#### НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

# ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

2018

июль-сентябрь

№ 3 (40)



**Выходит четыре раза в год** ISSN 1727-2769

#### Учредители

Академия наук высшей школы России Новосибирское отделение Академии наук высшей школы

#### Главный редактор

А.Г. Вострецов, д-р техн. наук, проф., засл. деятель науки РФ

Заместитель главного редактора

В.Н. Васюков, д-р техн. наук, проф.

#### Редакционный совет

М. Грайцар, PhD, проф. (Словакия) Д.В. Винников, д-р техн. наук, проф. (Эстония) А. Загоскин, PhD (Великобритания) Е.В. Ильичев, д-р физ.-мат. наук, проф. (Германия) М.Н. Клымаш, д-р техн. наук, проф. (Украина) К.Ю. Арутюнов, д-р физ.-мат. наук, проф. А.В. Бурдаков, д-р физ.-мат. наук, проф. И.С. Грузман, д-р техн. наук, проф. А.О. Давидов, д-р техн. наук В.П. Драгунов, д-р техн. наук, доц. С.Л. Елистратов, д-р техн. наук А.И. Легалов, д-р техн. наук, проф. Г.В. Майер, д-р физ.-мат. наук, проф., засл. деятель науки РФ В.К. Макуха, д-р техн. наук, проф. В.Ю. Нейман, д-р техн. наук, проф. В.Я. Рудяк, д-р физ.-мат. наук, проф. А.А. Спектор, д-р техн. наук, проф. С.П. Халютин, д-р техн. наук, проф. С.А. Харитонов, д-р техн. наук, проф. В.Д. Юркевич, д-р техн. наук, проф.

# Ответственный секретарь

Д.О. Соколова, канд. техн. наук

Журнал зарегистрирован в Министерстве РФ по делам печати, телерадновещания и средств массовых коммуникаций в 2002 г. (свидетельство ПИ № 77-11517 от 04.01.2002 г.) Адрес редакции: 630073, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20, НГТУ, корп. 4, ком. 415, телефон: (383) 346-15-37, факс: (383) 346-02-09. Email: danvshrf@corp.nstu.ru

© Новосибирское отделение АН ВШ, 2018 г.

### SCIENTIFIC JOURNAL

# PROCEEDINGS OF THE RUSSIAN HIGHER SCHOOL ACADEMY OF SCIENCES

2018

July - September

№ 3 (40)



Journal is published quarterly ISSN 1727-2769

### Journal was established by

Russian Higher Education Academy of Science Novosibirsk Branch of Higher Education Academy of Science

### **Chief Editor**

A.G. Vostretsov, D.Sc. (Eng.), Prof., Honoured Science Worker of Russian Federation

Deputy Chief Editor

V.N. Vasyukov, D.Sc. (Eng.), Prof.

#### Editorial Council

M. Grajcar, PhD, Prof. (Slovakia) D.V. Vinnikov, D.Sc. (Eng.), Prof. (Estonia) A.M. Zagoskin, PhD (United Kingdom) E.V. Ilyichev, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof. (Germany) M.M. Klymash, D.Sc. (Eng.), Prof. (Ukraine) K.Yu. Arutyunov, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof. A.V. Burdakov, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof. I.S. Gruzman, D.Sc. (Eng.), Prof. A.O. Davidov, D.Sc. (Eng.) V.P. Dragunov, D.Sc. (Eng.), Assoc. Prof. S.L. Elistratov, D.Sc. (Eng.) A.I. Legalov, D.Sc. (Eng.), Prof. G.V. Mayer, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof., Honoured Science Worker of Russian Federation V.K. Makukha, D.Sc. (Eng.), Prof. V.Yu. Neyman, D.Sc. (Eng.), Prof. V.Ya. Rudyak, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof. A.A. Spector, D.Sc. (Eng.), Prof. S.P. Khaljutin, D.Sc. (Eng.), Prof. S.A. Haritonov, D.Sc. (Eng.), Prof. V.D. Yurkevich, D.Sc. (Eng.), Prof.

*Executive Secretary* D.O. Sokolova, C.Sc.(Eng.)

Editor Address: Office 415, 20 bld. 4, K. Marx Prospect, Novosibirsk, 630073, Russian Federation. Tel: +7 (383) 346-15-37. Fax: +7 (383) 346-02-09. Email: danvshrf@corp.nstu.ru

© Novosibirsk Branch of Higher Education Academy of Science, 2018

2018

июль-сентябрь

## СОДЕРЖАНИЕ

## ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

# ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

| Вострецов А.Г., Бизяев А.А., Яковицкая Г.Е.   |
|---|
| Экспериментальные исследования по синхронной регистра-  |
| ции механических и электромагнитных параметров сигналов   |
| ЭМИ при нагружении образцов горных пород  |
| <i>Гришанов А.Н.</i><br>Эффективный метод построения приближенных решений<br>с применением многосеточных конечных элементов47 |
| Жарков М.А., Сидоров В.Е., Преображенский Е.Б.,   |

| Мезенцев Ю.А., Эстрайх И.В.  |
|--|
| Об одной задаче оптимального оперативного управления   |
| движением воздушных судов авиакомпании74   |
| Синяговский А.Ф., Чернышов М.О., Довгун В.П.,<br>Новиков В.В., Темербаев С.А.<br>Широкополосные гибридные фильтры<br>для трехфазных четырехпроводных сетей |

## PROCEEDINGS OF RUSSIAN HIGHER EDUCATION ACADEMY OF SCIENCES

 2018
 July – September
 № 3 (40)

## CONTENTS

| РНҮ      | PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES                                |  |  |  |
|----------|---|--|--|--|
| I        | <i>Kalytka V.A., Aliferov A.I., Mekhtiev A.D., Nikonova T.Yu.</i> |  |  |  |
| N        | Mathematical description of quantum tunneling polarization        |  |  |  |
| i        | n proton semiconductors and dielectrics                           |  |  |  |
| <b>J</b> | Rudyak V.Ya., Krasnolutsky S.L.                                   |  |  |  |
| F        | Potentials of composite nanoparticles interaction                 |  |  |  |
| V        | with each other and with molecules of the carrier medium          |  |  |  |
| TEC      | CHNICAL SCIENCES  |  |  |  |
| J        | <i>Vostretsov A.G., Bizyaev A.A., Yakovitskaya G.E.</i>           |  |  |  |
| E        | Experimental investigations on synchronous recording              |  |  |  |
| C        | of mechanical and electromagnetic parameters                      |  |  |  |
| C        | of EMP signals under loading of mineral rocks                     |  |  |  |
| C        | Grishanov A.N.  |  |  |  |
| P        | An efficient method of building approximate solutions             |  |  |  |
| U        | using multigrid finite elements                                   |  |  |  |
| 2        | <i>Charkov M.A., Sidorov V.E., Preobrazhensky E.B.,</i>           |  |  |  |
| 1        | <i>Balagurov M.V., Dubkova R.Yu., Kharitonov S.A.</i>             |  |  |  |
| I        | Direct frequency converter for the starter-generator              |  |  |  |
| S        | ystem of the main propulsion engine                               |  |  |  |

| <i>Mezentsev Yu.A., Estraykh I.V.</i><br>An optimal fleet assignment and flight scheduling<br>problem for an airline company | .74 |  |  |
|--|-----|--|--|
| Sinyagovskiy A.F., Chernyshov M.O., Dovgun V.P.,<br>Novikov V.V., Temerbaev S.A.   |     |  |  |
| Broadband hybrid filter for three-phase four-wire power systems  | .91 |  |  |

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

2018

июль – сентябрь ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ № 3 (40)

УДК 539.2+537.226

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ КВАНТОВОЙ ТУННЕЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ПРОТОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ДИЭЛЕКТРИКАХ

В.А. Калытка<sup>1</sup>, А.И. Алиферов<sup>2</sup>, А.Д. Мехтиев<sup>1</sup>, Т.Ю. Никонова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Карагандинский государственный технический университет <sup>2</sup> Новосибирский государственный технический университет

Методами квазиклассической статистической теории (с помощью квантового канонического распределения Гиббса), с учетом зонной структуры квазидискретного энергетического спектра, рассчитывается усредненная по энергиям прозрачность потенциального барьера для ионов водорода (протонов), двигающихся в невозмущенном одномерном периодическом потенциальном поле параболической формы, в протонных полупроводниках и диэлектриках (ППД), при омических контактах на границах кристалла. Теоретически установлено, что параметры зонной структуры спектра энергий (ширина энергетической зоны; толщина кристалла; максимальное количество уровней энергии в изолированной потенциальной яме и др.) существенно влияют на величину статистически усредненной вероятности квантовых переходов низкотемпературных (7 < 100 К) релаксаторов. С помощью равновесной матрицы плотности, на примере модели изолированной потенциальной ямы, обнаружено влияние энергии «нулевых» колебаний протонов (в водородной подрешетке) на квантовую проницаемость потенциального барьера, вблизи температуры абсолютного нуля. Для высокотемпературных релаксаторов (T > 100), характеризуемых квазинепрерывным энергетическим спектром, эти эффекты не проявляются. В туннельнодиффузионном приближении (без учета термически активируемых переходов протонов) построено нелинейное уравнение Фоккера-Планка, описывающее кинетику протоннорелаксационной поляризации в кристаллах с водородными связями (КВС), в области низких (50–100 К) и сверхнизких температур (1–10 К), в широком диапазоне напряженностей поляризующего поля (100 кВ/м - 1000 МВ/м). Предложены методы аналитического решения нелинейного кинетического уравнения квантовой туннельной поляризации. Перспективы практического применения результатов относятся к физике и технике низких температур, космическим технологиям и нанотехнологиям.

Ключевые слова: протонные полупроводники и диэлектрики (ППД); квазиклассическая статистическая теория (квантовое распределение Гиббса); статистически усредненная прозрачность потенциального барьера; зонная структура энергетического спектра протонов в ППД; квазидискретная структура энергетического спектра протонов; квантовая туннельная поляризация.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-7-25

#### Введение

Теоретические исследования механизмов диффузионного переноса ионов водорода (протонов) в кристаллах с водородными связями (КВС) в электрическом поле (протонная релаксация и проводимость) [1, 2] представляют в совокупности отдельное научно-исследовательское направление, сводящееся к разработке различных методов решения кинетических уравнений физико-математической модели: уравнение баланса числа частиц совместно с уравнением Пуассона [1–3]; уравнение Лиувилля совместно с уравнением Шрёдингера [4–6] и др. Аналитические решения этих уравнений при заданных начальных и граничных условиях (модели омических, блокирующих, частично блокирующих электродов и др.)

© 2018 В.А. Калытка, А.И. Алиферов, А.Д. Мехтиев, Т.Ю. Никонова

используются при численных расчетах теоретических спектров измеряемых в эксперименте величин – плотности термостимулированного тока деполяризации (ТСТД)  $J_{\text{TCDP}}(T)$  и тангенса угла диэлектрических потерь tg  $\delta(\omega; T)$  [1, 2].

Особый практический интерес (силовая электроника и электроэнергетика; техника высоких напряжений; космические технологии) представляют *нелинейные поляризационные процессы* в протонных полупроводниках и диэлектриках (ППД) [7, 8], проявляющиеся, по данным экспериментов [1, 2] в диапазонах: достаточно высоких температур (250–550 К) – высокотемпературная *объемнозарядовая поляризация* [3]; азотных температур (50–100 К) – низкотемпературная *туннельная миграционная поляризация* [4, 5].

По данным теоретических исследований, *нелинейности математической модели* протонно-релаксационной поляризации в ППД существенно усиливаются в области: *сверхвысоких* температур (550–1500 К) и сильных полей (10 МВ/м – 1000 МВ/м); *сверхнизких* температур (1–10 К) и слабых полей (100 кВ/м – 1 МВ/м) [7, 8].

Строгое математическое описание *квантовых кинетических явлений* в водородной подрешетке (протонная подсистема) при поляризации КВС (или ППД) представляет прикладной научный интерес для дальнейшего развития и уточнения методов квантовой теории твердого тела применительно к разнородным элементам (МДП-структуры, сегнетоэлектрики (КDP, DKDP), водородные топливные элементы) технологических схем, работающих при низких и сверхнизких температурах.

## 1. Сравнительный анализ теоретических методов описания нелинейной релаксационной поляризации в диэлектриках. Постановка задачи исследования

Влияние нелинейных свойств уравнения Фоккера–Планка [3, 9] на механизм формирования объемно-зарядовой поляризации в диэлектриках достаточно хорошо исследовано методами квазиклассической кинетической теории [3, 7, 9], позволяющей уже на основной частоте переменного электрического поля  $\omega$ (в бесконечном приближении теории возмущений) выявить эффект взаимодействия релаксационных мод [9]. Математически эти взаимодействия отражены в

безразмерном малом параметре  $\Xi = \frac{8n_0 \phi \Lambda_0 \gamma}{\pi^2} < 1$  [9], который выражается через

другие релаксационные параметры [9]:  $\phi = \frac{aq}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty E_0}$ ,  $\varepsilon_\infty$  – высокочастотная ди-

электрическая проницаемость кристалла,  $n_0$  – равновесная концентрация протонов,  $E_0$  – амплитуда напряженности гармонически изменяющегося во времени поля. Малый параметр теории возмущений  $\gamma = \frac{\varsigma_0 W^{(1)}}{W^{(0)}}$  вычисляется с помощью

параметра сравнения  $\varsigma_0 = \frac{qE_0a}{k_{\rm B}T} < 1$  при условии  $\frac{W^{(1)}}{W^{(0)}} < 1$ , где  $W^{(0)}(T)$ ,

 $W^{(1)}(T)$  – соответственно нулевая и линейная по полю компоненты скорости вероятности перехода протона через потенциальный барьер [9]; *a* – постоянная

решетки, q – заряд протона. Параметр  $\Lambda_0 = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi s}{2}\right)}{s^2\left(\frac{1}{\tau_s} + i\frac{\omega}{W^{(0)}}\right)}$  непосредственно

отражает эффект взаимодействия мод, различающихся по времени релаксации  $\tau_s$  [9]. В пределе, при бесконечно малых значениях параметра взаимодействия  $\Xi <<1$ , как показано в [9], поляризация диэлектрика (формула (19.1) в [9]) согласуется с результатами линейной кинетической теории, построенной авторами [2] в первом приближении по параметру  $\gamma$ .

Установленные в [7–9] научные положения нелинейной кинетической теории протонной релаксации, ее полная согласованность с линейной теорией [2] указывают на достаточно высокую степень точности физико-математической модели высокотемпературной объемно-зарядовой поляризации [3] в ППД. Результаты численного расчета по формулам модели [7, 9] и перспективы ее практического применения обозначены в работах [7, 8].

Аналитический аппарат квантовой теории низкотемпературной *туннельной миграционной поляризации* [2, 4, 6], с точки зрения квантово-механической строгости уравнений кинетической и статистической моделей из [4, 6], развит не на достаточно высоком уровне. Недостаток расчетной схемы в [2] состоит в громоздкости формул для плотности ТСТД [2, с. 140, 142], вычисленной при этом без учета *нелинейных эффектов* в области объемно-зарядовой поляризации в области высоких температур (T > 250 K). Низкотемпературные максимумы tg  $\delta(T)$  в KBC ( $T \approx 50-100$  K) удается рассчитать пока только численными методами на основании громоздкой конечно-разностной схемы уравнения Лиувилля [6], что существенно усложняет процедуру сравнения с экспериментом. В [4, 6] не учитывается влияние зонной структуры квазидискретного энергетического спектра релаксаторов (протонов) на свойства коэффициентов квантового кинетического уравнения.

**Целью** данной работы является разработка методологического аппарата для квантово-механического исследования, в квазиклассическом приближении, процессов низкотемпературной *туннельной миграционной* поляризации (включая область *сверхнизких* температур (1–10 K)), с учетом *зонной структуры* энергетического спектра релаксаторов (протонов), в протонных полупроводниках и диэлектриках (ППД). Статистическое распределение протонов в ППД будем описывать с помощью матрицы плотности (статистической матрицы) [10], вычисляемой на основании *квантового канонического распределения Гиббса* [10] и из решения квантового кинетического уравнения Лиувилля, совместно с уравнением Пуассона [6]. Энергетический спектр  $E_{(n,s)}^{(0)}$  и волновые функции  $\psi_{(n,s)}(\vec{r})$  протонов в невозмущенных стационарных состояниях с квантовыми числами (n, s) исследованы в [5].

# 2. Статистическое усреднение прозрачности потенциального барьера для протонов с зонной структурой энергетического спектра

Исследование квантовых статистических свойств протонной подсистемы (совокупность не взаимодействующих между собой протонов, локализованных на водородных связях [2]) в КВС, будем проводить в продолжении работ [4, 5] в квазиклассическом приближении, предполагая, что для невозмущенных уровней энергии  $E_n^{(0)}$  протона массы *m*, двигающегося (с собственной круговой частотой  $\omega_0 = 2 \pi v_0$ ) в поле изолированной потенциальной ямы параболической формы [5], выполняется условие  $E_0^{(0)} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \ll U_0$ , т. е.  $m \omega_0 \delta_0^2 / 4\hbar \gg 1$ , где  $v_0$  – линейная частота собственных колебаний протона;  $U_0$  – высота потенциального барьера (энергия активации протона на водородной связи);  $\delta_0$  – ширина потенциального барьера [5].

