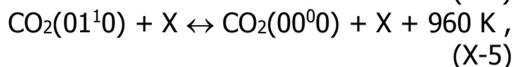
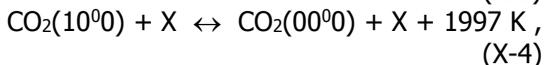
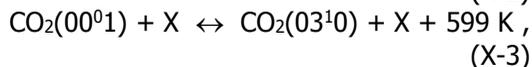
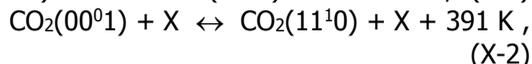
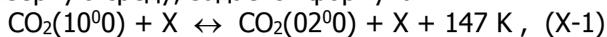
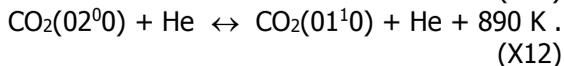
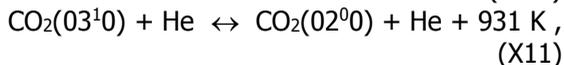
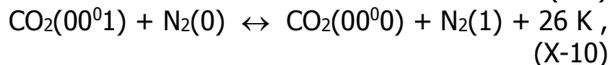
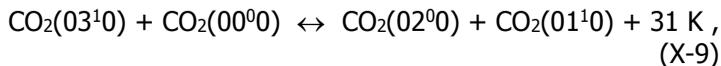


Рисунок 12.53

Явный вид базового набора элементарных квантово-химических актов между энергетическими уровнями CO_2 , N_2 и He , составляющими лазерную среду, задается формулами:





Скорость радиационной накачки уровня $\text{CO}_2(00^01)$ рассчитывается по известным квантово-механическим соотношениям. Необходимая при расчете эквивалентных ширин спектральных линий геометрическая длина пути x выбрана равной 1 см, что подразумевает квазинульмерный перенос излучения, испущенного черным телом, в рабочем объеме лазера. Такое приближение представляется вполне оправдывается тем, что: 1) выбранная конструкция (см. рис. 12,49, а) не имеет других характерных размеров; 2) константы скоростей квантовых энергообменных процессов известны с точностью до множителя $1/3 \div 3$; 3) в оптимальных для генерации условиях интегральная для 4.3 мкм полосы поглощения CO_2 оптическая длина пути слабо зависит от геометрической – вследствие сильной реабсорбции излучения в центрах наиболее интенсивных колебательно-вращательных линий при несущественном вкладе их далеких крыльев в совокупное поглощение.

12.9.1.4 Точность и область применимости модели

Алгоритм расчета скорости накачки колебательного лазерного уровня излучением нагретой пластины сводится к последовательному применению указанных руководителем курсовой работы 8-ми формул для расчета радиационных характеристик отдельных колебательно-вращательных линий в 4.3 мкм полосе CO_2 и последующему их усреднению при помощи указанных руководителем соотношений. Полоса поглощения CO_2 4.3 мкм, отвечающая радиационному переходу $\text{CO}_2(00^00) \rightarrow \text{CO}_2(00^01)$, в характерных для данного лазера условиях представляет собой совокупность ~ 150 колебательно-вращательных линий. Расстояние между линиями составляет $\sim 0.8 \text{ см}^{-1}$, а их полуширина в зависимости от давления изменяется от $3 \cdot 10^{-5}$ до 10^{-2} см^{-1} . Численные значения использованных в ИБМ молекулярных и спектроскопических постоянных для системы $\text{CO}_2 - \text{N}_2 - \text{He}$ взяты из использо-

ванных литературных источников.

Ошибка определения скорости радиационной накачки $\text{CO}_2(00^0_1)$ -уровня в рамках выбранной расчетной методики в большинстве случаев не превышает 30 % и несущественно редко оказывается большей 50 %, т.е. близка к неопределенности, с которой известны кинетические константы реакций поуровневой кинетики. Природа погрешностей, вносимых в расчет радиационного переноса и соответственно пространственного распределения частиц по возбужденным колебательным уровням, состоит в том, что в действительности реализуются как более длинные, так и более короткие – по сравнению с $x = 1$ см – трассы “накачивающих” фотонов. Одновременно “центр тяжести” поглощения излучения смещается в направлении источника (при диффузной поверхности последнего). Частично последний фактор нивелируется процессами просветления среды и микро-макропереноса. Взаимная компенсация перечисленных обстоятельств позволяет отказаться от их детального учета.

Необходимо уделить особое внимание области применимости описанной ИММ лазерной среды. При построении кинетической схемы релаксационных и обменных реакций за пределами рассмотрения оказались процессы потери колебательного возбуждения частицами CO_2 при контактах со стенками рабочей камеры. Это обстоятельство накладывает на применимость модели ограничение:

$$x \gg (\sigma c)^{-1} = kT/(\sigma P), \quad (12.73)$$

где c , σ , k , T – соответственно концентрация частиц в лазерной смеси, характерное для компонентов газокинетическое сечение, постоянная Больцмана и температура; $P = \sum P_i$ – полное давление газа в камере. Условие (12.73) подразумевает многократную реализацию межмолекулярных столкновений с участием избранной молекулы в промежутке времени между двумя ее последовательными контактами со стенками камеры. Трактую в (12.73) знак отношения “ \gg ” как превышение, по крайней мере, в 100 раз, можно придать этому ограничению количественную форму $xP > 1$ Торр·см. Для рассматриваемой установки это равнозначно требованию $P > 1$ Торр, которое будет приниматься во внимание при интерпретации результатов.

Выводы по разделу

Проанализированы модели выбрана базовая для описания поуровневой кинетики в CO₂-лазере с накачкой излучением.

Подобраны необходимые для расчетов первичные кинетические сведения.

Обозначены точность и сфера применимости выбранной модели.

12.10 Организация и результаты вычислительного эксперимента

Поиск оптимальных параметров рабочей смеси осуществлялся методом Монте-Карло. Основанием для использования такой грубой дискретизации при поиске оптимума служит соображение, что константы скорости всех элементарных процессов переноса квантового возбуждения и его релаксации в поступательные степени свободы сопоставимы, а концентрации основных компонентов лазерной среды варьируются в пределах структурной устойчивости ИММ. Математически это означает, что величина инверсии определяется некоторой общей примерно равногладкой по отношению ко всем варьируемым параметрам функцией – без узких протяженных долин и/или хребтов. Физически такая постановка представляется более чем оправданной: если ВЭ позволяет “обнаружить” маломерную (т.е. малообъемную), но протяженную по ряду параметров зону оптимума, это вовсе не означает, что соответствующие условия реализуемы и/или обнаружимы фактически. Детализация подобного результата и установление факта его адекватности требуют дополнительных усилий как вычислительного, так и экспериментального порядка, поэтому здесь мы откажемся от поиска экзотических комбинаций параметров, признав их практически бесполезными.

Исключив из рассмотрения описанную специфическую ситуацию, мы оправдываем использование метода Монте-Карло как эффективного равномерного способа локализовать экстремум функции многих переменных. Алгоритм отыскания оптимального состава лазерной смеси, которому отвечает наибольшая величина инверсии, заключается в следующем. Посредством генератора псевдослучайных чисел формировалась их некоторая последовательность. На базе этой последовательности вычислялись парциальные давления компонентов P_{CO_2} , P_{N_2} и P_{He} (в Торр) – как значе-

ния, десятичный логарифм которых равномерно распределен в интервале $-1 \div 2$. Для каждого набора $\{P_{\text{CO}_2}, P_{\text{N}_2}, P_{\text{He}}\}_k$ численно интегрировались уравнения РП-ХК (12.72), реакции № X1-12 – до момента установления стационарного состояния и по результатам рассчитывалась величина инверсии $\Delta N = M_{\text{CO}_2(0001)} - M_{\text{CO}_2(1000)}$. Оптимальный набор параметров лазерной смеси выявлялся путем сопоставления отвечающих различным k -м вариантам расчета значений ΔN_k . Достижение точности локализации оптимума $\sim 30\%$ по концентрации каждого компонента потребовало решать уравнения (12.72) для 10^5 различных комбинаций химического состава лазерной смеси. Чтобы исследовать влияние температуры рабочей смеси на величину инверсии расчеты проводились при $T = 200, 300, 400$ и 500 К.

12.10.1 Программная реализация модели

Для составления и интегрирования уравнении поуровневой кинетики применялись система инженерной математики MathCAD. Фрагменты программных кодов показаны на рис. 12.54.

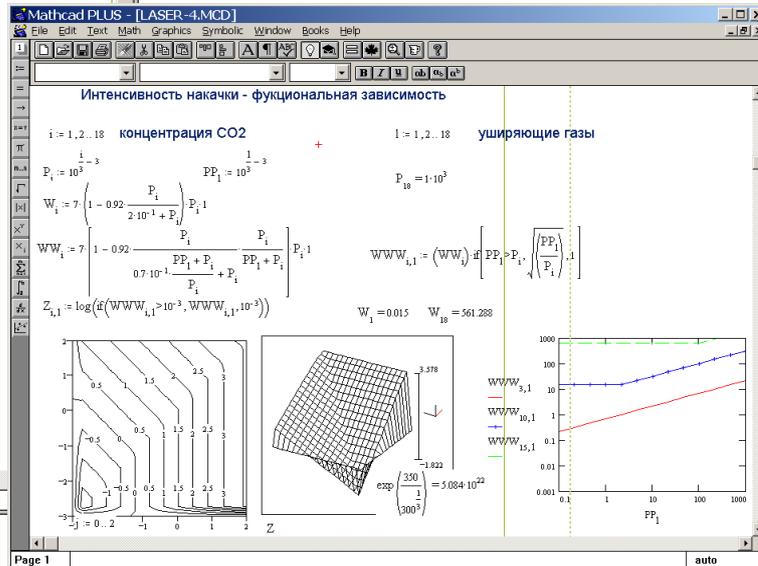
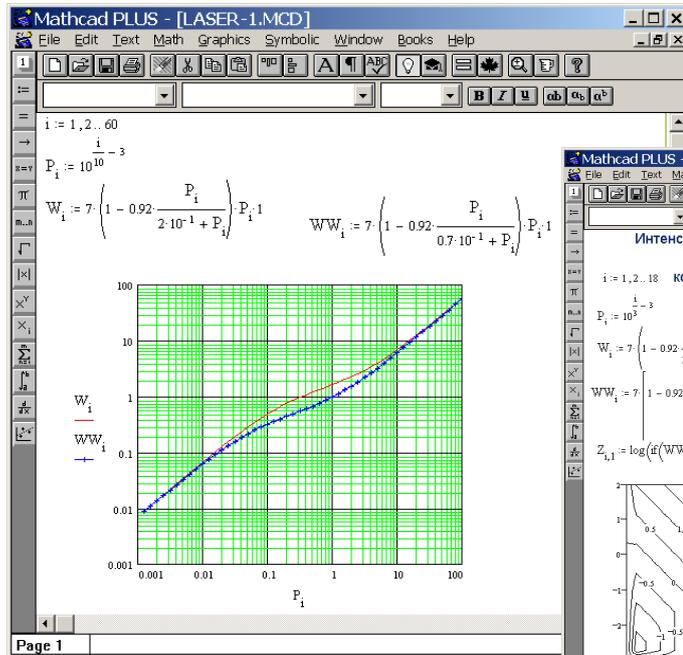


Рисунок 12.54 – Реализация моделей активной среды CO₂-лазера в MathCAD

Принципиально важно, что процедура имитации всякий раз осуществлялась дважды – для базового и расширенного набора элементарных квантово-химических реакций. Сопоставление результатов служило индикатором полноты и в определенной степени достоверности ИММ, основанной на реакциях № 1-12.