Из-за больших значений прозрачности потенциального барьера  $D(E_n^{(0)}) = e^{-2\eta_n}$ ,  $\eta_n = \frac{\pi \delta_0 \sqrt{m} (U_0 - E_n^{(0)})}{2\hbar \sqrt{2U_0}}$  [2, 5] для низкотемпературных релак-

саторов имеет место расщепление уровней энергии 
$$E_n^{(0)}$$
 в энергетические зоны  
 $E_{\upsilon(n,s)}^{(0)} = \hbar\omega_0 \left(\upsilon_{(n,s)} + \frac{1}{2}\right)$ , где  $\upsilon_{(n,s)} = n + \frac{1}{\pi}e^{-\eta_n}\cos\left(\frac{\pi s}{N_W + 1}\right)$ ,  $s \neq 0$ ,  $s \neq N_W + 1$ ;

 $N_W$  – полное количество потенциальных ям в модели одномерного периодического потенциального рельефа (поле водородных связей)  $\hat{W}^{(0)}_{C, [H^+]}(x)$  [5]. Ширина *n*-й энергетической зоны  $\Delta E_n^{(0)} = \frac{2\hbar\omega_0}{\pi} e^{-\eta_n} \cos\left(\frac{\pi}{N_W + 1}\right)$  и расстояния между

соседними уровнями номера s - 1, s, s + 1 (относящимися к данной зоне) для протонов, активированных в области низкотемпературного максимума тока термостимулированной деполяризации кристаллов халькантита (94 К) и флогопита (100 К) [2], указывает на сохранение свойств квазидискретности спектра энергий  $E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}$ .

В общем случае, принимая стационарные уровни энергии  $E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}$  вырожденными, с кратностью  $\tilde{\Gamma}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) > 1$  запишем невозмущенную равновесную статистическую матрицу для отдельного протона [10, 11]:

$$w_{pr,\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) =$$

$$= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_W} \exp\left(-\frac{E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}}{k_{\rm B}T}\right) \tilde{\Gamma}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right)\right]^{-1} \exp\left(-\frac{E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}}{k_{\rm B}T}\right).$$
 (1)

Вероятность обнаружения частицы (протона) в стационарном состоянии, с квантовым числом  $\upsilon_{(n,s)}$  равна [10, 11]

$$W_{pr,\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) = w_{pr,\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right)\tilde{\Gamma}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right).$$
(2.1)

Равновесная матрица плотности для протонного ансамбля (протонной подсистемы) принимает вид [5]

$$\rho_{pr,\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) = N_{pr,F} w_{pr,\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) \tilde{\Gamma}\left(E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right),$$
(2.2)

где  $N_{pr,F}$  – полное количество протонов, двигающихся с заданной энергией активации  $U_0$  [5].

Статистическое усреднение прозрачности потенциального барьера  

$$D\left(U_0; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right)$$
 с помощью выражения (2.1) в диапазоне энергий  
 $E_{\upsilon_{(n_{\min};s_{\min})}}^{(0)} \leq E_{\upsilon_{(n;s)}}^{(0)} \leq E_{\upsilon_{(n_{\min};s_{\min})}}^{(0)}$ , при условии  $E_{\upsilon_{(n_{\min};s_{\min})}}^{(0)} = E_{\upsilon_{(0;N_W)}}^{(0)} \to 0$ ,  
 $E_{\upsilon_{(n_{\max};s_{\max})}}^{(0)} = E_{\upsilon_{(n_{\max};1)}}^{(0)} < U_0$ , дает

$$\left\langle D\Big(U_0; E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\Big)\right\rangle = \frac{\sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_W} \exp\left[-\frac{E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}}{k_B T}\right] \tilde{\Gamma}\Big(E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\Big) D\Big(U_0; E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\Big)}{\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_W} \exp\left[-\frac{E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}}{k_B T}\right] \tilde{\Gamma}\Big(E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\Big)}.$$
 (3)

Классическую интерпретацию выражения (3) будем строить исходя из экспериментально установленных физических допущений [4, 5], накладываемых на гамильтониан протонной подсистемы в ППД [5]. Принимаем модель идеального газа протонов, двигающихся, преимущественно, под действием невозмущенного одномерного потенциального поля водородных связей –  $W_{C, [H^+]}^{(0)}(x)$  [4, 6]. Движение протона в объеме кристалла, считаем трехмерным. Тогда невозмущенная равновесная функция распределения Гиббса [10, с. 98] для отдельного протона в пространстве радиус-векторов  $\vec{r}$  и импульсов  $\vec{p}$ , гласит

$$W_{G,pr}^{(0)}\left(H_{pr}^{(0)}\right) = \left[Z_{pr}^{(0)}\right]^{-1} \exp\left(-\frac{H_{pr}^{(0)}}{k_B T}\right),\tag{4}$$

где  $H_{pr}^{(0)} = E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + W_{C, [H^+]}^{(0)}(x)$  – функция Гамильтона отдельного протона;

 $Z_{pr}^{(0)} = \int_{0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \tilde{\Gamma}(E) dE$  – статистический интеграл протонной подсистемы,

где  $\tilde{\Gamma}(E) = \frac{d\Gamma(E)}{dE} = \frac{4\pi p^2 dp dV}{h^3 dE}$  – число состояний протона в интервале энергий

E, E + dE (плотность состояний) [10, с. 39, 41, 43].

Выражение (4) есть, по сути, каноническое распределение Гиббса для протонной подсистемы, записанное в приближении слабого взаимодействия протонов с

ионной подсистемой (за исключением анионной подрешетки). Вероятность обнаружения протона в элементарном объеме фазового пространства  $4\pi p^2 dp dV$  определяется в общем случае с учетом полного числа квантовых состояний протона в этом объеме  $d\Gamma(E) = \frac{4\pi p^2 dp dV}{r^3}$  в виде [10, с. 97, 98]

$$h^{\nu}$$
  
 $dW_{pr}^{(0)}(E) = \operatorname{const} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) d\Gamma(E)$ . (5.1)

Согласно принципу неопределенности представим дифференциал полного числа квантовых состояний  $d\Gamma(E) = \frac{d\Gamma(E)}{dE} dE = \tilde{\Gamma}(E) dE$  [9, с. 38, 98], с учетом квантовой размытости  $\Delta E$  состояний с энергией E, и, вводя энтропию протона  $S(E) = k_B \ln (\Delta \Gamma(E)) \ge 0$  [10, с. 39], в пределе имеем  $d\Gamma(E) \rightarrow \frac{\Delta \Gamma}{\Delta E} dE =$  $= \frac{\frac{S(E)}{k_B}}{\Delta E} dE$  [10, с. 39]. Тогда, принимая плотность состояний протона  $\tilde{\Gamma}(E) = \frac{e^{\frac{S(E)}{k_B}}}{\Delta E}$  в предположении малости величины  $\Delta E$ , когда const  $e^{-\frac{E}{k_BT}} \times \frac{\frac{S(E)}{k_B}}{\Delta E} \rightarrow Ae^{-\frac{E}{k_BT}} e^{\frac{S(E)}{k_B}}$ , из (5.1) имеем

$$dW_{pr}^{(0)}(E) \approx A \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) e^{\frac{S(E)}{k_B}} dE .$$
(5.2)

Сравнивая (5.2) и равенство  $dW_{pr}^{(0)}(E) = w_{G,pr}^{(0)} \left(H_{pr}^{(0)}\right) e^{\frac{S(E)}{k_B}} dE$ , находим  $A = \int_{0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E}{k_BT}\right) e^{\frac{S(E)}{k_B}} dE$ .

Статистическое усреднение вычисленной ВКБ-методом прозрачности потенциального барьера  $D(U_0; E)$  в диапазоне изменения энергии  $0 \le E \le U_0$ , в предположении квазинепрерывности спектра *E* в силу (5.2) дает

$$\left\langle D(U_0;E)\right\rangle = \frac{\int\limits_0^{0} D(U_0;E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) e^{\frac{S(E)}{k_B}} dE}{\int\limits_0^{\infty} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) e^{\frac{S(E)}{k_B}} dE}.$$
(6)

Согласованность формул (3) и (6) достигается, в частности, при отсутствии вырождения, когда  $\tilde{\Gamma}\left(E^{(0)}_{\upsilon_{(n,s)}}\right) > 1$  и  $\Delta\Gamma(E) \to 1$ ,  $S(E) \to 0$ . В этом случае

$$\left\langle D\left(U_{0}; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) \right\rangle = \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_{W}} \exp\left(-\frac{E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}}{k_{B}T}\right) \right]^{-1} \times \\ \times \sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_{W}} \exp\left(-\frac{E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}}{k_{B}T}\right) D\left(U_{0}; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right),$$
(7.1)

$$\left\langle D(U_0; E) \right\rangle = \frac{1}{k_B T} \int_0^{U_0} D(U_0; E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE \,. \tag{7.2}$$

Расчет по формуле (7.2) для модели параболического потенциального барьера (выражение (2) из [12, с. 152]) приводит к известному результату (выражение (5) из [12, с. 153]).

Для модели квазидискретного спектра энергий  $E^{(0)}_{\upsilon_{n,s}}$  подстановка выражения

$$D\left(U_{0}; E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\right) = \exp\left(-\frac{\pi\delta_{0}\sqrt{m}\left(U_{0} - E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\right)}{\hbar\sqrt{2U_{0}}}\right) [12, c. 153] \text{ B} (7.1) \text{ дает}$$
$$\left\langle D\left(U_{0}; E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\right)\right\rangle = e^{-\frac{\pi\delta_{0}\sqrt{mU_{0}}}{\hbar\sqrt{2}}} \frac{\sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_{W}} \exp\left(-\left(\frac{1}{k_{B}T} - \frac{\pi\delta_{0}\sqrt{m}}{\hbar\sqrt{2U_{0}}}\right)E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_{W}} \exp\left(-\frac{E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}}{k_{B}T}\right)}.$$
(8)

Комбинируя спектральное выражение [5]

$$E_{\upsilon(n,s)}^{(0)} = \hbar\omega_0 \left(\upsilon_{(n,s)} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega_0 \left[n + \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}e^{-\eta_n}\cos\left(\frac{\pi}{N_W + 1}\right)\right]$$
(9)

с формулой (8) и обозначая  $\Lambda = \frac{\pi \delta_0 \sqrt{mU_0}}{\hbar \sqrt{2}}$ ,  $\alpha = \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \left( 1 - \frac{\Lambda k_B T}{U_0} \right)$ ,  $\beta = \frac{\hbar \omega_0}{k_B T}$ , полу-

чим

$$\left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\right) \right\rangle = e^{-\Lambda} \frac{e^{-\frac{\alpha}{2}} \left[ \sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_W} e^{-\alpha n} \exp\left(-\frac{\alpha}{\pi} e^{-\eta_n} \cos\left(\frac{\pi s}{N_W + 1}\right)\right) \right]}{e^{-\frac{\beta}{2}} \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_W} e^{-\beta n} \exp\left(-\frac{\beta}{\pi} e^{-\eta_n} \cos\left(\frac{\pi s}{N_W + 1}\right)\right) \right]}.$$
 (10)

Далее, обозначая  $\zeta = e^{-\frac{\Lambda\hbar\omega_0}{2U_0}}$ ,  $\vartheta = e^{-\frac{\Lambda}{2}\left(1+\frac{\hbar\omega_0}{2U_0}\right)}$ , перепишем (10) в более удобном для дальнейших расчетов виде

$$\left\langle D\left(U_{0}; E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\right) \right\rangle = e^{-\Lambda} \frac{e^{-\frac{\alpha}{2} \left[ \sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_{W}} e^{-\alpha n} \exp\left(-\frac{\alpha \vartheta}{\pi} \varsigma^{n} \cos\left(\frac{\pi s}{N_{W}+1}\right)\right)\right]}{e^{-\frac{\beta}{2} \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_{W}} e^{-\beta n} \exp\left(-\frac{\beta \vartheta}{\pi} \varsigma^{n} \cos\left(\frac{\pi s}{N_{W}+1}\right)\right)\right]}.$$
 (11)

Поскольку в ВКБ-приближении, когда  $\eta_n >> 1$ , численная оценка коэффициентов  $\alpha e^{-\eta_n} = \alpha \vartheta \cdot \varsigma^n$ ,  $\beta e^{-\eta_n} = \beta \vartheta \cdot \varsigma^n$  практически во всем диапазоне экспериментальных значений энергии активации  $U_0 \approx 0.05 \div 1$  эВ и температуры  $T \approx 70-250$  К [2] дает  $\alpha \vartheta \cdot \varsigma^n \ll 1$ ,  $\beta \vartheta \cdot \varsigma^n \ll 1$ , преобразуем (11) к приближенному виду

$$\left\langle D\left(U_{0}; E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\right) \right\rangle \approx e^{-\Lambda} \frac{e^{-\frac{\alpha}{2} \left[\sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_{W}} e^{-\alpha n} \left(1 - \frac{\alpha \vartheta}{\pi} \varsigma^{n} \cos\left(\frac{\pi s}{N_{W} + 1}\right)\right)\right]}{e^{-\frac{\beta}{2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_{W}} e^{-\beta n} \left(1 - \frac{\beta \vartheta}{\pi} \varsigma^{n} \cos\left(\frac{\pi s}{N_{W} + 1}\right)\right)\right]} \right]}.$$
 (12)

Замечая, что  $\sum_{s=1}^{N_W} \cos\left(\frac{\pi s}{N_W + 1}\right) = 0$ , из (12) имеем

$$\left\langle D\left(U_{0}; E_{\upsilon(n,s)}^{(0)}\right) \right\rangle \approx \exp(-\Lambda) \frac{\exp\left(-\frac{\alpha}{2}\right) \sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_{W}} \exp(-\alpha n)}{\exp\left(-\frac{\beta}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_{W}} \exp(-\beta n)} = \exp(-\Lambda) \frac{\exp\left(-\frac{\alpha}{2}\right) (1 - \exp(-\beta)) (1 - \exp(-\alpha n_{\max}))}{\exp\left(-\frac{\beta}{2}\right) (1 - \exp(-\alpha))}.$$
(13)

Вводя критическую температуру  $T_{cr} = \frac{\hbar \sqrt{2U_0}}{k_B \pi \delta_0 \sqrt{m}}$  [12], согласно

 $\alpha = \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \left( 1 - \frac{T}{T_{cr}} \right) = \beta \left( 1 - \frac{T}{T_{cr}} \right), \ \beta = \frac{\hbar\omega_0}{k_B T}$ запишем (13) в функции температуры (  $\hbar\omega_0$  )( , (  $\hbar\omega_0$  ))

$$\left\langle D\left(U_{0}; E_{\upsilon_{n,s}}^{(0)}\right) \right\rangle \approx \exp(1 - \Lambda \frac{\exp\left(\frac{h\omega_{0}}{2k_{B}T_{cr}}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{h\omega_{0}}{k_{B}T}\right)\right)}{1 - \exp\left(-\frac{h\omega_{0}}{k_{B}T}\left(1 - \frac{T}{T_{cr}}\right)\right)} \times \left(1 - \exp\left(-\frac{h\omega_{0}}{k_{B}T}\left(1 - \frac{T}{T_{cr}}\right)n_{\max}\right)\right).$$
(14)

В пределе при  $T = T_{cr}$ , когда  $\alpha = 0$ ,  $\beta = \frac{\hbar \omega_0}{k_B T_{cr}}$ , из (14) имеем

$$\left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon_{n,s}}^{(0)}\right) \right\rangle \approx n_{\max} \exp(-\Lambda) \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{2k_B T_{cr}}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_{cr}}\right)\right).$$
 (14.1)

Полагая в (14.1)  $T \to 0$ ,  $n_{\max} \neq \infty$ , получим выражение

$$\left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon_{n,s}}^{(0)}\right) \right\rangle \approx \exp(-\Lambda) \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{2k_B T_{cr}}\right),$$
 (14.2)

позволяющее учесть влияние энергии нулевых колебаний на вероятность туннельных переходов протонов вблизи температуры абсолютного нуля.

Очевидно, что формулы (14.1), (14.2) являются квантово-механически более строгими (квазидискретный спектр энергий) в сравнении с результатами полуклассической модели (квазинепрерывный спектр энергий) [12]: 1) принимая  $T \ll T_{cr}$ , когда  $\frac{\Lambda}{X} \ll 1$ ,  $X = \frac{U_0}{k_B T}$ , имеем  $\langle D(U_0; E) \rangle \approx \frac{\exp(-\Lambda)}{1 - \frac{\Lambda}{X}}$ ; 2)  $T \to 0$ ,  $\frac{\Lambda}{X} \to 0$ ,  $\langle D(U_0; E) \rangle \to \exp(-\Lambda)$ .

В случае  $0 < \eta_n < 1$ , когда безразмерные параметры  $\alpha \vartheta \cdot \varsigma^n$ ,  $\beta \vartheta \cdot \varsigma^n$  не являются бесконечно малыми величинами, усреднение прозрачности по уровням энергии (9) будет проводиться численно по формуле (10), отражающей влияние зонной структуры энергетического спектра протонов на статистические свойства протонного ансамбля (выражения (1), (2.1), (2.2)).

#### 3. Влияние квантовых эффектов на нелинейные кинетические явления при поляризации диэлектриков

Наложение на диэлектрик поляризующего поля напряженности  $E_{\text{pol}}(t) = E_0 \exp(i\omega t)$  при условии  $\vec{E}_{\text{pol}} \| \vec{C}$  приводит к диффузионному движению релаксаторов (протонов) по водородным связям в направлении поля, и с течением времени порядка времени релаксации ( $\tau_{rp} \approx 10^{-7} \div 10^{-3}$  с) в пространстве между электродами формируется пространственно неоднородное распределение объемного заряда  $\rho(x; t)$ , вычисляемое в области *слабых полей* (100–1000 кВ/м) при температурах T = 50 - 550 К из решения *линеаризованного* уравнения Фоккера–Планка совместно с уравнением Пуассона [2].

В области сильных полей (10 МВ/м – 1000 МВ/м) и аномально высоких высокотемпературных нелинейностей (550–1500 К) [7, 8] для детального исследования поляризационных кинетических явлений в ППД достаточно модели квазинепрерывного спектра энергий протонов [3, 12], двигающихся по классическому диффузионному механизму, отраженному в обобщенном кинетическом уравнении Фоккера–Планка [7]. Аналитические решения этого уравнения строятся методом последовательных приближений [7].

В области слабых полей и аномально высоких низкотемпературных квантовых нелинейностей (1–10 К) [7, 8] для модели квазидискретного спектра энергий (9) будем использовать, как и в [7], разложения квазиклассических кинетических коэффициентов  $W_{i,j}^{(\pm)}(T)$  в бесконечные степенные ряды по степеням малого параметра  $\zeta_{i,j} = \frac{\left|\Delta U_{i,j}\right|}{k_B T} < 1$  [3, 7], но в приближении только «чистых» квантовых переходов

$$W_{i,j}^{(\pm)}(T) \to W_{\operatorname{tunn};(i,j)}^{(\pm)}(T) = \frac{v_0}{2} \left\langle D\left(U_0 \pm \left| \Delta U_{i,j} \right|; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) \right\rangle,\tag{15}$$

где  $\left| \Delta U_{i;j} \right| \approx \frac{qE_ia}{2}$  [3, 7]. Тогда пишем

$$W_{\text{tunn};(i,j)}^{(\pm)}\left(\left|\Delta U_{i,j}(x;t)\right|;T\right) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(\mp 1)^l}{l!} \cdot \zeta_{i,j}^l(x;t) W_{\text{tunn}}^{(l)}(T) .$$
(16)

Прозрачность слабо возмущенного параболического потенциального барьера (выражение (8) из [12, с.153]), усредненная по невозмущенным уровням энергии (9)

$$\begin{split} \left\langle D_{i,j}^{(\pm)} \left( U_0 \pm \left| \Delta U_{i,j} \right|; E_{\upsilon_{n,s}}^{(0)} \right) \right\rangle &= \exp \left( -\frac{\pi \delta_0 \sqrt{m} \left( U_0 \pm \left| \Delta U_{i,j} \right| \right)}{\hbar \sqrt{2U_0}} \right) \times \right. \\ & \times \frac{\sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_W} \exp \left( -\left( \frac{1}{k_B T} - \frac{\pi \delta_0 \sqrt{m}}{\hbar \sqrt{2U_0}} \right) E_{\upsilon(n,s)}^{(0)} \right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{N_W} \exp \left( -\frac{E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}}{k_B T} \right)}, \end{split}$$

принимает вид

$$\left\langle D_{i,j}^{(\pm)} \left( U_0 \pm \left| \Delta U_{i,j} \right|; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)} \right) \right\rangle = \left\langle D \left( U_0; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)} \right) \right\rangle \exp\left( \mp \Lambda \frac{\left| \Delta U_{i,j} \right|}{U_0} \right).$$
(17)

В (17) множитель  $\left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon_{[n,s]}}^{(0)}\right) \right\rangle$  в общем случае вычисляется из (10), а в частном случае при  $\eta_n >> 1 - из (14).$ 

Сопоставляя выражения (16) и (15), с учетом (17), получаем результат  $W_{\text{tunn}}^{(l)}(T) = \left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) \right\rangle \left(\frac{\Lambda}{X}\right)^l$ , согласующийся с [7, 12].

По аналогии с [7] подстановка (16) в систему уравнений баланса [7] дает

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = W_{i-1,i}^{(-)} n_{i-1} + W_{i+1,i}^{(+)} n_{i+1} - \left(W_{i,i-1}^{(+)} + W_{i,i+1}^{(-)}\right) n_i , \qquad (18)$$

где  $n_{i-1}$ ,  $n_i$ ,  $n_{i+1}$  – концентрация релаксаторов (протонов) в состояниях номера (i-1), (i), (i+1), после некоторых преобразований дает

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \frac{W_{\text{tunn};(i,i+1)}^{(-)} + W_{\text{tunn};(i,i-1)}^{(+)}}{2} n_i \right) - a \frac{\partial}{\partial x} \left( \left( W_{\text{tunn};(i,i+1)}^{(-)} + W_{\text{tunn};(i,i-1)}^{(+)} \right) n_i \right).$$
(19)

Опуская в (19) индекс «*i*», строим *нелинейное* по полю E(x; t) обобщенное уравнение Фоккера–Планка, записанное в приближении «чистых» квантовых переходов

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( D_{\text{tunn; diff}}(x; t) n(x; t) \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left( v_{\text{tunn; mob}}(x; t) n(x; t) \right).$$
(20)

## В (20) используются функции

$$D_{\text{tunn; diff}}(x; t) = a^2 \frac{W_{\text{tunn}}^{(-)} + W_{\text{tunn}}^{(+)}}{2}, \quad v_{\text{tunn; mob}}(x; t) = a \left( W_{\text{tunn}}^{(-)} - W_{\text{tunn}}^{(+)} \right), \quad (21.1)$$

$$W_{\text{tunn}}^{(\pm)}(x;t) = \frac{v_0}{2} \times \left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) \right\rangle \exp\left(\mp \Lambda \frac{\left|\Delta U(x;t)\right|}{U_0}\right), \tag{21.2}$$

$$\left|\Delta U(x;t)\right| = \frac{qE(x;t)a}{2}.$$
(21.3)

Из (21.1)-(21.3) имеем

$$D_{\text{tunn; diff}}(x;t) = \frac{v_0 a^2}{2} \left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon_{n,s}}^{(0)}\right) \right\rangle \text{ch}\left(\frac{q a \Lambda E(x;t)}{2U_0}\right), \quad (22.1)$$

$$v_{\text{tunn; mob}}(x; t) = v_0 a \left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon_{n,s}}^{(0)}\right) \right\rangle \text{sh}\left(\frac{q a \Lambda E(x; t)}{2U_0}\right).$$
(22.2)

Решение уравнения (21.1)–(21.3) будем строить совместно с уравнением Пуассона [3]

$$\frac{\partial E(x;t)}{\partial x} = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} [n(x;t) - n_0].$$
(23)

Граничное условие для уравнения (23) согласно [2, 3] имеет вид

$$\int_{0}^{d} E(x;t)dx = V_0 \exp(i\omega t).$$
(24)

Здесь  $V_0 = E_0 d$ ,  $\omega$  – соответственно амплитуда и круговая частота ЭДС; d – толщина диэлектрика [2, 6].

Уравнение (20) согласно расчетной схеме, предложенной в [7], преобразуется к виду

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Big( D_{\text{tunn; diff}}(x; t) \rho(x; t) \Big) - \frac{\partial}{\partial x} \Big( v_{\text{tunn; mob}}(x; t) \rho(x; t) \Big) + \\ + n_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Big( D_{\text{tunn; diff}}(x; t) \Big) - n_0 \frac{\partial}{\partial x} \Big( v_{\text{tunn; mob}}(x; t) \Big).$$
(25)

Здесь  $\rho(x; t) = q[n(x; t) - n_0].$ 

Исходя из аналогии (25) с уравнением неразрывности [7], запишем плотность туннельно-диффузионного тока протонов

$$\vec{j}_{x}(x;t) = q \left\{ v_{\text{tunn;mob}}(x;t) \rho(x;t) - \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{\text{tunn;diff}}(x;t) \rho(x;t) \right) \right\} + q n_{0} \left\{ v_{\text{tunn;mob}}(x;t) - \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{\text{tunn;diff}}(x;t) \right) \right\}.$$
(26)

Для модели электродов смешанного типа [2, 3, 7], принимая на границах кристалла  $\vec{j}_x(0; t) = 0$ ,  $\vec{j}_x(d; t) = 0$ , согласно (26) пишем

$$\left[ v_{\text{tunn; mob}}(x; t) \rho(x; t) - \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{\text{tunn; diff}}(x; t) \rho(x; t) \right) \right]_{x=(0; d)} = n_0 \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{\text{tunn; diff}}(x; t) \right) - v_{\text{tunn; mob}}(x; t) \right]_{x=(0; d)}.$$
(27)

В начальный момент времени [2, 3, 11]

$$\rho(x; 0) = 0 . (28)$$

Решение системы уравнений (23)-(28) может строиться по двум направлениям.

В первом случае составляется и рассчитывается численными методами конечно-разностная схема данной системы уравнений, что является предметом отдельного исследования.

Во втором случае по аналогии с [7] схема аналитического решения уравнения (25) будет строиться методом последовательных приближений, путем разложения в бесконечные степенные ряды по степеням безразмерного параметра  $\zeta_{\text{tunn}} = \frac{q a E_0 \Lambda}{2 U_0} < 1$  в виде

$$\rho(x; t) = \sum_{s=0}^{\infty} \rho^{(s)}(x; t) \zeta_{\text{tunn}}^{s} .$$
(29)

Данная расчетная схема более детально в различных приближениях по *s*, на примере полуклассической модели [3, 12] с параметром  $\zeta_{\text{therm}} = \frac{q a E_0}{2k_B T} < 1$  исследована в [7].

Для удобства применения выражения (29) представим функции (21.1) виде рядов

$$D_{\text{tunn; diff}}(x; t) = D_{\text{tunn; diff}}^{(0)} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l)!} \left(\frac{qa\Lambda}{2U_0}\right)^{2l} E^{2l}(x; t) , \qquad (30.1)$$

$$v_{\text{tunn; mob}}(x; t) = v_{\text{tunn; mob}}^{(1)}(x; t) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l+1)!} \left(\frac{qa\Lambda}{2U_0}\right)^{2l} E^{2l}(x; t),$$
 (30.2)

В (30.1), (30.2)  $D_{\text{tunn; diff}}^{(0)} = \frac{v_0 a^2}{2} \left\langle D \left( U_0; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)} \right) \right\rangle$  – коэффициент туннельной

диффузии частиц, вычисленный в приближении l = 0;  $v_{tunn; mob}^{(1)}(x; t) =$ =  $\mu_{tunn; mob}^{(1)} E(x; t)$  – скорость направленного туннельно-диффузионного переноса

частиц, вычисленная в приближении 
$$l = 1$$
, где  $\mu_{\text{tunn; mob}}^{(1)} = \frac{v_0 a^2 q \Lambda}{2U_0} \left\langle D\left(U_0; E_{\upsilon_{(n,s)}}^{(0)}\right) \right\rangle$ 

Согласно результатам численных квантово-механических расчетов спектров диэлектрических потерь [6, с. 35] аналитические решения системы уравнений (23)–(29) особенно актуальны при сверхнизких температурах (1–10 К), для исследования нелинейных поляризационных явлений в нанометровых слоях (1–10 нм) протонных полупроводников и диэлектриков.

Выражения (25), (26)–(29) совместно с (22.1), (22.2) составляют теоретическую основу для разработки строгой физико-математической модели квантовых релаксационных процессов, протекающих в водородной подрешетке сегнетоэлектрических кристаллов с водородными связями (KDP, DKDP), при формировании спонтанной поляризации вблизи температуры Т<sub>С</sub> фазового перехода второго рода. Хотя в сегнетоэлектриках типа  $Me(H; D)_2 RO_4$ , где  $Me = \{K^+; Rb^+; Cs^+\}$ ,  $R = \{P^{+5}; As^{+5}\}$  [13] смещения протонов, связанных с фосфатной (или арсенидной) группой, основной вклад в поляризацию насыщения  $\vec{P}_S$  не вносят, ряд важных эффектов сегнетоэлектрического состояния, в частности в KDP (изотопический эффект ( $T_C(H) = 122$  К,  $T_C(D) = 213$  К); линейный фотовольтаический эффект (300 К; 1,06 мкм)), объясняется именно квантовыми переходами ионов  $H^+$  (протонов), двигающихся с энергией активации  $E_a = (0, 1 \pm 0, 01)$  эВ [13]. Однако, в выполненных в последнее время квантово-химических расчетах [14], как правило, туннельные переходы протонов в КDP не учитывают, а если и учитывают, то только частично, например, методом молекулярного стехиометрического кластера (СК) [15] для «смешанного базиса» на основе полуэмпирических расчетных схем (в приближении MNDO/PM3) [16].

Проявление у сегнетоэлектриков класса КВС (КDP, DKDP, триглицинсульфат [17], сегнетова соль [18] и др.) прямоугольной петли гистерезиса позволяет использовать эти материалы в качестве тонкопленочных диэлектриков для *нелинейных электрически управляемых* конденсаторов в микросхемах энергонезависимых быстродействующих запоминающих устройств (DRAM, FeRAM) [19]. Ячейки памяти типа FeRAM характеризуются аномально высоким временем релаксации остаточной поляризации (до 10 лет), термической устойчивостью и механической прочностью [19, 20].

#### Выводы

1. Методами квазиклассической статистической теории [10] с помощью квантового канонического распределения Гиббса (1), с учетом зонной структуры квазидискретного энергетического спектра (9) низкотемпературных релаксаторов (протонов) рассчитана *статистически усредненная* (по энергиям) прозрачность потенциального барьера (10) для протонов, двигающихся в одномерном пространственно-периодическом потенциальном рельефе параболической формы [5] в ППД. Контакты на границах кристалла приняты омическими [5].

2. Установлено, что при значениях параметра  $0 < \eta_n \le 1$  параметры зонной структуры энергетического спектра (ширина n-й энергетической зоны  $\Delta E_n^{(0)}$ , полное количество потенциальных ям в модели  $N_W$  (сравнимо с толщиной кристалла d) и др.) существенно влияют на величину статистически усредненной проницаемости потенциального барьера (10) уже в ВКБ-приближении (3). В случае  $\eta_n >> 1$ , когда  $\Delta E_n^{(0)} \rightarrow 0$ , основной вклад в функцию (10) вносит закон распределения протонов по уровням энергии квазидискретного спектра  $E_n^{(0)}$  изолированной потенциальной ямы. Учет квазидискретного спектра  $E_n^{(0)}$  изолированной потенциальное влияние остаточной энергии квазидискретного спектра унергий  $E_n^{(0)}$  протонов, даже в полуклассическом случае ( $\eta_n >> 1$ ), позволяет выявить влияние остаточной энергии «нулевых» колебаний протонов (в водородной подрешетке) на статистически усредненную вероятность квантовых туннельных переходов (13), (14) вблизи температуры абсолютного нуля (14.2). В модели квазинепрерывного спектра энергий E [3, 11] этот эффект не наблюдается.

3. На основании системы уравнений баланса числа частиц (18) в туннельнодиффузионном приближении (в кинетических коэффициентах (15), (17) учитываются только туннельные переходы частиц (протонов) через потенциальный барьер) построено *нелинейное по электрическому полю* уравнение Фоккера–Планка (20), описывающее протонно-релаксационную поляризацию в КВС в диапазоне низких (50–100 K) и сверхнизких (1–10 K) температур. Амплитуда напряженности переменного поляризующего поля изменяется в диапазоне от 100 до 1000 кВ/м, а частота поля – от 1 кГц до 10 МГц. По аналогии с [7] предложена схема аналитического решения нелинейного кинетического уравнения (25) совместно с уравнением Пуассона (23), методом последовательных приближений (30). Электроды приняты частично блокирующими (27). Более детально данная расчетная схема исследована в [7].

4. Предложена и научно обоснована методология квантово-механического исследования протонной релаксации при поляризации протонных полупроводников и диэлектриков (ППД) в области низких и сверхнизких температур. В предложенных расчетных схемах квантово-механические характеристики стационарных состояний протонной подсистемы (прозрачность потенциального барьера; невозмущенная статистическая матрица; невозмущенные волновые функции и др.) записываются в квазиклассическом приближении, а нестационарные воздействия – в виде медленно изменяющихся во времени возмущающих поправок (например, формула (17)) к невозмущенным параметрам состояния.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Тонконогов М.П. Диэлектрическая спектроскопия кристаллов с водородными связями. Протонная релаксация // УФН. – 1998. – Т. 168, № 1. – С. 29–54.
- Калытка В.А., Коровкин М.В. Протонная проводимость: монография. Saarbrucken: LAP Lambert Academic Publishing, 2015. – 180 с. – ISBN-13: 978-3-659-68923-9. – ISBN-10: 3659689238. – EAN: 9783659689239.
- 3. Калытка В.А., Баймуханов З.К., Мехтиев А.Д. Нелинейные эффекты при поляризации диэлектриков со сложной кристаллической структурой // Доклады Академии наук высшей школы Российской Федерации. – 2016. – № 3 (32). – С. 7–21. – doi: 10.17212/1727-2769-2016-3-7-21.
- Калытка В.А., Коровкин М.В. Квантовые эффекты при протонной релаксации в области низких температур // Известия вузов. Физика. – 2016. – Т. 59, № 7. – С. 74–79.
- Зонная структура энергетического спектра и волновые функции протона в диэлектриках с протонной проводимостью / В.А. Калытка, З.К. Баймуханов, А.И. Алиферов, А.Д. Мехтиев // Доклады Академии наук высшей школы Российской Федерации. – 2017. – № 2 (35). – С. 18–31. – doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-18-31.
- Анненков Ю.М., Калытка В.А., Коровкин М.В. Квантовые эффекты при миграционной поляризации в нанометровых слоях протонных полупроводников и диэлектриков при сверхнизких температурах // Известия вузов. Физика. – 2015. – Т. 58, № 1. – С. 31–37.
- 7. Калытка В.А. Математическое описание нелинейной релаксационной поляризации в диэлектриках с водородными связями // Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия. 2017. Т. 23, № 3. С. 71–83. doi: 10.18287/2541-7525-2017-23-3-71-83.
- Детальный анализ нелинейных диэлектрических потерь в протонных полупроводниках и диэлектриках / В.А. Калытка, М.В. Коровкин, А.Д. Мехтиев, А.Д. Алькина // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. – 2017. – № 4. – С. 39–54. – doi: 10.18384-2310-7251-2017-4-39-54.
- 9. Mechanism of non-linear space-charge polarization in solid dielectrics / V.A. Kalytka, M.V. Korovkin, G.A. Vershinin, A.V. Bashirov // Вестник Карагандинского университета. Серия: Физика. – 2017. – № 3 (87). – С. 19–25.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика, ч. 1. – М.: Наука, 1976. – 584 с.
- 11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. С. 226.
- Калытка В.А., Коровкин М.В. Дисперсионные соотношения для протонной релаксации в твердых диэлектриках // Известия вузов. Физика. – 2016. – Т. 59, № 12. – С. 150–159.
- Белоненко М.Б. Особенности нелинейной динамики лазерного импульса в фоторефрактивном сегнетоэлектрике с водородными связями // Квантовая электроника. – 1998. – Т. 25, № 3. – С. 255–258.
- Левин А.А., Долин С.П., Зайцев А.Р. Распределение заряда, поляризация и свойства сегнетоэлектриков типа КН<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> (KDP) // Химическая физика. – 1996. – Т. 15, № 8. – С. 84–92.
- Лебедев Н.Г., Литинский А.О. Модель ионно-встроенного стехиометрического кластера для расчета электронного строения ионных кристаллов // Физика твердого тела. – 1996. – Т. 38, № 3. – С. 959–962.
- Лебедев Н.Г., Белоненко М.Б. Строение и электронная структура сегнетоэлектриков КDP-типа // Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 1, Математика, физика. – 1997. – № 2. – С. 79–81.
- Плотность и содержание воды в кристаллах триглицинсульфата / О.Б. Яценко, И.Г. Чудотворцев, Ж.Д. Стеханова, С.Д. Миловидова, О.В. Рогазинская // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация. – 2006. – № 2. – С. 117–121.