Отметим, что поиск стационарного состояния квантово-химической ДС методом установления – непосредственным интегрированием ОДУ (12.72) – не является безальтернативным: неподвижные точки в фазовом пространстве таких систем можно определить, разрешив систему соответствующих асимптотических алгебраических уравнений. Применительно к нашей задаче альтернативная методика требует рассматривать вместо (12.72) уравнения

$$\nabla I_{\omega} = -\kappa'_{\omega} I_{\omega}, \quad I_{\omega}(0) = I_{\omega}^b(T), \quad \kappa'_{\omega} = \kappa'_{\omega}(c_j), \\ f(c_j, T, I_{\omega}) = 0. \quad (12.74)$$

Однако корректно разрешить систему нелинейных алгебраических уравнений в (12.74) не проще, чем проинтегрировать ОДУ: в этом случае неясными и требующими особого исследования остаются вопросы устойчивости конкретных, т.е. отвечающих определенному набору начальных данных, кинетических траекторий и предельных состояний по отношению к возмущениям как стартовых условий, так и внутренних параметров (кинетических коэффициентов) модели. При многовариантном решении задачи (12.72) методом установления обозначенные проблемы в значительной степени снимаются – за счет “визуализации” динамики переходного процесса для всевозможных кинетических траекторий.

12.10.2 Исходная термокинетическая информация

Использованные в расчетах первичные термокинетические данные приведены в табл. 12.2

Таблица 12.2 – Реакции в рабочей среде CO₂-лазера

№ р-ии	Схема реакции: A+B+C → D+E+F	X	Константа скорости реак- ции <i>k</i>
1	$\text{CO}_2(10^00) + X \xrightarrow{\text{K}} \text{CO}_2(02^00) + X + 147$	CO ₂	$8.65 \cdot 10^{-15} T^{3/2}$
		N ₂	$3.68 \cdot 10^{-16} T^{3/2}$
		He	$4.23 \cdot 10^{-17} T^{3/2}$
		CO ₂	$8.65 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{147/T}$
1'	$\text{CO}_2(02^00) + X \xrightarrow{\text{K}} \text{CO}_2(10^00) + X - 147$	N ₂	$3.68 \cdot 10^{-16} T^{3/2} e^{147/T}$
		He	$4.23 \cdot 10^{-17} T^{3/2} e^{147/T}$
		CO ₂	$8.65 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{147/T}$
2	$\text{CO}_2(00^01) + X \xrightarrow{\text{K}} \text{CO}_2(11^10) + X + 391$	CO ₂	$6.6 \cdot 10^{-11} e^{-62.8/T^{1/3}}$
		N ₂	$1.5 \cdot 10^{-10} e^{-75.5/T^{1/3}}$
		He	$5.5 \cdot 10^{-13} T^{1/2} e^{-59/T^{1/3}}$
		CO ₂	$6.6 \cdot 10^{-11} e^{-}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реак- ции k
2'	$\text{CO}_2(11^{10}) + X \xrightarrow{K} \text{CO}_2(00^{01}) + X - 391$	N ₂ He	$62.8/\tau^{1/3+391/T}$ $1.5 \cdot 10^{-10} e^{-}$ $75.5/\tau^{1/3+391/T}$ $5.5 \cdot 10^{-13} \tau^{1/2} e^{-}$ $59/\tau^{1/3+391/T}$
3 3'	$\text{CO}_2(00^{01}) + X \xrightarrow{K} \text{CO}_2(03^{10}) + X + 599$ $\text{CO}_2(03^{10}) + X \xrightarrow{K} \text{CO}_2(00^{01}) + X - 599$	CO ₂ N ₂ He CO ₂ N ₂ He	$6.6 \cdot 10^{-11} e^{-62.8/\tau^{1/3}}$ $1.5 \cdot 10^{-10} e^{-75.5/\tau^{1/3}}$ $5.5 \cdot 10^{-13} \tau^{1/2} e^{-59/\tau^{1/3}}$ $6.6 \cdot 10^{-11} e^{-}$ $62.8/\tau^{1/3+599/T}$ $1.5 \cdot 10^{-10} e^{-}$ $75.5/\tau^{1/3+599/T}$ $5.5 \cdot 10^{-13} \tau^{1/2} e^{-}$ $59/\tau^{1/3+599/T}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реак- ции k
4	$CO_2(10^00) + X \rightarrow CO_2(00^00) + X + 1997 \text{ К}$	CO ₂	$7.1 \cdot 10^{-11} e^{-72/\tau^{1/3}}$
4'		N ₂	$4.3 \cdot 10^{-11} e^{-72/\tau^{1/3}}$
		He	$1.1 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/\tau^{1/3}}$
		CO ₂	$7.1 \cdot 10^{-11} e^{-72/\tau^{1/3} + 1997/\tau}$
	$CO_2(00^00) + X \rightarrow CO_2(10^00) + X - 1997 \text{ К}$	N ₂	$4.3 \cdot 10^{-11} e^{-72/\tau^{1/3} + 1997/\tau}$
		He	$1.1 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/\tau^{1/3} + 1997/\tau}$
		CO ₂	$7.1 \cdot 10^{-11} e^{-72/\tau^{1/3} + 1997/\tau}$
5	$CO_2(01^10) + X \rightarrow CO_2(00^00) + X + 960 \text{ К}$	CO ₂	$3.2 \cdot 10^{-10} e^{-72/\tau^{1/3}}$
		N ₂	$1.9 \cdot 10^{-11} e^{-72/\tau^{1/3}}$
		He	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/\tau^{1/3}}$
		CO ₂	$3.2 \cdot 10^{-10} e^{-72/\tau^{1/3}}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реак- ции k
5'	$\text{CO}_2(00^0) + X \rightarrow \text{CO}_2(01^1) + X - 960 \text{ K}$	N ₂ He	$\frac{72}{T^{1/3}+960/T} \cdot 1.9 \cdot 10^{-11} e^{-}$ $\frac{4.8 \cdot 10^{-11} e^{-}}{40.6/T^{1/3}+960/T}$
6	$\text{N}_2(1) + X \rightarrow \text{N}_2(0) + X + 3354 \text{ K}$	CO ₂ N ₂ He	$5.6 \cdot 10^{-12} e^{-93/T^{1/3}}$ $5.6 \cdot 10^{-12} e^{-93/T^{1/3}}$ $9.6 \cdot 10^{-13} e^{-56/T^{1/3}}$
6'	$\text{N}_2(0) + X \rightarrow \text{N}_2(1) + X - 3354 \text{ K}$	N ₂ He	$5.6 \cdot 10^{-12} e^{-93/T^{1/3}+3354/T}$ $9.6 \cdot 10^{-13} e^{-}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реак- ции k $56/T^{1/3}+3354/T$
7	$CO_2(11^10) + CO_2(00^00) \rightarrow CO_2(10^00) +$ $CO_2(01^10) + 31 K$	-	$2 \cdot 10^{-13} T^{1/2}$
7'	$CO_2(10^00) + CO_2(01^10) \rightarrow CO_2(11^10) +$ $CO_2(00^00) - 31 K$	-	$2 \cdot 10^{-13} T^{1/2} e^{31/T}$
8	$CO_2(02^00) + CO_2(00^00) \rightarrow CO_2(01^10) +$ $CO_2(01^10) - 69 K$	-	$7 \cdot 10^{-13} T^{1/2}$
8'	$CO_2(01^10) + CO_2(01^10) \rightarrow CO_2(02^00) +$ $CO_2(00^00) + 69 K$	-	$7 \cdot 10^{-13} T^{1/2} e^{-69/T}$
9	$CO_2(03^10) + CO_2(00^00) \rightarrow CO_2(02^00) +$ $CO_2(01^10) + 31 K$	-	$2 \cdot 10^{-13} T^{1/2}$
9'	$CO_2(02^00) + CO_2(01^10) \rightarrow CO_2(03^10) +$ $CO_2(00^00) - 31 K$	-	$2 \cdot 10^{-13} T^{1/2} e^{31/T}$
10	$CO_2(00^01) + N_2(0) \rightarrow CO_2(00^00) +$ $N_2(1) + 26 K$	-	$8.9 \cdot 10^{-12} T^{1/2}$
10'	$CO_2(00^00) + N_2(1) \rightarrow CO_2(00^01) +$	-	$8.9 \cdot 10^{-12} T^{1/2} e^{26/T}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реак- ции k
	$N_2(0) - 26 \text{ K}$		
11	$CO_2(03^10) + He \rightarrow CO_2(02^00) + He + 931 \text{ K}$	-	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/T^{1/3}}$
11'	$CO_2(02^00) + He \rightarrow CO_2(03^10) + He - 931 \text{ K}$	-	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/T^{1/3} + 931/T}$
12	$CO_2(02^00) + He \rightarrow CO_2(01^10) + He + 890 \text{ K}$	-	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/T^{1/3}}$
12'	$CO_2(01^10) + He \rightarrow CO_2(02^00) + He - 890 \text{ K}$	-	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/T^{1/3} - 890/T}$
13	$CO_2(00^01) + X \rightarrow CO_2(03^30) + X + 570 \text{ K}$	CO ₂ N ₂ He CO ₂	$7 \cdot 10^{-11} e^{-62.8/T^{1/3}}$ $1.5 \cdot 10^{-10} e^{-75.5/T^{1/3}}$ $6 \cdot 10^{-13} T^{1/2} e^{-59/T^{1/3}}$ $7 \cdot 10^{-11} e^{-62.8/T^{1/3} - 570/T}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реакции k
13'	$\text{CO}_2(03^30) + X \rightarrow \text{CO}_2(00^01) + X - 570$ K	N ₂	$1.5 \cdot 10^{-10} e^{-75.5/T^{1/3}}$
		He	$6 \cdot 10^{-13} T^{1/2} e^{-59/T^{1/3}}$
14	$\text{CO}_2(10^00) + X \rightarrow \text{CO}_2(02^20) + X + 127$ K	CO ₂	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2}$
		N ₂	$4 \cdot 10^{-16} T^{3/2}$
		He	$4 \cdot 10^{-17} T^{3/2}$
14'	$\text{CO}_2(02^20) + X \rightarrow \text{CO}_2(10^00) + X - 127$ K	CO ₂	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{-127/T}$
		N ₂	$4 \cdot 10^{-16} T^{3/2} e^{-127/T}$
		He	$4 \cdot 10^{-17} T^{3/2} e^{-127/T}$
15	$\text{CO}_2(02^20) + \text{CO}_2(00^00) \rightarrow \text{CO}_2(01^10) + \text{CO}_2(01^10) - 49$ K	-	$7 \cdot 10^{-13} T^{1/2}$
16	$\text{CO}_2(11^10) + X \rightarrow \text{CO}_2(03^10) + X + 147$	CO ₂	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2}$
		N ₂	$4 \cdot 10^{-16} T^{3/2}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реакции k
16'	$\text{CO}_2(03^{10}) + X \rightarrow \text{CO}_2(11^{10}) + X - 147$ K	He CO ₂ N ₂ He	$4 \cdot 10^{-17} T^{3/2}$ $9 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{-147/T}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2} e^{-147/T}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2} e^{-147/T}$
17	$\text{CO}_2(11^{10}) + X \rightarrow \text{CO}_2(03^{30}) + X + 118$ K	CO ₂ N ₂ He	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2}$
17'	$\text{CO}_2(03^{30}) + X \rightarrow \text{CO}_2(11^{10}) + X - 118$ K	CO ₂ N ₂ He	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{-118/T}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2} e^{-118/T}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2} e^{-118/T}$
18	$\text{CO}_2(03^{30}) + X \rightarrow \text{CO}_2(03^{10}) + X + 29$ K	CO ₂ N ₂	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реак- ции k
18'	$\text{CO}_2(03^10) + X \rightarrow \text{CO}_2(03^30) + X - 29 \text{ K}$	He CO ₂ N ₂ He	$4 \cdot 10^{-17} T^{3/2}$ $9 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{-29/T}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2} e^{-29/T}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2} e^{-29/T}$
19	$\text{CO}_2(10^00) + X \rightarrow \text{CO}_2(02^00) + X + 148 \text{ K}$	CO ₂ N ₂	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2}$
19'	$\text{CO}_2(02^00) + X \rightarrow \text{CO}_2(10^00) + X - 148 \text{ K}$	He CO ₂ N ₂ He	$4 \cdot 10^{-17} T^{3/2}$ $9 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{-148/T}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2} e^{-148/T}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2} e^{-148/T}$
20	$\text{CO}_2(10^00) + X \rightarrow \text{CO}_2(02^20) + X + 118 \text{ K}$	CO ₂ N ₂ He	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реак- ции k
20'	$CO_2(02^20) + X \rightarrow CO_2(10^00) + X - 118 \text{ K}$	CO ₂ N ₂ He	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{-118/T}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2} e^{-118/T}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2} e^{118/T}$
21	$CO_2(02^20) + X \rightarrow CO_2(02^00) + X + 29 \text{ K}$	CO ₂ N ₂ He	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2}$
21'	$CO_2(02^00) + X \rightarrow CO_2(02^20) + X - 29 \text{ K}$	CO ₂ N ₂ He	$9 \cdot 10^{-15} T^{3/2} e^{-29/T}$ $4 \cdot 10^{-16} T^{3/2} e^{-29/T}$ $4 \cdot 10^{-17} T^{3/2} e^{-29/T}$
22	$CO_2(03^30) + CO_2(00^00) \rightarrow CO_2(02^20) + CO_2(01^10) + 30 \text{ K}$	-	$2 \cdot 10^{-13} T^{1/2}$
22'	$CO_2(02^20) + CO_2(01^10) \rightarrow CO_2(03^30) + CO_2(00^00) - 30 \text{ K}$	-	$2 \cdot 10^{-13} T^{1/2} e^{-30/T}$
23	$CO_2(10^00) + CO_2(00^00) \rightarrow CO_2(01^10) + CO_2(01^10) + 77 \text{ K}$	-	$2 \cdot 10^{-13} T^{1/2}$
23'	$CO_2(02^20) + CO_2(01^10) \rightarrow CO_2(03^30) +$	-	$2 \cdot 10^{-13} T^{1/2} e^{-77/T}$