- Свойства нанопористого оксида алюминия с включениями триглицинсульфата и сегнетовой соли / О.В. Рогазинская, С.Д. Миловидова, А.С. Сидоркин, В.В. Чернышев, Н.Г. Бабичева // ФТТ. – 2009. – Т. 51, № 7. – С. 1430.
- Correlated motion dynamics of electron channels and domain walls in a ferroelectric-gate thin-film transistor consisting of a ZnO/Pb(Zr,Ti)O3 stacked structure / Y. Kaneko, Y. Nishitani, H. Tanaka, M. Ueda, Y. Kato, E. Tokumitsu, E. Fujii // Journal of Applied Physics. – 2011. – Vol. 110, iss. 8. – P. 084106.
- Yoon S.M., Yang S., Park S.H.K. Flexible nonvolatile memory thin-film transistor using ferroelectric copolymer gate insulator and oxide semiconducting channel // Journal of The Electrochemical Society. – 2011. – Vol. 158 (9). – P. H892.

### MATHEMATICAL DESCRIPTION OF QUANTUM TUNNELING POLARIZATION IN PROTON SEMICONDUCTORS AND DIELECTRICS

**Kalytka V.A.<sup>1</sup>, Aliferov A.I.<sup>2</sup>, Mekhtiev A.D.<sup>1</sup>, Nikonova T.Yu.<sup>1</sup>** *Karaganda State Technical University, Karaganda, Kazakhstan* 

<sup>2</sup>Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

Based on the methods of quasiclassical statistical theory (with the help of the quantum canonical Gibbs distribution) taking into account the band (zone) structure of the quasidiscrete energy spectrum, the transparency of the potential barrier averaged over energies is calculated for hydrogen ions (protons) moving in an unperturbed one-dimensional periodic potential image of a parabolic shape in proton semiconductors and dielectric (PSCD), with ohmic contacts being at the crystal boundaries. It is theoretically established that the parameters of the band (zone) structure of the energy spectrum (the width of the energy band; the thickness of the crystal; the maximum quantity (number) of energy levels in the isolated potential well, etc.) significantly influence the statistically averaged probability of quantum transitions of low-temperature (T <100 K) relaxation oscillators. With the help of the equilibrium density matrix based on the model of an isolated potential well the influence of the energy of protons zero oscillations (in the hydrogen sublattice) at the quantum permeability of the potential barrier, in the area of the temperature of absolute zero was detected. These effects were not detected for high-temperature relaxation oscillators (T > 100 K) characterized by a quasicontinuous energy spectrum. In the tunnel-diffusion approximation (without regard to thermally activated proton transitions) the nonlinear Fokker-Planck equation describing the kinetics of proton-relaxation polarization in hydrogen bonded crystals (HBC) in the range of low (50–100 K) and ultralow temperatures (1-10 K), in the wide range of polarizing field strengths (100 kV/m-1000 MV/m) was constructed. Methods for the analytical solution of the nonlinear kinetic equation of quantum tunneling polarization are proposed. Prospects for practical application of the results relate to low temperature physics and technology, space technologies and nanotechnologies.

*Keywords*: hydrogen bonded crystals (HBC); zone structure of energy spectrum of the proton in HBC; quasi – classical approximation in quantum mechanics; proton balanced density matrix; wave functions in proton stationary states in HBC.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-7-25

#### REFERENCES

- Tonkonogov M.P. Dielektricheskaya spektroskopiya kristallov s vodorodnymi svyazyami. Protonnaya relaksatsiya [Dielectric spectroscopy of crystals with hydrogen bonds. Proton relaxation]. Uspekhi fizicheskikh nauk – Physics-Uspekhi, 1998, vol. 168, no. 1, pp. 29–54. (In Russian).
- Kalytka V.A., Korovkin M.V. Protonnaya provodimost' [Proton conductivity]. Saarbrucken, LAP Lambert Academic Publishing, 2015. 180 p. ISBN-13: 978-3-659-68923-9. ISBN-10: 3659689238. EAN: 9783659689239.
- Kalytka V.A., Baimukhanov Z.K., Mekhtiev A.D. Nelineinye effekty pri polyarizatsii dielektrikov so slozhnoi kristallicheskoi strukturoi [Non-linear effects under polarization of dielectrics with a compound crystalline structure]. Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Ros-

siiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences, 2016, no. 3 (32), pp. 7–21. doi: 10.17212/1727-2769-2016-3-7-21.

- Kalytka V.A., Korovkin M.V. Quantum effects at a proton relaxation at low temperatures. *Russian Physics Journal*, 2016, vol. 59, iss. 7, pp. 994–1001. Translation from *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii*. *Fizika*, 2016, vol.59, no. 7, pp. 74–79. doi: 10.1007/s11182-016-0865-x.
- Kalytka V.A., Aliferov A.I., Baimukhanov Z.K., Mekhtiev A.D. Zonnaya struktura energeticheskogo spektra i volnovye funktsii protona v dielektrikakh s protonnoi provodimosťyu [Zone structure of the energy spectrum and wave functions of proton in proton conductivity dielectrics]. Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences, 2017, no. 2 (35), pp. 18–31. doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-18-31.
  - Annenkov Yu.M., Kalytka V.A., Korovkin M.V. Quantum effects under migratory polarization in nanometer layers of proton semiconductors and dielectrics at ultralow temperatures. *Russian Physics Journal*, 2015, vol. 58, no. 1, pp. 35–41. doi: 10.1007/s11182-015-0459-z. Translated from *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii*. *Fizika*, 2015, vol. 58, no. 1, pp. 31–37.
  - Kalytka V.A. Matematicheskoe opisanie nelineinoi relaksatsionnoi polyarizatsii v dielektrikakh s vodorodnymi svyazyami [Mathematical description of non-linear relaxating polarization in dielectrics with hydrogen bonds]. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya – Vestnik of Samara University. Natural Science Series*, 2017, vol. 23, no. 3, pp. 71–83. doi: 10.18287/2541-7525- 2017-23-3-71-83.
- Kalytka V.A., Korovkin M.V., Mekhtiev A.D., Alkina A.D. Detal'nyi analiz nelineinykh dielektricheskikh poter' v protonnykh poluprovodnikakh i dielektrikakh [Detailed analysis the non-linear of dielectric losses in proton semiconductors and dielectrics]. Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika – Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics, 2017, no. 4, pp. 39–54. doi: 10.18384-2310-7251-2017-4-39-54.
- Kalytka V.A., Korovkin M.V., Vershinin G.A., Bashirov A.V. Mechanism of non-linear space-charge polarization in solid dielectrics. *Vestnik Karagandinskogo Universiteta. Seriya: Fizika – Bulletin of the Karaganda University. Physics Series*, 2017, no. 3 (87), pp. 19–25.
- 10. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaya fizika*. T. 5. *Statisticheskaya fizika* [Theoretical physics. Vol. 5. Statistical physics]. Moscow, Nauka Publ., 1976. 584 p.
- 11. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaya fizika*. T. 3. *Kvantovaya mekhanika* [Theoretical physics. Vol. 3. Quantum mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1989, p. 226.
- Kalytka V.A., Korovkin M.V. Dispersion relations for proton relaxation in solid dielectrics. *Russian Physics Journal*, 2017, vol. 59, no. 12, pp. 2151–2161. doi: 10.1007/s11182-017-1027-5. Translated from *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii*. *Fizika*, 2016, vol. 59, no. 12, pp. 150–159.
- Belonenko M.B. Osobennosti nelineinoi dinamiki lazernogo impul'sa v fotorefraktivnom segnetoelektrike s vodorodnymi svyazyami [The peculiarities of nonlinear dynamics of a laser pulse in a photorefractive ferroelectric with hydrogen bonds]. Kvantovaya elektronika – Quantum Electronics, 1998, vol. 25, no. 3, pp. 255–258.
- Levin A.A., Dolin S.P., Zaitsev A.R. Raspredelenie zaryada, polyarizatsiya i svoistva segnetoelektrikov tipa KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> (KDP) [The distribution of charge, polarization and properties of the ferroelectric material of the type KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> (KDP)]. *Khimicheskaya fizika – Chemical Physics Reports*, 1996, vol. 15, no. 8, pp. 84–92. (In Russian).
- Lebedev N.G., Litinskii A.O. Model' ionno-vstroennogo stekhiometricheskogo klastera dlya rascheta elektronnogo stroeniya ionnykh kristallov [Model of ion-embedded stoichiometric cluster to calculate the electronic structure of ionic crystals]. *Fizika tverdogo tela – Physics* of the Solid State, 1996, vol. 38, no. 3, pp. 959–962.
- Lebedev N.G., Belonenko M.B. Stroenie i elektronnaya struktura segnetoelektrikov KDPtipa [The structure and electronic structure of ferroelectric KDP-type]. Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya 1, Matematika, fizika – The Science Journal of Volgograd State University. Mathematics. Physics, 1997, no. 2, pp. 79–81.
- Yatsenko O.B., Chudotvortsev I.G., Stekhanova Zh.D., Milovidova S.D., Rogazinskaya O.V. Plotnost' i soderzhanie vody v kristallakh triglitsinsul'fata [Density and water contents in triglycine sulfate crystals]. Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Khimiya. Biologiya. Farmatsiya – Proceedings of Voronezh State University. Series: Chemistry. Biology. Pharmacy, 2006, no. 2, pp. 117–121.

- Rogazinskaya O.V., Milovidova S.D., Sidorkin A.S., Chernyshev V.V., Babicheva N.G. Svoistva nanoporistogo oksida alyuminiya s vklyucheniyami triglitsinsul'fata i segnetovoi soli [Properties of nanoporous alumina with inclusions of triglycine sulfate and Rochelle salt]. *Fizika tverdogo tela – Physics of the Solid State*, 2009, vol. 51, no. 7, p. 1430.
   Kaneko Y., Nishitani Y., Tanaka H., Ueda M., Kato Y., Tokumitsu E., Fujii E. Correlated
- Kaneko Y., Nishitani Y., Tanaka H., Ueda M., Kato Y., Tokumitsu E., Fujii E. Correlated motion dynamics of electron channels and domain walls in a ferroelectric-gate thin-film transistor consisting of a ZnO/Pb(Zr,Ti)O3 stacked structure. *Journal of Applied Physics*, 2011, vol. 110, iss. 8, p. 084106.
- 20. Yoon S.M., Yang S., Park S.H.K. Flexible nonvolatile memory thin-film transistor using ferroelectric copolymer gate insulator and oxide semiconducting channel. *Journal of The Electrochemical Society*, 2011, vol. 158 (9), p. H892.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Калытка Валерий Александрович – родился в 1976 году, канд. физ.мат. наук, доктор PhD (по направлению «Физика»), доцент кафедры «Энергетические системы» Карагандинского государственного технического университета (КарГТУ). Область научных интересов: теоретическая и математическая физика; физика твердого тела; диэлектрическая спектроскопия; физика конденсированного состояния. Опубликовано более 115 научных трудов. (Адрес: 100000, Казахстан, г. Караганда, пр. Бульвар Мира, 56. E-mail: kalytka@mail.ru).

Kalytka Valeriy Alexandrovich (was born in 1976 year) – Candidate of Sciences (Phys&Math.), Doctor of Philosophy (in Physics), associate professor at «Power engineering systems» department in Karaganda state technical university (KSTU). His scientific investigate (research) interests are currently focused on theoretical and mathematical physics, Solid state physics, dielectric spectroscopy and Physics of condensed media. He is the author (and coauthor) of more than 115 scientific proceedings. (Address: 56, Bulvar Mira Av., Karaganda, 100000, Kazakhstan. E-mail: kalytka@mail.ru).



Алиферов Александр Иванович – родился в 1956 г., д-р техн. наук, зав. кафедрой «Автоматизированные электротехнологические установки» Новосибирского государственного технического университета (НГТУ). Область научных интересов: ресурсосберегающие электротехнологии. Опубликовано более 170 научных трудов, в том числе 6 монографий. (Адрес: Россия, 630073, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. Е-mail: aliferov@corp.nstu.ru).

Aliferov Aleksandr Ivanovich (was born in 1956 year) – Doctor of Sciences (Eng.), chief at «Automation of Electric Technological Installations» department in Novosibirsk state technical university (NSTU). His scientific investigate (research) interests are resource-saving electrotechnologies. He is the author (and coauthor) more than 170 scientific proceedings, including 6 monographs. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: alifer-ov@corp.nstu.ru).



Мехтиев Али Джаванширович – родился в 1972 г., канд. техн. наук, зав. кафедрой «Энергетические системы» Карагандинского государственного технического университета (КарГТУ). Область научных интересов: радиотехника и приборостроение, технологии и системы связи, теплоэнергетика и электроэнергетика. Опубликовано более 200 научных трудов. (Адрес: 100000, Казахстан, г. Караганда, пр. Бульвар Мира, 56. E-mail: barton.kz@mail.ru).

**Mekhtiev Ali Dzhavanshirovich** (was born in 1972 year) – Candidate of Sciences (Eng.), chief at «Power engineering systems» department in Karaganda state technical university (KSTU). His scientific investigate (research) in- terests are currently focused on radio electronics engineering and device construction, technologies and communication system chair, heart and power engineering. He is the author (and coauthor) more than 200 scientific proceedings. (Address: 56, Bulvar Mira Av., Karaganda, 100000, Kazakhstan. E-mail: barton.kz@mail.ru).



Никонова Татьяна Юрьевна – родилась в 1982 году, кандидат технических наук, доцент Карагандинского государственного технического университета (КарГТУ). Область научных интересов: машиностроение, автоматизация, материаловедение. Опубликовано более 50 научных трудов. Адрес: 100000, Казахстан, г. Караганда, пр. Бульвар Мира, 56. Е-mail: nitka82@list.ru.

Nikonova Tat'yana Yur'yevna (was born in 1982 year) – Candidate of Sciences (Eng.), Associate Professor of Karaganda State Technical University (KSTU). Her scientific research interests are currently focused in mechanical engineering, automation, materials science. She is the author (and coauthor) of more than 50 scientific proceedings. Address: 56, Bulvar Mira Av., Karaganda, 100000, Kazakhstan. E-mail: nitka82@list.ru.

Статья поступила 14 марта 2018 г. Received March 14, 2018

To Reference:

Kalytka V.A., Aliferov A.I., Mekhtiev A.D., Nikonova T.Yu. Matematicheskoe opisanie kvantovoi tunnel'noi polyarizatsii v protonnykh poluprovodnikakh i dielektrikakh [Mathematical description of quantum tunneling polarization in proton semiconductors and dielectrics]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2018, no. 3 (40), pp. 7–25. doi: 10.17212/1727-2769-2018-3-7-25.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

№ 3 (40)

2018

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

июль-сентябрь

УДК 53.01; 53.096; 532.74; 533; 538.931; 539.196.3; 541.24

## ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ МЕЖДУ СОБОЙ И С МОЛЕКУЛАМИ НЕСУЩЕЙ СРЕДЫ

#### В.Я. Рудяк, С.Л. Краснолуцкий НГАСУ (Сибстрин)

Исследования наножидкостей показали, что они имеют нестандартные свойства. В частности, процессы переноса в наножидкостях, их вязкость и теплопроводность не описываются классическими теориями. Помимо однородных наночастиц, большой практический интерес представляют композитные, в частности состоящие из ядра и оболочки из разных материалов. Для стабилизации наножидкостей и предотвращения агрегации частиц применяют различные поверхностно-активные вещества (ПАВ). В этом случае также фактически имеет место композитная частица. Для моделирования процессов переноса в наножидкостях в настоящее время широко используется метод молекулярной динамики. Этот метод в свою очередь требует задания соответствующих потенциалов взаимодействия. Целью данной работы является вывод потенциалов взаимодействия композитной наночастицы с молекулой несущей среды и двух таких наночастиц между собой. Частицы предполагаются твердыми и сферическими. Взаимодействие атомов наночастицы и молекул несущей среды описывается потенциалами Леннард-Джонса с соответствующими параметрами. Также потенциалами Леннард-Джонса описывается и взаимодействие атомов наночастиц между собой. Потенциал взаимодействия молекулы несущей среды с данной наночастицей ищется в виде суммы потенциалов этой молекулы со всеми атомами наночастицы. Аналогично определяется и потенциал взаимодействия наночастиц. При этом твердое тело аппроксимируется континуальной моделью. Полученные потенциалы предназначены для моделирования процессов переноса в наножидкостях, содержащих в качестве дисперсного элемента покрытые ПАВ или композитные наночастицы, и их течений.