№ р-ии	Схема реакции: $A+B+C \rightarrow D+E+F$	X	Константа скорости реак- ции k
	$\text{CO}_2(00^0) - 77 \text{ K}$		
24	$\text{CO}_2(03^3) + \text{He} \rightarrow \text{CO}_2(02^2) + \text{He} + 931 \text{ K}$	-	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/T^{1/3}}$
24'	$\text{CO}_2(02^2) + \text{He} \rightarrow \text{CO}_2(03^3) + \text{He} - 931 \text{ K}$	-	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/T^{1/3} - 931/T}$
25	$\text{CO}_2(02^2) + \text{He} \rightarrow \text{CO}_2(01^1) + \text{He} + 890 \text{ K}$	-	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/T^{1/3}}$
25'	$\text{CO}_2(01^1) + \text{He} \rightarrow \text{CO}_2(02^2) + \text{He} - 890 \text{ K}$	-	$4.8 \cdot 10^{-11} e^{-40.6/T^{1/3} - 890/T}$

12.10.3 Результаты компьютерной имитации и их трактовка

Обсуждение результатов ВЭ начнем с фиксации факта полноты кинетического описания лазерной среды моделью (12.72) с реакциями № 1-12,. Этот факт устанавливается близостью динамических (кинетических) показателей для населенностей верхнего $\text{CO}_2(00^01)$ и нижнего $\text{CO}_2(10^00)$ колебательных лазерных уровней, определяемых в рамках базового и расширенного набора реакций.

Физической интерпретацией достаточной полноты базиса элементарных энергоквантовых процессов в построенной ИММ служит то обстоятельство, что все расширяющие кинетическое фазовое пространство состояния и переходы являются своего рода "дублерами" элементарных актов из базового набора, будучи весьма сходными по энергетическим и кинетическим показателям. Существенно также, что ни верхний, ни нижний лазерные уровни таких "дублеров" не имеют. Поэтому расширение базового набора реакций выражается в "расщеплении" некоторых из существующих в ИММ каналов квантового энергообмена – на два-три (в зависимости от симметрии комбинирующих колебательных уровней) примерно равноценных. Естественно, задействованные в расширяющих пространство кинетических возможностей лазерной среды переходах дополнительные промежуточные квантовые колебательные уровни частично "разгружают" соответствующие уровни в базовом наборе процессов. В частности, состояние $\text{CO}_2(02^20)$ берет на себя часть (примерно половину – в силу близости термодинамических и кинетических характеристик) возбуждения или населенности, изначально увязываемой с $\text{CO}_2(02^00)$ -уровнем, состояния $\text{CO}_2(03^20)$ и $\text{CO}_2(03^30)$ – втрое разгружают $\text{CO}_2(03^10)$. Сходство подсистемы расширяющих реакций с базовой обуславливает поведенческую устойчивость исходной модели к соответствующему номенклатурному наращиванию. Если населенность уровней-двойников рассматривать интегрально, оказывается, что их наличие с погрешностью в 30 % не влияет на кинетику промежуточных состояний; на населенности лазерных уровней наличие дублирующих состояний влияет еще меньше.

Здесь важно подчеркнуть, что среди дополняющих схему квантового энергообмена реакций отсутствуют существенно новые каналы аккумуляции и релаксации колебательного возбуждения: их наличие, конечно же, влечет за собой заключение о неполноте базового кинетического описания. Кроме того, нет осно-

ваний предполагать, что подобные существенные каналы энергообмена фактически действуют, а их отсутствие в ИММ – свидетельство ее неадекватности.

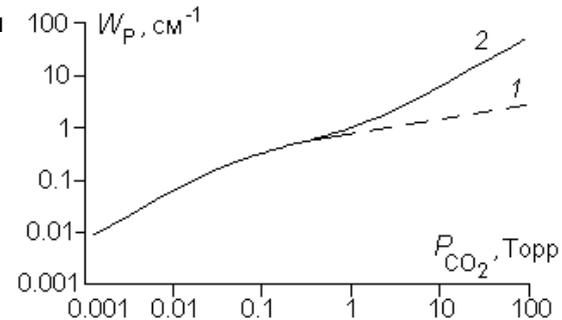
Убедившись в полноте ИММ, а также ее структурно-динамической устойчивости к параметрическим и стартовым возмущениям, предварительно рассмотрим элементы ИММ (рис. 3, левый фрагмент) порознь. При этом будем пытаться выявить главные зависимости в суб-моделях с тем, чтобы объяснить результат КМ и предложить приближенное аналитическое описание. Кроме того, знание свойств отдельных фрагментов ИММ облегчит впоследствии – при анализе численных результатов ВЭ – идентификацию внутренних связей между элементами модели.