*Ключевые слова*: потенциал взаимодействия, наночастицы, ПАВ, композитные наночастицы, наножидкости, наногазовзвеси, процессы переноса.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-26-37

#### Введение

Наножидкость – это двухфазная среда, состоящая из несущего флюида (жидкости или газа) и наночастиц, имеющих размеры от 1 до 100 нм. В качестве несущей жидкости обычно используются вода, различные органические жидкости (этиленгликоль, масло, биологические жидкости и т. п.), полимерные растворы. Постоянно растущий интерес к наножидкостям мотивирован их уже существующими и возможными применениями (см., например, [1, 2]). Обычно в качестве наночастиц используются частицы химически устойчивых металлов и их оксиды, полимерные частицы и т. д.

Важной особенностью наножидкостей является то, что их свойства переноса (диффузия, вязкость, теплопроводность) не описываются классическими теориями. Так, например, вязкость наножидкостей не описывается теориями, развитыми для крупнодисперсных жидкостей Эйнштейном [3], Бэтчелора [4] и т. д. Вязкость наножидкостей оказывается значительно больше, чем у крупнодисперсных жид-

© 2018 В.Я. Рудяк, С.Л. Краснолуцкий

Исследование выполнено при частичном финансировании РФФИ (гранты № 17-01-00040, № 17-58-45023).

костей и зависит не только от концентрации частиц, но также от их размера и материала [5–9]. Подобная ситуация имеет место и для теплопроводности [10–13]. Однако реально изучавшиеся до сих пор наножидкости обычно содержали однородные частицы. Вместе с тем во многих биомедицинских приложениях, при производстве различной косметической продукции, средств экологической защиты и т. п. [2] часто используются неоднородные частицы. Это прежде всего различные композитные частицы [2, 14–17]. Кроме того, на практике при приготовлении наножидкостей, чтобы предотвратить агрегацию частиц, нередко применяют различные дисперсанты – поверхностно-активные вещества (ПАВ) [2, 18, 19]. В этом случае на поверхности наночастиц образуется тонкая пленка ПАВ и фактически частица также превращается в специфическую композитную.

Экспериментальное изучение теплофизических свойств наножидкостей дает сегодня достаточно надежную информацию. Тем не менее эксперимент не позволяет ответить на вопрос о механизмах процессов переноса и их особенностях в наножидкостях, о причинах зависимости этих свойств от материала частиц, не удается, как правило, получать надежные данные в наножидкостях с достаточно малыми частицами. Альтернативой эксперименту здесь выступает метод молекулярной динамики. Однако его применение в данном случае долгое время было осложнено отсутствием надежных потенциалов взаимодействия молекул несущего флюида с наночастицей и наночастиц между собой. В наших работах [20–22] такие потенциалы были разработаны для однородных наночастиц. С их помощью получены данные о различных свойствах наножидкостей, позднее подтвержденных экспериментально. В работе [23] был построен потенциалов взаимодействия полых наночастиц. Целью данной работы является вывод потенциалов взаимодействия среды и двух таких наночастиц между собой.

#### 1. Потенциал взаимодействия молекулы с композитной наночастицей

Рассматривается твердая композитная двухслойная частица. Она считается сферической и состоит из шарообразной сердцевины радиуса R и сферической оболочки конечной толщины  $\Delta$ . Таким образом, полный радиус наночастицы с оболочкой равен ( $R + \Delta$ ). Частица и оболочка рассматриваются как совокупности атомов (или молекул) соответствующего вещества. Потенциал взаимодействия молекулы несущей среды с данной наночастицей ищется в виде суммы потенциалов этой молекулы со всеми атомами наночастицы:

$$\Phi(|\mathbf{r}|) = \sum_{k=1}^{N} \Phi(|\mathbf{r}_{k} - \mathbf{r}_{m}|), \qquad (1)$$

где N – число атомов наночастицы,  $\mathbf{r}_m$  и  $\mathbf{r}_k$  – радиус-векторы соответственно молекулы несущей среды и *k*-го атома наночастицы.

В дальнейшем в этой работе в качестве потенциала взаимодействия молекул несущей среды с атомом наночастицы используется потенциал Леннард–Джонса

$$\Phi_{mk}^{LJ}(r) = 4\varepsilon_{mk} \left[ \left( \sigma_{mk} / r \right)^{12} - \left( \sigma_{mk} / r \right)^{6} \right],$$
<sup>(2)</sup>

где  $r = |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_k|$  – расстояние между центрами молекул *m* и *k*;  $\sigma_{mk}$  – эффективный диаметр атома;  $\varepsilon_{mk}$  – глубина потенциальной ямы.

Просуммировать ряд (1) аналитически обычно не удается. Поэтому на практике суммирование в формуле (1) заменяют интегрированием [24]. Физически это означает, что твердое тело аппроксимируется континуальной моделью. Нахождение потенциала тогда сводится к вычислению тройного интеграла, потенциал усредняется по текущим координатам интегрирования: радиусу *a* и двум углам: полярному  $\theta$  и азимутальному. Схема интегрирования показана на рис. 1.



*Puc. 1* – Схема интегрирования потенциала взаимодействия (3) *Fig. 1* – Integration diagram of the interaction potential (3)

Темное кольцо показывает расположение атомов частицы на сфере радиуса *a*, равноудаленных от молекулы несущей среды. Если потенциал взаимодействия молекула несущей среды – атом наночастицы не зависит от их ориентации, то формула (1) сводится к сумме следующих интегралов:

$$\Phi(z) = \Phi_{mp}(z) + \Phi_{ms}(z), \qquad (3)$$

$$\Phi_{mp}(z) = V_p^{-1} \int_{0}^{R_{\pi}} \Phi_{mp}^{LJ} \left( \sqrt{\left(z - a\cos\theta\right)^2 + a^2\sin^2\theta} \right) 2\pi a^2 da\sin\theta d\theta,$$
  
$$\Phi_{ms}(z) = V_s^{-1} \int_{R_{\pi}}^{R+\Delta_{\pi}} \Phi_{ms}^{LJ} \left( \sqrt{\left(z - a\cos\theta\right)^2 + a^2\sin^2\theta} \right) 2\pi a^2 da\sin\theta d\theta,$$

где z – расстояние от молекулы до центра сферы, в котором помещено начало координат;  $\Phi_{mk}^{LJ}$  – потенциал Леннард–Джонса (2) взаимодействия молекулы несущего газа с атомом (молекулой) дисперсной частицы соответствующего сорта;  $V_p$ ,  $V_s$  – эффективный объем, приходящийся на одну молекулу сердцевины и оболочки наночастицы соответственно, причем  $V_p^{-1} = \rho_p N_A / \mu_p$ ,  $V_s^{-1} = \rho_s N_A / \mu_s$ , где  $\rho_p$ ,  $\rho_s$  – плотность материала сердцевины и оболочки частицы соответственно,  $N_A$  – число Авогадро,  $\mu_p$ ,  $\mu_s$  – молярная масса атомов (молекул), составляющих сердцевину и оболочку дисперсной частицы соответственно; a,  $\theta$  – текущие координаты интегрирования, характеризующие положение и радиус окружности интегрирования;  $dV = 2\pi a^2 da \sin \theta d\theta$  – элемент объема интегрирования. Индекс p относится к атомам сердцевины, а s – оболочки наночастицы.

В результате интегрирования получаем

$$\Phi(r, R, \Delta) = \Phi_{mp}(r, R) + \Phi_{ms}(r, R, \Delta), \qquad (4)$$

где

$$\begin{split} \Phi_{mp}(r,R) &= \Phi_{mp}^{9}(r,R) - \Phi_{mp}^{3}(r,R) \,, \\ \Phi_{mp}^{n}(r,R) &= C_{mp}^{n} \left\{ \left[ \frac{1}{(r-R)^{n}} - \frac{1}{(r+R)^{n}} \right] - \frac{n}{(n-1)r} \left[ \frac{1}{(r-R)^{(n-1)}} - \frac{1}{(r+R)^{(n-1)}} \right] \right\} \,, \\ \Phi_{ms}(r,R,\Delta) &= \Phi_{ms}^{9}(r,R,\Delta) - \Phi_{ms}^{3}(r,R,\Delta) \,, \\ \Phi_{ms}^{n}(r,R,\Delta) &= C_{ms}^{n} \left\{ \left[ \frac{1}{(r-R-\Delta)^{n}} - \frac{1}{(r+R+\Delta)^{n}} \right] - \frac{1}{(r+R+\Delta)^{n}} \right] - \frac{n}{(n-1)r} \left[ \frac{1}{(r-R-\Delta)^{(n-1)}} - \frac{1}{(r+R+\Delta)^{(n-1)}} \right] - \frac{1}{(r-R)^{n}} - \frac{1}{(r+R)^{n}} \right] + \frac{n}{(n-1)r} \left[ \frac{1}{(r-R)^{(n-1)}} - \frac{1}{(r+R)^{(n-1)}} \right] \right\} \,, \\ C_{mp}^{n} &= \frac{8\pi\varepsilon_{mp}\sigma_{mp}^{(n+3)}}{n(n+1)V_{p}} \,, \ C_{ms}^{n} &= \frac{8\pi\varepsilon_{ms}\sigma_{ms}^{(n+3)}}{n(n+1)V_{s}} \,, \end{split}$$

r – расстояние между центрами наночастицы и молекулой несущей среды.

#### 2. Потенциал взаимодействия композитных наночастиц

Выведем теперь выражение для потенциала взаимодействия двух одинаковых композитных сферических наночастиц, рассмотренных в предыдущем разделе. Этот потенциал определяется как сумма потенциалов взаимодействия атомов первой наночастицы со всеми атомами второй. Его построение можно разбить на два этапа. На первом найдем потенциал взаимодействия первой наночастицы с каждым атомом второй. Считая, что межатомное взаимодействие снова описывается потенциалом (2), искомый потенциал будет иметь вид (4) с соответствующими материалам сердцевины и оболочки наночастиц константами  $C_{mk}^n$ .

На втором этапе просуммируем потенциалы взаимодействия первой наночастицы со всеми атомами второй. Поскольку сердцевины и оболочки наночастиц предполагаются твердыми и однородными, то это суммирование также можно заменить интегрированием по объему второй наночастицы. Для этого разобьем вторую наночастицу на тонкие кольца, положение которых определяется посредством текущего полярного угла  $\theta$  (см. рис. 1). Схема интегрирования аналогична использованной при построении потенциала (3). Таким образом, потенциал взаимодействия двух одинаковых шарообразных композитных наночастиц вычисляется по формуле

$$\Psi(z) = \Psi_{ss}(z) + \Psi_{pp}(z) + 2\Psi_{ps}(z), \qquad (5)$$

где

$$\begin{split} \Psi_{pp}(z) &= V_p^{-1} \int_0^R \int_0^\pi \Phi_{pp} \left( \sqrt{\left(z - a\cos\theta\right)^2 + a^2\sin^2\theta}, R \right) 2\pi a^2 da\sin\theta d\theta \,, \\ \Psi_{ps}(z) &= V_p^{-1} \int_0^R \int_0^R \Phi_{ps} \left( \sqrt{\left(z - a\cos\theta\right)^2 + a^2\sin^2\theta}, R, \Delta \right) 2\pi a^2 da\sin\theta d\theta \,, \\ \Psi_{ss}(z) &= V_s^{-1} \int_R^{R+\Delta\pi} \int_0^\pi \Phi_{ss} \left( \sqrt{\left(z - a\cos\theta\right)^2 + a^2\sin^2\theta}, R, \Delta \right) 2\pi a^2 da\sin\theta d\theta \,. \end{split}$$

В результате интегрирования выражения (5) получаем формулу для искомого потенциала

$$\Psi(r, R, \Delta) = \Psi^7(r, R, \Delta) - \Psi^1(r, R, \Delta), \qquad (6)$$

где

$$\begin{split} \Psi^{7}(r,R,\Delta) &= \Psi^{7}_{ss}(r,R,\Delta) + \Psi^{7}_{pp}(r,R) + 2\Psi^{7}_{ps}(r,R,\Delta) \,, \\ \Psi^{7}_{ss}(r,R,\Delta) &= C_{s}^{7} \left\{ \frac{(R+\Delta)^{2}}{r} \left[ \frac{1}{(r-2R-2\Delta)^{7}} + \frac{2}{r^{7}} + \frac{1}{(r+2R+2\Delta)^{7}} - \frac{(R+\Delta)}{3r} \left[ \frac{1}{(r-2R-2\Delta)^{6}} - \frac{1}{(r+2R+2\Delta)^{6}} \right] - \frac{1}{(r+2R+2\Delta)^{6}} \right] - \frac{1}{30r} \left[ \frac{1}{(r-2R-2\Delta)^{5}} + \frac{2}{r^{5}} + \frac{1}{(r+2R+2\Delta)^{5}} \right] - \frac{2R(R+\Delta)}{r} \left[ \frac{1}{(r-2R-\Delta)^{7}} + \frac{1}{(r-\Delta)^{7}} + \frac{1}{(r+\Delta)^{7}} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^{7}} \right] + \frac{(2R+\Delta)}{3r} \left[ \frac{1}{(r-2R-\Delta)^{6}} - \frac{1}{(r+2R+\Delta)^{6}} \right] - \frac{\Delta}{3r} \left[ \frac{1}{(r-\Delta)^{6}} - \frac{1}{(r+\Delta)^{6}} \right] + \end{split}$$

$$\begin{split} &+ \frac{1}{15r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R-\Delta)^5} - \frac{1}{(r-\Delta)^5} - \frac{1}{(r+\Delta)^5} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^5} \Bigg] + \\ &+ \frac{R^2}{r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R)^7} \Bigg] - \\ &- \frac{R}{3r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^6} - \frac{1}{(r+2R)^6} \Bigg] - \frac{1}{30r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R)^5} \Bigg] \Bigg\}, \\ &\Psi_{pp}^7(r, R) = C_p^7 \Bigg\{ \frac{R^2}{r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R)^7} \Bigg] - \\ &- \frac{R}{3r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^6} - \frac{1}{(r+2R)^6} \Bigg] - \frac{1}{30r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R)^5} \Bigg] \Bigg\}, \\ &\Psi_{pp}^7(r, R, \Delta) = C_{ps}^7 \Bigg\{ \frac{R(R+\Delta)}{r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R-\Delta)^7} + \\ &+ \frac{1}{(r-\Delta)^7} + \frac{1}{(r+\Delta)^7} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^7} \Bigg] + \frac{(2R+\Delta)}{6r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R-\Delta)^6} - \frac{1}{(r+2R+\Delta)^6} \Bigg] + \\ &+ \frac{\Delta}{6r} \Bigg[ \frac{1}{(r-\Delta)^6} - \frac{1}{(r+\Delta)^6} \Bigg] - \\ &- \frac{1}{30r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R-\Delta)^5} - \frac{1}{(r-\Delta)^5} - \frac{1}{(r+\Delta)^5} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^5} \Bigg] - \\ &- \frac{R^2}{r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^7} + \frac{2}{r^7} + \frac{1}{(r+2R)^7} \Bigg] + \\ &+ \frac{R}{3r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^6} - \frac{1}{(r+2R)^6} \Bigg] + \frac{1}{30r} \Bigg[ \frac{1}{(r-2R)^5} + \frac{2}{r^5} + \frac{1}{(r+2R+\Delta)^5} \Bigg] \Bigg\}, \\ &\Psi^1(r, R, \Delta) = \Psi_{ss}^1(r, R, \Delta) + \Psi_{pp}^1(r, R) + 2\Psi_{ps}^1(r, R, \Delta), \end{split}$$

где

$$\Psi^{1}_{ss}(r,R,\Delta) = C^{1}_{s} \left\{ \ln \left[ \frac{r^{2} - 4(R+\Delta)^{2}}{r^{2}} \right] + 2(R+\Delta)^{2} \left[ \frac{1}{r^{2} - 4(R+\Delta)^{2}} + \frac{1}{r^{2}} \right] - \frac{1}{r^{2} - 4(R+\Delta)^{2}} + \frac{1}{r^{2} - 4(R+\Delta)^{2}}$$

$$\begin{split} &+ \ln \left[ \frac{r^2 - 4R^2}{r^2} \right] + 2R^2 \left[ \frac{1}{r^2 - 4R^2} + \frac{1}{r^2} \right] \bigg\}, \\ &\Psi_{pp}^1(r, R) = C_p^1 \left\{ \ln \left[ \frac{r^2 - 4R^2}{r^2} \right] + 2R^2 \left[ \frac{1}{r^2 - 4R^2} + \frac{1}{r^2} \right] \right\}, \\ &\Psi_{ps}^1(r, R, \Delta) = C_{ps}^1 \left\{ \ln \left[ \frac{r^2 - (2R + \Delta)^2}{r^2 - \Delta^2} \right] + \right. \\ &+ 2R(R + \Delta) \left[ \frac{1}{r^2 - (2R + \Delta)^2} + \frac{1}{r^2 - \Delta^2} \right] - \\ &- \ln \left[ \frac{r^2 - 4R^2}{r^2} \right] - 2R^2 \left[ \frac{1}{r^2 - 4R^2} + \frac{1}{r^2} \right] \bigg\}, \\ &C_s^7 = \frac{\pi^2}{315} \frac{\varepsilon_s \sigma_s^{12}}{V_s^2}, \qquad C_p^7 = \frac{\pi^2}{315} \frac{\varepsilon_p \sigma_p^{12}}{V_p^2}, \quad C_{ps}^7 = \frac{\pi^2}{315} \frac{\varepsilon_{ps} \sigma_{ps}^{12}}{V_s V_p}, \\ &C_s^1 = \frac{2\pi^2}{3} \frac{\varepsilon_s \sigma_s^6}{V_s^2}, \qquad C_p^1 = \frac{2\pi^2}{3} \frac{\varepsilon_p \sigma_p^6}{V_p^2}, \qquad C_{ps}^1 = \frac{2\pi^2}{3} \frac{\varepsilon_{ps} \sigma_{ps}^6}{V_s V_p}, \end{split}$$

*r* – расстояние между центрами наночастиц.