Перенос излучения накачки принципиально взаимосвязан с концентрационным полем (в одномерном случае – профилем) возбужденного состояния $\text{CO}_2(00^01)$, однако мы пока откажемся от рассмотрения эффекта просветления лазерной среды и рассмотрим просто перенос ИК-излучения в пространстве, однородно заполненном углекислым газом, давление которого остается неизменным. Рассчитанная для выбранных условий зависимость эквивалентной ширины 4.3 мкм полосы поглощения CO_2 от давления показана на рис. 9.7. При $P_{\text{CO}_2} < 0.02$ Торр она линейна и объясняется слабостью подавляющего большинства колебательно-вращательных линий полосы в этих условиях. При $P_{\text{CO}_2} > 1$ Торр колебательно-вращательные линии становятся сильно реабсорбированными, и увеличение эквивалентной ширины полосы обеспечивается поглощением в далеких лоренцевских крыльях линий. Зависимость $W_p(P_{\text{CO}_2})$ здесь также линейна – до давления P_{CO_2} , превышающего атмосферное, при котором реабсорбция в крыльях линий становится существенной. В промежуточной области давлений CO_2 эквивалентная ширина полосы накачки пропорциональна $(\ln \beta P_{\text{CO}_2})^{1/2}$, где β – некоторая константа. Относительная ширина переходной области давлений, очевидно, определяется “заполненностью” спектрального интервала в пределах полосы $\text{CO}_2(00^00) \rightarrow \text{CO}_2(00^01)$ ядрами линий, т.е. отношением характерных расстояния между линиями и их полуширины.



Рисунок 12.55 – Зависимость эквивалентной ширины полосы CO_2 (применительно к условиям накачки лазера рис. 9.1, *a*, имеющего размер камеры $x = 1$ см и рабочую среду из чистого углекислого газа) от давления:

- 1 – в предположении доплеровской формы (контура) линий;
- 2 – в реалистичной ситуации комбинированного уширения (фойгтовского контура)

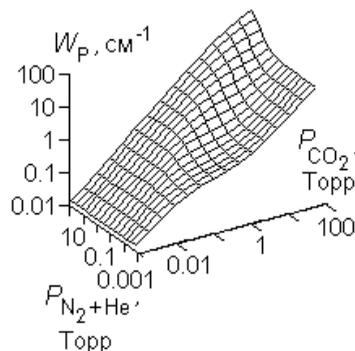


Рассмотренная ситуация является простейшей в том отношении, что уширение линий и поглощение излучения накачки осуществляются частицами одного сорта (газа). Случай общего положения проиллюстрирован на рис. 12.56: независимыми параметрами выступают уже два – P_{CO_2} и давление некоторого уширяющего газа. Преимуществом однокомпонентной модели (см. рис. 12.55) является возможность аппроксимировать эквивалентную ширину полосы поглощения как функцию P_{CO_2} сравнительно простой аналитической зависимостью. Выбрав для этих целей выражение

$$W_T = 7 \left(1 - 0.92 \frac{m_{CO_2}}{0.07 + m_{CO_2}} \right) m_{CO_2} \quad , \quad (12.75)$$

мы вносим незначительную – порядка $\pm 15\%$ – численную погрешность в конечный результат, но одновременно кардинально упрощаем суб-модель РП (см. рис. 12.51) и соответственно процедуру ВЭ. Единицами измерения входящих в уравнение (12.75) величин служат: Торр – для P_{CO_2} и $см^{-1}$ – для W .

Рисунок 12.56 – Зависимость эквивалентной ширины полосы CO_2 (применительно к условиям накачки лазера рис. 1, а с размером $x = 1$ см) от давления поглощающего и уширяющего газов при температуре 300 К



В качестве уширяющего газа принимается смесь 50% N_2 + 50% He

Показанные на рис. 12.56 данные детального численного расчета также можно аппроксимировать аналогичной (12.75) полумпирической зависимостью

$$W_P = 7 \left(1 - 0.92 \frac{P_{CO_2}}{0.07 \frac{P_{CO_2} + P_{N_2+He}}{P_{CO_2}} + P_{CO_2}} \cdot \frac{P_{CO_2}}{P_{CO_2} + P_{N_2+He}} \right) P_{CO_2} \quad ,$$

(12.76)

где P_{N_2+He} – давление уширяющего газа, Торр. Физическое содержание уравнения (12.76) заключается в том, что положение переходной области – от поглощения в центрах линий к поглощению в крыльях смещается в область более высоких давлений, а ее протяженность сокращается по мере роста давления уширяющего газа. Причина кроется “размазывании” линий – их одновременном уширении, ослаблении в центре и относительном сближении пропорционально P_{N_2+He} , когда возрастает роль столкновительного механизма контурообразования. Спектр поглощения при этом становится более однородным, приобретает свойства непрерывного. Расхождение вычисляемых в соответствии с (12.76) значений с базовыми численными результатами характеризуется множителем $2/3 \div 3/2$ и обусловлено, главным образом, неравносильностью линий в колебательно-вращательной полосе.

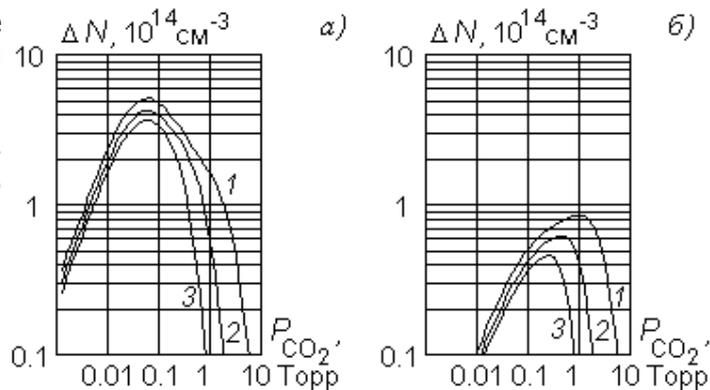
Используя результаты расчета $W(p_{CO_2})$ (рис. 12.55 или – в упрощенной постановке – выражение (12.75)) для определения скорости радиационной накачки при последующей имитации колебательной квантовой кинетики в чистом CO_2 согласно схеме рис. 12.51, можно установить, что зависимость величины инверсии ΔN от давления имеет экстремальный характер. Максимальная инверсия (см. рис. 12.57) достигается при давлении $\sim 0.1 \div 1$ Торр, отвечающем смене ведущего канала в кинетике верхнего лазерного уровня – радиационное пополнение уступает место процессам столкновительного расселения.