#### Заключение

Построенные потенциалы взаимодействия наночастица-молекула и наночастица-наночастица получены в обычных предположениях. Взаимодействие молекулы с наночастицей и наночастиц между собой описывалось классически и в адиабатическом приближении. Помимо этого не учитывались влияние структуры поверхности наночастицы и тепловые колебания ее атомов. Что касается адиабатического приближения, то большая разница в массах электронов и ядер делает его вполне применимым, если только рассматриваются не самые легкие атомы. Имеющийся экспериментальный материал свидетельствует о том, что вплоть до энергий порядка нескольких кэВ взаимодействие молекул вполне описывается в рамках адиабатического приближения [25]. Знания полученного в данном приближении потенциала поэтому вполне достаточно для исследования свойств переноса наножидкостей.

Построенные нами модельные потенциалы можно применять как в квантовомеханических, так и в классических расчетах. Ограничения классического подхода относятся не к собственно потенциалам, а к применимости их в рамках классических теорий переноса. Критерием применимости классического подхода является малость длины волны де Бройля  $\lambda = 2\pi\hbar/p$  по сравнению с характерным пространственным масштабом задачи. Легко убедиться, что при не слишком низких температурах это условие оказывается выполненным.

Учет тепловых колебаний решетки и структуры поверхности может серьезно сказаться на количественных результатах расчетов. Это особенно важно при рассмотрении адсорбции, эффектов неупругости взаимодействия, возможного распыления. Что касается адсорбции, то данный потенциал вполне неплохо будет ее моделировать. При не слишком высоких температурах наночастицы – вполне устойчивые объекты и выбивания атомов молекулами несущей жидкости не происходит. Этим наночастицы отличаются от кластеров, которые имеют обычно существенно меньшие размеры. Неупругость взаимодействия в обычных условиях (при не очень высоких температурах) также не будет сказываться на расчете теплофизических свойств наножидкостей.

Выведенные потенциалы, естественно, тесно связаны с потенциалами, полученными ранее для однородных частиц [20, 22]. При стремлении толщины сферической оболочки к нулю потенциал (4) переходит в потенциал молекулананочастица [20], а потенциал (6) – в потенциал наночастица–наночастица [22]. Последний же потенциал для макроскопических частиц сводится к потенциалу Хамакера [26], но с известными константами взаимодействия.

Потенциал (4) зависит от толщины сферической оболочки  $\Delta$ , окружающей твердую сердцевину. Однако все указанные потенциалы короткодействующие. Поэтому ясно, что молекула несущей среды (жидкости или газа) при  $\Delta$  большей некоторой фактически взаимодействует лишь с атомами сферической оболочки и не чувствует атомов сердцевины. Реальный расчет потенциала подтверждает эту точку зрения. В качестве примера на рис. 2 приведен потенциал взаимодействия медной наночастицы диаметром 50 нм с молекулой аргона (сплошная линия). Здесь же показан потенциал взаимодействия углеродной наночастицы того же радиуса с молекулой аргона (штриховая линия). Наконец пунктирной линией нанесен потенциал взаимодействия композитной наночастицы из меди с углеродной оболочкой с молекулой аргоном. Толщина оболочки равна 1 нм (т.е. сферическое медное ядро имеет диаметр 49 нм). Потенциалы  $\Phi$  (3) измеряются в кельвинах, расстояние от центра наночастицы до молекулы среды r – в ангстремах. С точностью до построения обе последние кривые совпадают.

Указанное обстоятельство принципиально. Процессы переноса в наножидкостях с композитными наночастицами в значительной степени будут определяться материалом ее оболочки. Это, в частности, относится и к наножидкостям, в которых используются различные ПАВ. Обычно пленка ПАВ составляет 1–2 нм. Таким образом, вязкость и теплопроводность наножидкостей, приготовленных с использованием ПАВ и без него, будут различаться. По-видимому, это будет особенно заметно в наножидкостях с малыми частицами.



Рис. 2 – Потенциалы взаимодействия наночастицамолекула (3)

Fig. 2 - Nanoparticle-molecule interaction potentials (3)

#### ЛИТЕРАТУРА

- Wong K.V., Leon O. de. Applications of nanofluids: current and future // Advances in Mechanical Engineering. – 2010. – Vol. 2. – Art. 519659. – doi: 10.1155/2010/519659.
- 2. Рудяк В.Я. Современные проблемы микро- и нанофлюидики. Новосибирск: Наука, 2016. 298 с.
- 3. Einstein A. Eine neue bestimmung der moleküldimensionen // Annalen der Physik. 1906. Vol. 19. P. 289–306.
- Batchelor G.K. Brownian diffusion of particles with hydrodynamic interaction // Journal of Fluid Mechanics. – 1976. – Vol. 74, pt. 1. – P. 1–29. – doi: 10.1017/S0022112076001663.
- Murshed S.M. Sohel, Estelléb P. A state of the art review on viscosity of nanofluids // Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2017. Vol. 76. P. 1134–1152. doi: 10.1016/j.rser.2017.03.113. doi: 10.1016/j.rser.2017.07.016.
- Effect of particle size on the viscosity of nanofluids: a review / D.H. Koca, S. Doganay, A. Turgutc, I.H. Tavmanc, R. Saidurd, I.M. Mahbubulf // Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2018. – Vol. 82. – P. 1664–1674. – doi: 10.1016/j.rser.2017.07.016.
- Nanoparticle friction force and effective viscosity of nanofluids / V.Ya. Rudyak, A.A. Belkin, E.A. Tomilina, V.V. Egorov // Defect and Diffusion Forum. – 2008. – Vol. 273–276. – P. 566–571. – doi: 10.4028/www.scientific.net/DDF.273-276.566.
- Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L. Dependence of the viscosity of nanofluids on nanoparticle size and material // Physics Letters A. 2014. Vol. 378. P. 1845–1849. doi: 10.1016/j.physleta.2014.04.060.
- Экспериментальные данные о зависимости вязкости наножидкостей на основе воды и этиленгликоля от размера и материала частиц / В.Я. Рудяк, А.В. Минаков, М.С. Сметанина, М.И. Пряжников // Доклады Академии наук. – 2016. – Т. 467, № 3. – С. 289–291.
- Review and comparison of nanofluid thermal conductivity and heat transfer enhancements / Yu. Wenhua, D.M. France, J.L. Routbort, U.S. Choi // Heat Transfer Engineering. – 2008. – Vol. 29. – N 5. – P. 432–460. – doi: 10.1080/01457630701850851.
- Kleinstreuer C., Feng Yu. Experimental and theoretical studies of nanofluid thermal conductivity enhancement: a review // Nanoscale Research Letters. – 2011. – Vol. 6, N 229. – P. 1–13. – doi: 10.1186/1556-276X-6-229.
- Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л. Моделирование коэффициента теплопроводности наножидкости с малыми частицами методом молекулярной динамики // ЖТФ. – 2017. – Т. 87, вып. 10. – С. 1450–1458.
- The experimental study of nanofluids boiling crisis on cylindrical heaters / A.V. Minakov, M.I. Pryazhnikov, D.V. Guzei, G.M. Zeer, V.Ya. Rudyak // International Journal of Thermal Sciences. – 2017. – Vol. 116. – P. 214–223. – doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2017.02.019.
- Thermal stability of Sb/Sb2O3 composite nanoparticles / D.W. Zeng, X. Chen, R. Jiang, C.S. Xie, B.L. Zhua, W.L. Song // Materials Chemistry and Physics. – 2006. – Vol. 96, N 2–3. – P. 454–458. – doi: 10.1016/j.matchemphys.2005.07.033.
- 15. Синтез металлических наночастиц на углеродной матрице / В.А. Мальцев, О.А. Нерушев, С.А. Новопашин, С.З. Сахапов, Д.В. Смовж // Российские нанотехнологии. – 2007. – Т. 2, № 5–6. – С. 85–89.
- Hybrid, silica-coated, Janus-like plasmonic-magnetic nanoparticles / G.A. Sotiriou, A.M. Hir, P.-Y. Lozach, A. Teleki, F. Krumeich, S.E. Pratsinis // Chemistry of Materials. – 2011. – Vol. 23 (7). – P. 1985–1992. – doi: 10.1021/cm200399t.
- 17. Романов Н.А., Калашников С.В.; Номоев А.В. Механизмы образования композитных наночастиц (полые наночастицы) // Молодой ученый. 2012. № 8 (43). С. 11–13.
- 18. Такетоми С., Тикадзуми С. Магнитные жидкости. М.: Мир, 1993. 272 с.
- Mukherjee S., Paria S. Preparation and stability of nanofluids a review // IOSR Journal of Mechanical and Civil Engineering. – 2013. – Vol. 9, no. 2. – P. 63–69.
- 20. Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л. Диффузия наночастиц в разреженном газе // ЖТФ. 2002. Т. 72, № 7. С. 13–20.
- 21. Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Иващенко Е.Н. О влиянии физических свойств материала наночастиц на их диффузию в разреженных газах // Инженерно-физический журнал. – 2008. – Т. 81, № 3. – С. 76–81.
- 22. Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Иванов Д.А. О потенциале взаимодействия наночастиц // Доклады Академии наук. 2012. Т. 442, № 1. С. 54–56.

- Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л. Потенциалы взаимодействия полых наночастиц между собой и с молекулами несущей среды // Доклады АН ВШ РФ. 2017. № 2 (35). С. 32–42. doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-32-42.
- 24. Гудман Ф., Вахман Г. Динамика рассеяния газа поверхностью. М.: Мир, 1980. 423 с.
- 25. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982. 312 с.
- 26. *Hamaker H.C.* The London van der Waals attraction between spherical particles // Physica. 1937. Vol. 4, N 10. P. 1058–1072. doi: 10.1016/S0031-8914(37)80203-7.

# POTENTIALS OF COMPOSITE NANOPARTICLES INTERACTION WITH EACH OTHER AND WITH MOLECULES OF THE CARRIER MEDIUM

#### Rudyak V.Ya., Krasnolutsky S.L.

Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Novosibirsk, Russia

Studies of nanofluids have showed that they have non-standard properties. In particular, transport processes in nanofluids, their viscosity and thermal conductivity are not described by classical theories. At present the molecular dynamics (MD) method is widely used to model transport processes in nanofluids. This method, in its turn, requires knowing appropriate interaction potentials. To stabilize nanofluids, in particular, to prevent aggregation of nanoparticles surfactants are used. In addition to homogeneous nanoparticles, composite nanoparticles are of great practical interest. The purpose of this paper is to construct interaction potentials of surfactant coated nanoparticles and composite ones with each other and with molecules of the carrier medium. A nanofluid consisting of a carrier fluid (gas or liquid) and surfactant coated nanoparticles or composite ones is considered. The particles are assumed to be solid and spherical. The interaction between the atoms of the nanoparticles and molecules of the carrier medium is described by Lennard-Jones potentials with the appropriate parameters. Also, Lennard-Jones potentials describe the interaction of atoms of two nanoparticles with each other. The interaction potential of a molecule of the carrier medium with this nanoparticle is given as a sum of the potentials of this molecule with all the atoms of the nanoparticle. Similarly, the interaction potential of two nanoparticles is determined. In both above cases, the solid is approximated by the continuum model. The potentials obtained are intended for modeling of transport processes in nanofluids containing surfactant coated nanoparticles and composite ones as a dispersed element and their flows.

*Keywords*: interaction potential, surfactant, composite nanoparticle, nanofluid, gas nanosuspension, transport processes, molecular dynamics.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-26-37

#### REFERENCES

- 1. Wong K.V., Leon O. de. Applications of nanofluids: current and future. *Advances in Mechanical Engineering*, 2010, vol. 2, art. 519659. doi: 10.1155/2010/519659.
- 2. Rudyak V.Ya. *Sovremennye problemy mikro- i nanoflyuidiki* [Modern problems of micro-and nanofluidics]. Novosibirsk, Nauka Publ., 2016. 298 p.
- 3. Einstein A. Eine neue bestimmung der moleküldimensionen. Annalen der Physik, 1906, vol. 19, pp. 289–306.
- 4. Batchelor G.K. Brownian diffusion of particles with hydrodynamic interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 1976, vol. 74, pt. 1, pp. 1–29. doi: 10.1017/S0022112076001663.
- Murshed S.M. Sohel, Estelléb P. A state of the art review on viscosity of nanofluids. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2017, vol. 76, pp. 1134–1152. doi: 10.1016/j.rser. 2017.03.113.
- Koca D.H., Doganay S., Turgutc A., Tavmanc I.H., Saidurd R., Mahbubulf I.M. Effect of particle size on the viscosity of nanofluids: a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2018, vol. 82, pp. 1664–1674. doi: 10.1016/j.rser.2017.07.016.
- Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Tomilina E.A., Egorov V.V. Nanoparticle friction force and effective viscosity of nanofluids. *Defect and Diffusion Forum*, 2008, vol. 273–276, pp. 566–571. doi: 10.4028/www.scientific.net/DDF.273-276.566.

- Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L. Dependence of the viscosity of nanofluids on nanoparticle size and material. *Physics Letters A*, 2014, vol. 378, pp. 1845–1849. doi: 10.1016/j.physleta.2014.04.060.
- Rudyak V.Ya., Minakov A.V., Smetanina M.S., Pryazhnikov M.I. Experimental data on the dependence of the viscosity of water- and ethylene glycol-based nanofluids on the size and material of particles. *Doklady Physics*, 2016, vol. 61, no. 3, pp. 152–154. doi: 10.1134/S1028335816030113. Translated from *Doklady Akademii nauk*, 2016, vol. 467, no. 3, pp. 289–291.
- Wenhua Yu., France D.M., Routbort J.L., Choi U.S. Review and comparison of nanofluid thermal conductivity and heat transfer enhancements. *Heat Transfer Engineering*, 2008, vol. 29, no. 5, pp. 432–460. doi: 10.1080/01457630701850851.
- Kleinstreuer K., Feng Yu. Experimental and theoretical studies of nanofluid thermal conductivity enhancement: a review. *Nanoscale Research Letters*, 2011, vol. 6, no. 229, pp. 1–13. doi: 10.1186/1556-276X-6-229.
- Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L. Simulation of the thermal conductivity of a nanofluid with small particles by molecular dynamics methods. *Technical Physics*, 2017, vol. 62, iss. 10, pp. 1456–1465. doi: 10.1134/S1063784217100206. Translated from *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki*, 2017, vol. 87, iss. 10, pp. 1450–1458.
- Minakov A.V., Pryazhnikov M.I., Guzei D.V., Zeer G.M., Rudyak V.Ya. The experimental study of nanofluids boiling crisis on cylindrical heaters. *International Journal of Thermal Sciences*, 2017, vol. 116, pp. 214–223. doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2017.02.019.
- Zeng D.W., Chen X., Jiang R., Xie C.S., Zhua B.L., Song W.L. Thermal stability of Sb/Sb2O3 composite nanoparticles. *Materials Chemistry and Physics*, 2006, vol. 96, no. 2–3, pp. 454–458. doi: 10.1016/j.matchemphys.2005.07.033.
- Mal'tsev V.A., Nerushev O.A., Novopashin S.A., Sakhapov S.Z., Smovzh D.V. Sintez metallicheskikh nanochastits na uglerodnoi matritse [Synthesis of metal nanoparticles on carbon matrix]. *Rossiiskie nanotekhnologii – Nanotechnologies in Russia*, 2007, vol. 2, no. 5–6, pp. 85–89. (In Russian).
- Sotiriou G.A., Hir A.M., Lozach P.-Y., Teleki A., Krumeich F., Pratsinis S.E. Hybrid, silicacoated, Janus-like plasmonic-magnetic nanoparticles. *Chemistry of Materials*, 2011, vol. 23 (7), pp. 1985–1992. doi: 10.1021/cm200399t.
- Romanov N.A., Kalashnikov S.V.; Nomoev A.V. Mekhanizmy obrazovaniya kompozitnykh nanochastits (polye nanochastitsy) [Mechanisms of formation of composite nanoparticles (hollow nanoparticles)]. *Molodoi uchenyi – The young Scientist*, 2012, no. 8 (43), pp. 11–13.
- Taketomi S., Tikadzumi S. *Magnitnye zhidkosti* [Magnetic fluids]. Moscow, Mir Publ., 1993. 272 p.
- 19. Mukherjee S., Paria S. Preparation and stability of nanofluids a review. *IOSR Journal of Mechanical and Civil Engineering*, 2013, vol. 9, no. 2, pp. 63–69.
- Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L. Diffusion of nanoparticles in a rarefied gas. *Technical Physics*, 2002, vol. 47, iss. 7, pp. 807–813. doi: 10.1134/1.1495039. Translated from *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki*, 2002, vol. 72, no. 7, pp. 13–20.
- Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L., Ivashchenko E.N. Influence of the physical properties of the material of nanoparticles on their diffusion in rarefied gases. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2008, vol. 81, iss. 3, pp. 520–524. doi: 10.1007/s10891-008-0063-y. Translated from *Inzhenerno-fizicheskii zhurnal*, 2008, vol. 81, no. 3, pp. 76–81.
- Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L., Ivanov D.A. The interaction potential of nanoparticles. *Doklady Physics*, 2012, vol. 57, pp. 33–35. doi: 10.1134/S1028335812010053. Translated from *Doklady Akademii nauk*, 2012, vol. 442, no. 1, pp. 54–56.
- 23. Rudyak V.Ya., Krasnolutskii S.L. Potentsialy vzaimodeistviya polykh nanochastits mezhdu soboi i s molekulami nesushchei sredy [Interaction potentials of hollow nanoparticles with each other and with molecules of the carrier medium]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2017, no. 2 (35), pp. 32–42. doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-32-42.
- Goodman F., Wachman H. Dynamics of gas-surface scattering. New York, Academic Press, 1976. 326 p. (Russ. ed.: Gudman F., Vakhman G. Dinamika rasseyaniya gaza poverkhnost'yu. Moscow, Mir Publ., 1980. 423 p.).
- 25. Kaplan I.G. *Vvedenie v teoriyu mezhmolekulyarnykh vzaimodeistvii* [Introduction to the theory of intermolecular interactions]. Moscow, Nauka Publ., 1982. 312 p.
- 26. Hamaker H.C. The London van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*, 1937, vol. 4, no. 10, pp. 1058–1072. doi: 10.1016/S0031-8914(37)80203-7.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Рудяк Валерий Яковлевич – родился в 1945 году, д-р физ.-мат. наук, профессор, заслуженный работник высшей школы РФ, действительный член МАН ВШ, действительный член Американского нанообщества (American Nano Society). Основные научные направления исследований: неравновесная статистическая механика, кинетическая теория газов, теплофизика процессов переноса, физика наножидкостей, гидромеханика, ламинарно-турбулентный переход, математическое моделирование. Имеет более 500 публикаций, в том числе 7 монографий. (Адрес: 630008, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