С ростом температуры положение максимума ΔN сдвигается в область меньших давлений и уровней (рис. 12.57, а): такая зависимость обусловлена достаточно сильной положительной зависимостью скоростей бинарных актов колебательного энергообмена и в близкой степени потери возбуждения при ударе частиц о стенку от температуры. Причем, если газофазный энергообмен отвечает только за снижение величины ΔN_{max} , то гетерофазное “тушение” способствует также сдвигу оптимальных условий – в направлении понижения давления (ср. рис. 12.57, а и б).

Рисунок 12.57 – Инверсия в CO_2 -лазере (рис. 3, а) при различной температуре рабочей среды (из углекислого газа):

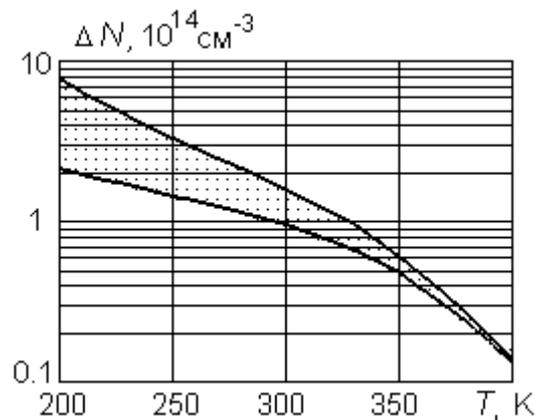
а – без учета, б – с учетом потери колебательного возбуждения при ударах частиц о стенку рабочей камеры;

1 – $T = 250$, 2 – $T = 300$,
3 – $T = 350$ К



Вид температурной зависимости ΔM_{\max} в граничных предположениях относительно характера колебательного энергообмена (исключительно объемный газофазный или комбинированный – с участием стенок) показан на рис. 12.58. В принципе, ее можно аппроксимировать по аналогии с (12.75)-(12.76) несложным алгебраическим соотношением, смысл которого такой. При низкой температуре передача колебательного возбуждения, результатом которой служит расселение $\text{CO}_2(00^0_1)$ -состояния, происходит в бинарных столкновениях со скоростью $\sim e^{-70/T^{1/3}}$; кроме того, столкновения со стенками способствуют дополнительной “разгрузке” верхнего лазерного уровня. С увеличением температуры возрастает роль обратных процессов и релаксация переходит с переносного режима – на диффузионный: здесь имеются (эффективно) три “промежуточных” последовательно расположенных уровня. Для них можно ввести (брутто) зависимость темпа передачи возбуждения от температуры. Предполагая работоспособность модели Ландау – Теллера, нетрудно получить результат: коэффициент при $T^{-1/3}$ в брутто-процессе последовательной релаксации равен сумме коэффициентов для отдельных стадий. То есть, при сравнительно высоких температурах темп депопуляции $\text{CO}_2(00^0_1)$ -уровня пропорционален $e^{-350/T^{1/3}}$.

Рисунок 12.58 – Зависимость величины инверсии ΔN_{\max} в смеси $\text{CO}_2 - \text{N}_2 - \text{He}$ оптимального состава от температуры. Границы коридора соответствуют отсутствию (верхняя) и наличию (нижняя) процессов потери колебательного возбуждения $\text{CO}_2(00^0_1)$ при ударе о стенку рабочей камеры



Существенно также, что температурный коэффициент для скорости гетерогенной квантовой релаксации, будучи пропорциональным $T^{1/2}$, в данном случае оказывается меньшим, чем для скорости газофазной $dn(e^{-70/T^{1/3}})/dT$, в то время как между их абсолютными значениями реализуется обратное соотношение (см. рис. 12.58). В итоге относительная роль процессов на стенках снижается с ростом температуры: применительно к установке рис. 12.49, а, если поддерживать лазерную смесь оптимального состава при комнатной температуре, на долю стенок приходится $\sim 50\%$ непроизводительных потерь ΔN . По результатам ВЭ предпочтительной температурой лазерной среды следует признать комнатную – как позволяющую одновременно обеспечить приемлемый уровень инверсии и простоту охлаждающей системы.

Важность реакций на стенках выражается (см. рис. 12.57-12.58), кроме того, в следующем: 1) предельный уровень инверсии ΔN_{\max} оказывается заметно ниже (для смеси оптимального состава примерно вдвое, для чистого CO_2 – в пять раз) и сдвинутым в область более высоких давлений; 2) просветлением лазерной среды можно пренебречь, чем оправдывается расщепление ИММ рис. 12.51 (левый фрагмент) на последовательно сочлененные, по существу, независимые блоки.

Анализ представленных на рис. 12.56-12.58 данных позволяет заключить, что даже при весьма далеком от оптимального значении $P_{\text{CO}_2} = 10$ Торр эквивалентная ширина полосы накачки не превышает 40 см^{-1} , а при составах смеси, позволяющих получить приемлемые значения инверсии ($\sim 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ и более) – около 2 см^{-1} . Это значение на полтора порядка меньше результата (75 см^{-1}) оценок, выполненных ранее и послуживших поводом для оптимизма в отношении рассматриваемой лазерной системы. Кроме того, как свидетельствуют представленные выше результаты, оптимальные параметры лазерной смеси – давление и состав – существенно отличаются от параметров составленной из тех же компонентов смеси, наилучшим образом поглощающим излучение накачки.

12.10.4 Результаты численной оптимизации параметров лазерной среды

Выявленный методом вероятностной оптимизации оптимальный состав рабочей среды лазера (рис. 12.49, а) в диапазоне температур $200 \div 400 \text{ K}$ следующий:

CO_2 – 0.3 Торр, N_2 – 0.02 Торр, He – 1.68 Торр.
(X-13)

Достижимая в оптимальной лазерной смеси при $T = 300$ К величина инверсии составляет $8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, т.е. примерно 1 % углекислого газа находится в состоянии $\text{CO}_2(00^01)$. Для сравнения: термодинамически равновесным условиям отвечает населенность $\text{CO}_2(00^01)$ -уровня почти на три порядка меньшая.