**Rudyak Valery Yakovlevich** (b. 1945) – Doctor of Sciences (Phys.&Math.), Professor, Honored Worker of Higher School of Russia, member of the MAS HS, member of the American Nano Society. His research interests are currently focused on: non-equilibrium statistical mechanics, kinetic theory of gases, thermal transfer processes, nanofluids physics, fluid mechanics, laminar-turbulent transition, mathematical modeling. He is the author of more than 500 publications, including 6 monographs. (Address: 113, Leningradskaya St., Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).



Краснолуцкий Сергей Леонидович – родился в 1973 году, канд. физ.мат. наук, доцент кафедры теоретической механики НГАСУ (Сибстрин). Область научных интересов: кинетическая теория газов, неравновесная статистическая механика, физика и механика процессов переноса, процессы переноса в наножидкостях. Опубликовано более 50 научных работ. (Адрес: 630008, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: sergius-l@mail.ru).

**Krasnolutsky Sergey Leonidovich** (b. 1973) – Candidate of Sciences (Phys.&Math.), associate professor at the Department of Theoretical Mechanics, Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering (Sibstrin). His research interests are currently focused on kinetic theory of gases, nonequilibrium statistical mechanics, physics and mechanics of transport processes, transport processes in nanofluids. He is the author of more than 50 scientific papers. (Address: 113, Leningradskaya St., Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: sergius-l@mail.ru).

Статья поступила 29 мая 2018 г. Received May 29, 2018

To Reference:

Rudyak V.Ya., Krasnolutsky S.L. Potentsialy vzaimodeistviya kompozitnykh nanochastits mezhdu soboi i s molekulami nesushchei sredy [Potentials of composite nanoparticles interaction with each other and with molecules of the carrier medium]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2018, no. 3 (40), pp. 26–37. doi: 10.17212/1727-2769-2018-3-26-37.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

июль-сентябрь

№ 3 (40)

— ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ =

УДК622.831

2018

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПО СИНХРОННОЙ РЕГИСТРАЦИИ МЕХАНИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПАРАМЕТРОВ СИГНАЛОВ ЭМИ ПРИ НАГРУЖЕНИИ ОБРАЗЦОВ ГОРНЫХ ПОРОД

А.Г. Вострецов<sup>1,2</sup>, А.А. Бизяев<sup>1,2</sup>, Г.Е. Яковицкая<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Новосибирский государственный технический университет <sup>2</sup>Институт горного дела им. Н.А. Чинакала СО РАН

Описаны эффекты изменения структуры и спектральных характеристик сигналов электромагнитного излучения на стадии, предшествующей нарушению сплошности образцов горных пород, и разработаны диагностические критерии их разрушения.

*Ключевые слова*: разрушение, электромагнитное излучение, нагрузка, деформация, прогноз, нелинейность, квазирезонансный процесс, спектральные характеристики, горные породы.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-38-46

#### Введение

Исследования процесса разрушения образцов горных пород в лабораторных экспериментах с регистрацией уровня нагружения на образец и сопутствующего электромагнитного излучения (ЭМИ) проводились многими научными коллективами. Благодаря работам М.А. Садовского и его учеников [1] внимание к проблеме структурной иерархии заметно возросло. Авторы считают, что процесс формирования потенциального очага разрушения с учетом иерархической блоковой структуры постепенно охватывает все больший объем, приближаясь к размеру взаимодействующих блоков.

Актуальность проблемы прогноза и контроля динамических проявлений в массивах горных пород предопределяет появление различного рода концепций развития модельных представлений о процессе накопления повреждений в массивах и о динамических проявлениях в нем.

К настоящему времени многими исследователями используются два подхода, реализованные в двух- и трехстадийной моделях разрушения. Первая из них – кинетическая концепция прочности твердых тел (дополняющий ее концентрационный критерий разрушения) успешно развивается в ФТИ им. А.Ф. Иоффе [2, 3], вторая – в ОИФЗ РАН им. О.Ю. Шмидта [4]. Основной вывод, содержащийся в [5–7], заключается в том, что разрушение твердого тела при его механическом нагружении происходит не только при достижении предела прочности, но и при меньших нагрузках, однако для этого необходимы более длительные воздействия на образец.

Показано, что и в образце, и на участке массива, т. е. на различных структурных уровнях исследуемых объектов, существенную роль играет концентрационный критерий разрушения. Первая стадия, считают авторы [13], является стадией некоррелированного накопления трещин, а вторая – стадией образования очага разрушения.

Теоретические обоснования возникновения явления электромагнитного излучения при трещинообразовании были рассмотрены в работах [8–9]. Одним из

© 2018 А.Г. Вострецов, А.А. Бизяев, Г.Е. Яковицкая

первых авторов, объясняющих возникновения сигналов ЭМИ при раскрытии одиночной трещины, был В. В. Панасюк [11], которым установлено, что при возникновении трещины время ее развития равно длительности сигнала ЭМИ.

Впервые в нашей стране электромагнитное излучение, возникающее при нагружении образцов горных пород, было зарегистрировано в Томском политехническом институте в 70-х годах прошлого столетия [8].

При этом установлено, что с увеличением размеров образующихся трещин частоты излучаемых ими сигналов ЭМИ снижаются [13]. Показано, что и количество, и амплитуды сигналов ЭМИ по мере роста нагрузки имеют тенденцию к увеличению. Ю. А. Головиным [12] при исследованиях на щелочно-галоидных кристаллах (ЩГК), по-видимому, впервые отмечено, что при нагружении образца КСІ низкочастотные импульсы ЭМИ появляются на стадии микропластической деформации и сопровождают весь процесс деформирования, а высокочастотные – интенсивно генерируются лишь на последней стадии нагружения. Этими же авторами [12] установлено, что доля высокочастотных импульсов ЭМИ варьировалась от 0 для чистых кристаллов КСІ и NaCI до нескольких процентов в LiF.

## 1. Задачи проведения экспериментальных исследований

Ранее в [12] были описаны эксперименты по синхронной двухканальной регистрации нагрузки и сигналов ЭМИ при нагружении образцов горных пород. В настоящей работе предпринята попытка дополнительно разработать методику и провести эксперименты по трехканальной регистрации нагрузки, деформации (деформаций) и сигналов ЭМИ. Для этого было необходимо дополнительно разработать канал для регистрации деформации и обеспечить синхронную регистрацию сигналов ЭМИ, нагрузки и деформации при нагружении образцов горных пород на различных стадиях разрушения в диапазоне частот до 125 кГц.

Для решения поставленных задач лабораторный стенд был дополнен каналом регистрации деформации (деформаций) в образце, обеспечена синхронная регистрация сигналов ЭМИ, нагрузки и деформации в диапазоне частот до 125 кГц и сформулированы следующие задачи экспериментальных исследований:

 выявление наиболее информативных участков осциллограмм сигналов ЭМИ на различных стадиях нагружения;

– определение количества импульсов ЭМИ при разрушении образцов горных пород, длительности этих импульсов *t*, временные интервалы между соседними импульсами *T* и их изменение по мере увеличения нагрузки на образец;

 исследование характера изменений в структуре сигналов ЭМИ на различных стадиях нагружения образцов горных пород и на их основе выявление закономерности подготовки и протекания процесса разрушения в электромагнитных образцах;

 – разработка на основании установленных закономерностей прогнозных признаков разрушения образцов горных пород.

#### 2. Структура канала измерений деформации в образце горных пород

Для измерения деформации в образцах горных пород в лабораторном эксперименте использовался датчик перемещений MS 30-1-LD фирмы «MEGATRON» (Германия), в основе которого заложена модуляция светового потока при прохождении его через измерительную линейку с нанесенными на ее поверхность рисками. Датчик подключался к устройству регистрации деформации, которое преобразует сигналы инкрементального датчика в непрерывную аналоговую величину, синхронно меняющуюся при передвижении штока датчика в заданном направлении (рис. 1). Это обеспечивает возможность синхронной регистрации сигналов ЭМИ, нагрузки и деформации в лабораторном эксперименте.



## 3. Стенд для проведения экспериментальных исследований

Экспериментальные исследования выполнялись на лабораторном стенде (рис. 2), включающем пресс усилием до 300 кН. Для регистрации сигналов ЭМИ использовались стандартные датчики ЭМИ электрического и магнитного типов фирмы RFT (Германия), выполненные в виде штыревых и стержневых антенн, последовательно подключаемые к инструментальному усилителю с полосой пропускания 3 Гц – 300 кГц и коэффициентом усиления 500.





*Fig.* 2 - A structural diagram of the stand for the experimental studies with simultaneous recording of a load, longitudinal deformations and EMR signals on rock samples

На данном стенде исследовалась структура сигналов ЭМИ при одноосном нагружении со скоростью 0,316 кH/с образцов мраморной мелкозернистой плитки размерами 80 × 80 × 20 мм и цилиндрических кернов диабаза высотой 60 мм и диаметром 20 мм.

Обеспечение синхронной регистрации сигналов ЭМИ, деформации и нагрузки в образце по мере ее роста осуществлялось автоматизированной системой сбора и обработки данных (АССОД) АСИ-2, разработанной в ИГД СО РАН. В процессе экспериментов величина нагрузки, деформации и сигналы ЭМИ синхронно регистрировались по трем каналам, фиксировались в памяти компьютера и отображались на экране монитора. Шаг дискретизации сигналов составлял 4 мкс.

#### 4. Результаты экспериментальных исследований

Результаты одного из экспериментов приведены на рис. 3 – синхронные осциллограммы сигналов ЭМИ, полученные с помощью датчика электрического типа (*a*), деформации (*б*) и нагрузки (*в*) для нагружаемого образца диабаза вплоть до его разрушения. По осям абсцисс отложено время, а по осям ординат – отсчеты соответственно сигналов ЭМИ, деформации и нагрузки.





*Fig.* 3 – Oscillograms of EMR signals (*a*), load (*b*) and strain (*c*) in the experiment on uniaxial loading of a diabase specimen

Из рис. З видно, что задолго до потери несущей способности исследуемого образца, характеризуемой падением нагрузки и деформации, в структуре сигнала ЭМИ появляются изменения в виде возникновения и последующего увеличения доли низкочастотных составляющих, что согласно [5] характеризует начало его разрушения. Кроме того, в сигнале присутствуют короткие импульсы, которые обусловлены возникновением отдельных трещин в образце, не приводящих к потере его несущей способности. Таким образом, синхронная регистрация нагрузки, деформации и сигналов ЭМИ подтверждает, что появление низкочастотных компонент в структуре сигналов ЭМИ свидетельствует о начале разрушения образца при его нагружении.

На рис. 4 представлены аналогичные осциллограммы для образца мрамора. Видно, что процесс, предшествующий моменту нарушения сплошности образца, также сопровождается аналогичным изменением структуры и параметров сигнала ЭМИ.



Рис. 4 – Осциллограмма сигналов ЭМИ (*a*), нагрузки (б) и деформаций (*в*) в эксперименте по одноосному нагружению образца мрамора

*Fig.* 4 – An oscillogram of EMR signals (*a*), loads (*b*) and deformations (*c*) in an experiment on uniaxial loading of a marble sample

Отметим также, что данные экспериментов показывают, что регистрация деформационных параметров позволяет на более ранней стадии, чем при регистрации механических напряжений, зафиксировать момент нарушения сполошности образца. Кроме того, процесс деформации на образцах и в массиве регистрировать удобнее, чем механические напряжения.

Таким образом, наиболее ранняя стадия разрушения образцов регистрируется в канале ЭМИ и характеризуется возникновением сигналов различной структуры, затем следует регистрация изменения характера деформаций, и только потом это фиксируется в канале регистрации нагрузки.

Данные особенности регистрируемых величин положены в основу предлагаемого способа диагностики разрушения участка массива горных пород.

## 5. Диагностические критерии разрушения на основе анализа структуры и спектральных характеристик сигналов ЭМИ

Как известно, при нагружении горных пород и регистрации сигналов ЭМИ, длительности импульсов ЭМИ  $\tau_i$  пропорциональны размерам возникающих трещин. При увеличении нагрузки на участок массива длительности сигналов ЭМИ также увеличиваются, например, до  $\tau_{pi}$ , что свидетельствует об увеличении размеров образующихся трещин.

При слиянии трещин в более крупные длительности изучаемых импульсов ЭМИ еще более увеличивается.

Измерение длительностей  $T_i$  интервалов следования импульсов ЭМИ с длительностью  $\tau_i$  и выделение интервалов  $T_{pi}$  следования импульсов с длительностью  $\tau_{pi}$  позволяет более точно установить время возникновения большого количества трещин и предсказать скорое разрушение исследуемого участка массива горных пород. С уменьшением длительностей  $T_{pi}$  интервалов следования импульсов ЭМИ, начиная с некоторого  $T_{ph}$ , по мере увеличения нагрузки на исследуемый участок массива свидетельствует о том, что возникает и прорастает большое количество трещин. Это позволяет судить о начале нарушения сплошности исследуемого участка массива.

Дальнейшее увеличение длительностей  $\tau_{pi}$  импульсов ЭМИ до  $\tau_{p(n-1)}$  и уменьшение длительностей  $T_{pi}$  интервалов следования импульсов ЭМИ до  $T_{p(n-1)}$  позволяет проследить развитие процесса разрушения, т. е. процесса возникновения еще большего количества трещин и слияния их в более крупные, их ветвления и т. д., что делает возможным детализировать степень развития процесса нарушения сплошности участка массива на стадии, пока он еще способен выдерживать увеличивающуюся нагрузку. Последующее увеличение обоих параметров конкретизирует переход от начала нарушения сплошности к интенсивному развитию процесса нарушения сплошности. Этот переход свидетельствует о том, что массив уже более не способен выдерживать увеличивающуюся на него нагрузку, при этом оба параметра достигают критических значений  $\tau_{pn}$  и  $T_{ph}$ .

Соотношения

$$\tau_{pn} \ge (2, 6 - 4, 5)\tau_{pH},$$
  
 $T_{pn} \le (3, 8 - 6, 4)T_{pH}$ 

определяют критическое состояние образца, после которого наступает разделение его на фрагменты. Здесь  $\tau_{pn}$  – максимальное значение длительности импульса ЭМИ на исследуемом интервале времени (*n*-й интервал следования импульсов ЭМИ);  $\tau_{ph}$  – минимальное значение длительности импульса ЭМИ на исследуемом интервале времени, начиная с которого происходит ее увеличение;  $T_{pn}$  – минимальное значение длительности интервала между импульсами ЭМИ (*n*-й интервал следования импульсов ЭМИ);  $T_{ph}$  – максимальное значение длительности интервала между импульсами ЭМИ (*n*-й интервала между импульсов ЭМИ);  $T_{ph}$  – максимальное значение длительности интервала между импульсами ЭМИ, начиная с которого происходит ее уменьшение.

Указанная совокупность признаков дает информацию о приближении разрушения образца, что позволяет определить более достоверно момент его разрушения на фрагменты.

# Заключение

Создан лабораторный стенд и проведены эксперименты по синхронной регистрации сигналов ЭМИ, нагрузки и деформации при одноосном нагружении образцов горных пород вплоть до их разрушения. Выявлены особенности изменений в структуре сигналов ЭМИ, возникающие при приближении момента нарушения сплошности образца. Предложены диагностические критерии определения критического состояния образца на основе анализа структуры сигналов ЭМИ.