Принимая во внимание детальность ИММ и надежность ИБМ, из состава лазерной смеси оправдано исключить азот и применять смесь из 15 % углекислого газа и 85 % гелия при общем давлении 2 Торр. Желание предельно упростить конструкцию экспериментальной установки реализуемо путем исключения из состава рабочей среды также и He при одновременном увеличении P_{CO_2} до ~ 1 Торр. Инверсия в этом случае достигает $5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, что лишь на треть меньше предельного значения – в смеси оптимального состава.

Очевидна также невозможность получить приемлемые значения инверсии при нагреве лазерной среды до $T \geq 400$ К, что требует охлаждения стенок рабочей камеры внешним хладагентом. Отметим, что такое охлаждение рабочей смеси предусмотрено в конструкции лазера рис. 12.49, а.

Принципиально генерация лазерного излучения возможна (см. рис. 12.59), однако эффективность системы отказывается неприемлемо
низкой.

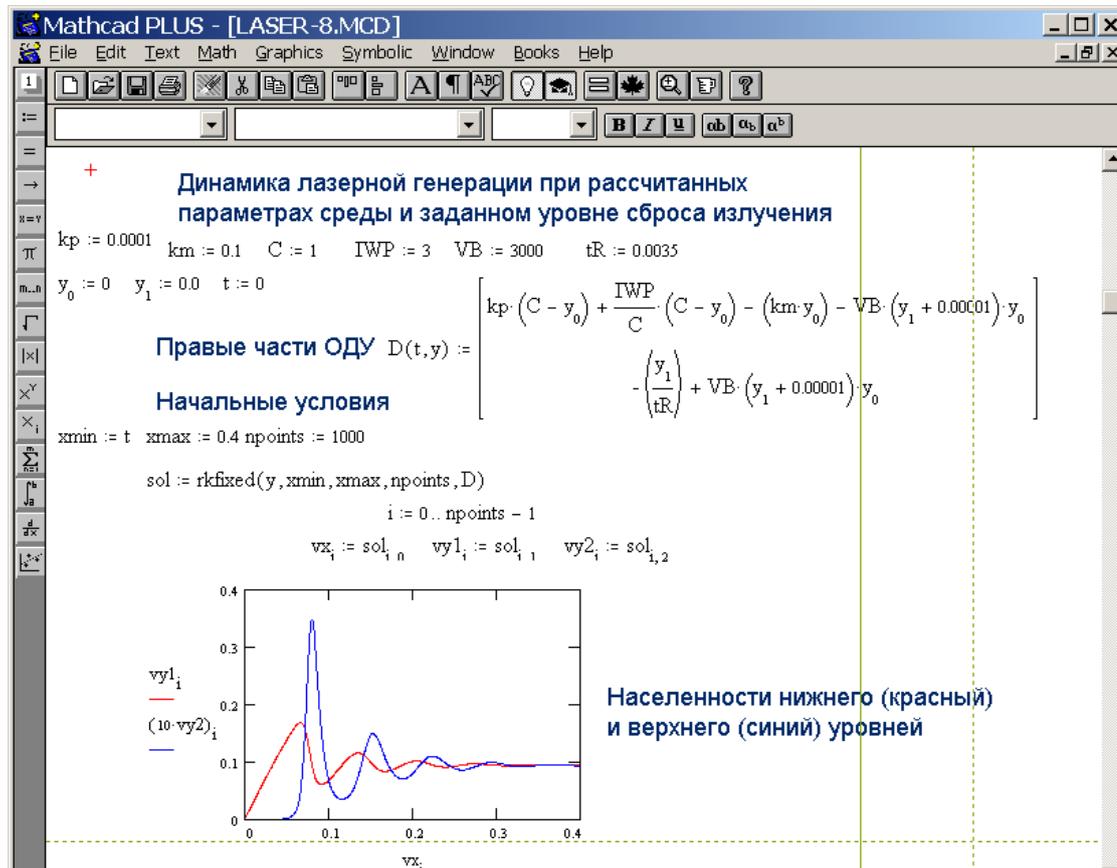


Рисунок 12.59 – Генерация лазерного излучения в рассмотренной выше конструкции при оптимальных параметрах лазерной среды

Выводы по разделу 12.10

Результаты численного анализа модели (1) с реакциями (X-1)-(X-12) применительно к установке "CO₂-лазер на солнечной накачке" (НО "ИВТАН" РАН) сводятся к следующему: 1) оптимальной рабочей смесью является 15 % CO₂ + 85 % He при давлении 2 торр и температуре 300 К; соответствующая величина инверсии – 0,8·10¹⁴ см⁻³ – принципиально достаточна для генерации; 2) использование в качестве рабочей смеси чистого CO₂ при давлении 1 ÷ 1,5 Торр и температуре 300 К позволяет достичь незначительно меньших (на 20 ÷ 40 %) величин инверсии при существенном упрощении конструкции установки; 3) при давлениях рабочей смеси больших 10 Торр достижимые значения инверсии – меньшие 10¹³ см⁻³ – оказываются недостаточными для осуществления генерации; 4) с увеличением температуры рабочей смеси наблюдается уменьшение достижимых значений инверсии и ее исчезновение при $T > 400$ К.

Список первоисточников к параграфу 12.9

1. Моисеев Н.Н. Математические задачи системного анализа. – М.: Наука, 1981.
2. Моисеев Н.Н. Математика ставит эксперимент. М.: Наука, 1979.
3. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2001.
4. Ладоса Е.Н. Автоматизированный синтез и анализ детальных компьютерных моделей реагирующих газов в задачах технической экологии / Дисс. канд. техн. наук. Ростов н/Д.: РГУ, 2006. 180 с.
5. Яценко О.В., Загароднюк В.Т. Компьютерное моделирование задач прикладной физико-химической динамики. – Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ, 2001.
6. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука, 1988.
7. Гордиец В.В., Осипов А.И., Шелепин Л.А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980.
8. Давлетшин Р.Ф., Яценко О.В. // Изв. вузов. Сев.-Кавк. регион. Ест. науки. 1995. №. 3. С. 48-56.
9. Бохан П.А. // Оптика и спектроскопия. 1969. Т. 26. № 5. С. 773-779.

10. Бохан П.А. // Оптика и спектроскопия. 1972. Т. 32. № 4. С. 826-827.
11. Колтун М.М. Селективные оптические поверхности преобразователей солнечной энергии. М., 1979.