## ЛИТЕРАТУРА

- 1. Садовский М.А., Болховитинов Л.Г., Писаренко В.Ф. Деформирование геофизической среды и сейсмический процесс. М.: Наука, 1987. 100 с.
- 2. Куксенко В.С. Модель перехода от микро- к макроразрушению твердых тел // Физика прочности и пластичности. Л.: Наука, 1986. С. 36–41.
- 3. Журков С.Н., Куксенко В.С., Петров В.А. Физические основы прогнозирования механического разрушения // Доклады АН СССР. – 1981. – Т. 259, № 6. – С. 1350–1353.
- Концентрационный порог разрушения и прогноз горных ударов / А.Ю. Гор, В.С. Куксенко, Н. Г. Томилин, Д.И. Фролов // ФТПРПИ. – 1989. – № 3. – С. 54–60.
- 5. Соболев Г.А. Основы прогноза землетрясений. М.: Наука, 1993. 314 с.
- 6. О прогнозировании разрушения горных пород / С.Н. Журков, В.С. Куксенко, В.А. Петров, В.Н. Савельев, У.О. Султанов // Известия Академии наук СССР. Физика Земли. 1977. № 6. С. 11–18.
- Основы физики очага и предвестники землетрясения / В.И. Мячкин, Б.В. Костров, Г.А. Соболев, О.Г. Шамина // Физика очага землетрясений. – М.: Наука, 1975. – С. 104–117.
- 8. Воробьев А.А., Заводовская Е.К., Сальников В.Н. Изменение электропроводности и радиоизлучения горных пород и минералов при физико-химических процессах в них // Доклады АН СССР. 1975. Т. 220, № 1. С. 82–85.
- 9. Турчанинов И.А., Иофис М.А., Каспарьян Э.В. Основы механики горных пород. Л.: Недра, 1977. 503 с.
- Панасюк В.В., Колодий Б.И. Теоретическое исследование электромагнитного излучения при развитии круговой трещины в диэлектрике // Физико-химическая механика материалов. 1983. № 5. С. 72–75.
- Головин Ю.И., Шибков А.А. Быстропротекающие электрические процессы в пластически деформируемых щелочно-галоидных кристаллах // ФТТ. 1987. Т. 28, вып. 11. С. 3492–3499.
- Яковицкая Г.Е. Методы и технические средства диагностики критических состояний горных пород на основе электромагнитной эмиссии. – Новосибирск: Параллель, 2008. – 314 с.
- Патент 2426880 Российская Федерация, МПК7 Е 21 С 39/00. Способ прогноза разрушения горных пород / А.Г. Вострецов, А.А Бизяев, А.В. Кривецкий, Г.Е. Яковицкая. № 2002123946/03; заявл. 09.09.2002; опубл. 27.05.11, Бюл. № 23. 4 с.

## EXPERIMENTAL INVESTIGATIONS ON SYNCHRONOUS RECORDING OF MECHANICAL AND ELECTROMAGNETIC PARAMETERS OF EMP SIGNALS UNDER LOADING OF MINERAL ROCKS

**Vostretsov A.G.**<sup>1,2</sup>, **Bizyaev A.A.**<sup>1,2</sup>, **Yakovitskaya G.E.**<sup>2</sup> <sup>1</sup>Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia <sup>2</sup> Chinakal Institute of Mining, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

The effects of changing the structure and spectral characteristics of signals of electromagnetic radiation at a stage preceding the disruption of the continuity of rock samples are described and diagnostic criteria for their destruction are developed.

*Keywords*: destruction, electromagnetic radiation, load, deformation, prognosis, nonlinearity, quasiresonance process, spectral characteristics, rocks.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-38-46

## REFERENCES

- Sadovskii M.A., Bolkhovitinov L.G., Pisarenko V.F. *Deformirovanie geofizicheskoi sredy i* seismicheskii protsess [Deformation of the geophysical environment and seismic process]. Moscow, Nauka Publ., 1987. 100 p.
- Kuksenko V.S. Model' perekhoda ot mikro- k makrorazrusheniyu tverdykh tel [Model of transition from micro to macrofracture of solids]. *Fizika prochnosti i plastichnosti* [Physics of strength and plasticity]. Leningrad, Nauka Publ., 1986, pp. 36–41.
- Zhurkov S.N., Kuksenko V.S., Petrov V.A. Fizicheskie osnovy prognozirovaniya mekhanicheskogo razrusheniya [Physical bases of mechanical damage prediction]. *Doklady Akademii nauk SSSR – Proceedings of the Russian Academy of Sciences*, 1981, vol. 259, no. 6, pp. 1350–1353. (In Russian).
- Gor A.Yu., Kuksenko V.S., Tomilin N.G., Frolov D.I. Kontsentratsionnyi porog razrusheniya i prognoz gornykh udarov [Concentration destruction threshold and prediction of mining impacts]. *Fiziko-tekhnicheskie problemy razrabotki poleznykh iskopaemykh – Journal of Mining Science*, 1989, no. 3, pp. 54–60. (In Russian).
- 5. Sobolev G.A. *Osnovy prognoza zemletryasenii* [Basics of earthquake prediction]. Moscow, Nauka Publ., 1993. 314 p.
- Zhurkov S.N., Kuksenko V.S., Petrov V.A., Savel'ev V.N., Sultanov U.O. O prognozirovanii razrusheniya gornykh porod [On predicting the destruction of rocks]. *Izvestiya Akademii* nauk SSSR. Fizika Zemli – Izvestiya. Physics of the Solid Earth, 1977, no. 6, pp. 11–18. (In Russian).
- Myachkin V.I., Kostrov B.V., Sobolev G.A., Shamina O.G. Osnovy fiziki ochaga i predvestniki zemletryaseniya [Fundamentals of physics of the focus and the precursors of an earthquake]. *Fizika ochaga zemletryasenii* [Physics of the earthquake focus]. Moscow, Nauka Publ., 1975, pp. 104–117.
- Vorob'ev A.A., Zavodovskaya E.K., Sal'nikov V.N. Izmenenie elektroprovodnosti i radioizlucheniya gornykh porod i mineralov pri fiziko-khimicheskikh protsessakh v nikh [The change in electric conductivity and the radio emission of rocks and minerals during physicochemical processes taking place in them]. *Doklady Akademii nauk SSSR – Proceedings of the Russian Academy of Sciences*, 1975, vol. 220, no. 1, pp. 82–85. (In Russian).
- 9. Turchaninov I.A., Iofis M.A., Kaspar'yan E.V. *Osnovy mekhaniki gornykh porod* [Basics of rock mechanics]. Leningrad, Nedra Publ., 1977. 503 p.
- Panasyuk V.V., Kolodii B.I. Teoreticheskoe issledovanie elektromagnitnogo izlucheniya pri razvitii krugovoi treshchiny v dielektrike [Theoretical study of electromagnetic radiation during the development of a circular crack in a dielectric]. *Fiziko-khimicheskaya mekhanika* materialov – Physico-Chemical Mechanics of Materials, 1983, no. 5, pp. 72–75.
- Golovin Yu.I., Shibkov A.A. Bystroprotekayushchie elektricheskie protsessy v plasticheski deformiruemykh shchelochno-galoidnykh kristallakh [Fast-flowing electrical processes in plastically deformable alkali halide crystals]. *Fizika tverdogo tela – Soviet physics, Solid state*, 1987, vol. 28, vol. 11, pp. 3492–3499. (In Russian).
- Yakovitskaya G.E. Metody i tekhnicheskie sredstva diagnostiki kriticheskikh sostoyanii gornykh porod na osnove elektromagnitnoi emissii [Methods and technical means of diagnosing critical states of rocks based on electromagnetic emission of rocks]. Novosibirsk, Parallel' Publ., 2008. 314 p.
- 13. Vostretsov A.G., Bizyaev A.A., Yakovitskaya G.E. *Sposob prognoza razrusheniya gornykh porod* [The method of forecasting the destruction of rocks]. Patent RF, no. 2426880, 2011.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Вострецов Алексей Геннадьевич – родился в 1955 году, д-р техн. наук, профессор, проректор по научной работе Новосибирского государственного технического университета. Область научных интересов: теория устойчивого обнаружения, различения и оценки сигналов в условиях априорной неопределенности. Опубликовано свыше 150 научных работ, в том числе 3 монографии. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: vostreczov@adm.nstu.ru).

**Vostretsov Aleksey Gennadievich** (b. 1955) – Doctor of Sciences (Eng.), professor, vice-rector for scientific work at the Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on the theory of stable detection, differentiation and estimation of signals under condition of a priori uncertainty. He is the author more than 150 publications including 3 monographs. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: vostreczov@adm.nstu.ru).



Бизяев Алексей Анатольевич – родился в 1979 году, старший преподаватель кафедры конструирования и технологии радиоэлектронных средств, Новосибирский государственный технический университет. Область научных интересов: прогнозирование динамических проявлений горного давления. Опубликовано свыше 20 научных работ, в том числе одна монография. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. Еmail: bizyaev@ngs.ru).

**Bizyaev Aleksey Anatolevich** (b. 1979) – Senior Lecturer department of construction and technology of radio-electronic devices, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on forecasting of dynamic manifestations of rock pressure. He is the author of more than 20 scientific papers including 3 monographs. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: bizyaev@ngs.ru).



**Яковицкая Галина Евгеньевна** – родилась в 1944 году, д-р техн. наук, старший научный сотрудник, Институт горного дела им. Н.А. Чинакала СО РАН. Область научных интересов: прогнозирование динамических проявлений горного давления, аппаратура регистрации электромагнитного излучения. Опубликовано свыше 300 научных работ, в том числе 2 монографии. (Адрес: 630091, Россия, Новосибирск, Красный проспект, 54. Е-mail: yge@ngs.ru).

Yakovitskaya Galina Evgeniena (b. 1944) – Doctor of Sciences (Eng.), Principal Reseacher at the Chinakal Institute of Mining, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences. Her research interests are currently focused on forecasting dynamic manifestations of rock pressure. She has published more than 300 research papers including 2 monographs. (Address: 54, Krasnyi Prospekt, Novosibirsk, 630091, Russia. E-mail: yge@ngs.ru).

Статья поступила 17 июня 2018 г. Received June 17, 2018

#### To Reference:

Vostretsov A.G., Bizyaev A.A., Yakovitskaya G.E. Eksperimental'nye issledovaniya po sinkhronnoi registratsii mekhanicheskikh i elektromagnitnykh parametrov signalov EMI pri nagruzhenii obraztsov gornykh porod [Experimental investigations on synchronous recording of mechanical and electromagnetic parameters of EMP signals under loading of mineral rocks]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2018, no. 3 (40), pp. 38–46. doi: 10.17212/1727-2769-2018-3-38-46.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

июль-сентябрь

№ 3 (40)

УДК 519.6:539.3

2018

# ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ПРИБЛИЖЕННЫХ РЕШЕНИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ МНОГОСЕТОЧНЫХ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

## А.Н. Гришанов

Новосибирский государственный технический университет

Рассмотрен метод построения сходящихся последовательностей решений в численных задачах расчета упругого деформируемого тела при использовании многосеточных конечных элементов (МнКЭ). Достоинством метода является фиксированность размерности основной системы линейных алгебраических уравнений метода конечных элементов (МКЭ) при построении приближенных решений. Метод является аналогом *hp*-версии МКЭ увеличения размерности конечно-элементного представления области задачи. Апостериорные оценки погрешностей решений проводятся на основе метода ZZ, предложенного O.C. Zienkiewicz и J.Z. Zhu, в норме  $L_2$ . При построении «точных» решений в методе ZZ используются МнКЭ, которые учитывают неоднородную структуру материалов и образуют дискретные модели малой размерности.

В качестве примера представлен анализ сходимости последовательности решений и оценок погрешностей в численном расчете напряженно-деформированного состояния трехслойных цилиндрических оболочек при локальном нагружении. Показано, что применение МнКЭ при традиционном способе измельчения сетки дискретизации (*h*-версия МКЭ) и предлагаемом методе порождает сходящиеся последовательности приближенных решений в норме  $L_2$ . На основе метода ZZ найдены апостериорные оценки погрешностей. Проведено сравнение оценок погрешностей и характера сходимости в двух вариантах конечноэлементной дискретизации при использовании трехсеточных конечных элементов. Применение МнКЭ в предлагаемом методе построения приближенных решений позволяет получать системы уравнений МКЭ с малой размерностью, что обеспечивает экономию ресурсов ЭВМ в сравнении с традиционным способом дискретизации.

*Ключевые слова*: апостериорные оценки погрешности, модели дискретизации, сходимость последовательности решений, малая погрешность, упругость, цилиндрические оболочки, многосеточные конечные элементы.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-47-57

#### Введение

Метод конечных элементов (МКЭ) широко используется для численного решения задач механики деформируемого твердого тела. В теории и практике МКЭ для получения сходящихся последовательностей решений с малыми погрешностями рассматривают и реализуют три основные версии МКЭ, которые связаны с разными методами увеличения размерности конечно-элементного представления исследуемой области задачи [1]. В *h*-версии МКЭ последовательное снижение погрешностей решения задачи связано с измельчением сетки дискретизации при фиксированной степени аппроксимирующих полиномов. В *p*-версии – неизменна сетка дискретизации, а сходимость решений определяется увеличением степени аппроксимирующих полиномов. В *hp*-версии одновременно осуществляются измельчение сетки дискретизации и увеличение степени аппроксимирующих полиномов. Каждый из этих вариантов построения последовательности решений

© 2018 А.Н. Гришанов

сопровождается ростом степеней свободы дискретного объекта исследования. Реализация требования получения решений с малой погрешностью может приводить к системам линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) МКЭ высокой размерности (порядка 10<sup>7</sup> – 10<sup>10</sup>). Другая причина высокой размерности СЛАУ при реализации МКЭ связана с необходимость расчета напряженно-деформированного состояния (НДС) в современных композитных материалах со сложной микроструктурой.

С помощью МКЭ численно исследуется НДС различных объектов, в частности однородных и композитных оболочек, которые широко применяются в ракетно-космической и авиационной технике [2–4]. Для расчета цилиндрических оболочек различной толщины в работах [5–7] рассмотрено проектирование многосеточных конечных элементов (МнКЭ), которые описывают трехмерное напряженное состояние в оболочках, учитывают неоднородную структуру материала, образуют многосеточные дискретные модели оболочек, размерность которых в  $10^3 – 10^6$  раз меньше размерностей базовых моделей.

В данной работе на примере расчета слоистой цилиндрической оболочки с помощью МнКЭ предложен метод построения сходящейся последовательности решений с малой погрешностью, основное отличие которого от *h*-, *hp*-версий МКЭ состоит в том, что размерность решаемых СЛАУ МКЭ при нахождении элементов последовательности остается постоянной. Такой подход позволяет существенно экономить ресурсы ЭВМ.

Предлагаемый метод можно отнести к аналогу *hp*-версии МКЭ. Он включает измельчение сеток дискретизации при построении последовательности решений, что соответствует *h*-версии. В то же время, поскольку в соответствии с алгоритмом построения МнКЭ [5–7] порядок аппроксимирующих степенных полиномов или полиномов Лагранжа может меняться в процессе построения МнКЭ, что соответствует *p*-версии, то предлагаемый метод можно считать аналогом *hp*-версии МКЭ. Отметим, что именно структура МнКЭ позволяет измельчать исходную мелкую (базовую) сетку дискретизации и изменять степени аппроксимирующих полиномов, что позволяет учитывать сложные структуры (микроструктуры) материалов. Основное преимущество МнКЭ, которое используется в предлагаемом методе построения последовательности решений, состоит в том, что увеличение размерностей (*s* –  $\alpha$ )-сеточных конечных элементов (КЭ) ( $\alpha = 1, ..., s - 1$ ), образующих структуру *s*-сеточного КЭ (*s* ≥ 2), не меняет размерности СЛАУ МКЭ, построенной на основе *s*-сеточных КЭ.

Как правило, оценка эффективности КЭ осуществляется путем исследования сходимости решений и оценки погрешностей в характерных точках оболочек [2–4]. Однако в ряде случаев целесообразно рассмотренивать сходимости решений (полей перемещений и напряжений) и оценки погрешностей в интегральной форме (например, в норме  $L_2$ ). Такой подход позволяет также оценить достоверность решений и корректность выбранных параметров численных процедур, что важно для инженерных расчетов.

Для оценки эффективности использования МнКЭ в предлагаемом методе используется теория апостериорного контроля точности приближенных решений, полученных с помощью МКЭ [8, 9]. Суть апостериорного контроля связана с оценкой отклонения результатов приближенного решения от неизвестного точного решения с опорой на исходные данные задачи и имеющееся приближенное решение. Использование известных методов оценки погрешностей необходимо для гарантии достоверности полученных результатов. Методы оценки погрешностей, которые характеризуются относительной простотой реализации при небольшом объеме вычислений, рассмотрены в работе [9].

О.С. Zienkiewicz и J.Z. Zhu в работе [10] предложили также простой в реализации метод оценки погрешностей решений (метод ZZ), связанных с конечноэлементной дискретизацией. В работе [11] показано применение этого подхода к расчету однородных пластин и оболочек.

Существующие подходы к определению апостериорных оценок связаны с использованием «точного» решения  $\mathbf{u}^*$ , которое обычно определяется приближенно с помощью конечно-элементного решения  $\mathbf{u}_h$  данной краевой задачи. Однако существующие процедуры определения «точных» решений [9–11] трудно применять при расчете трехмерных композитных тел. В этом случае часто при определении  $\mathbf{u}^*$  необходимо учитывать микронеоднородную структуру материала, что приводит к построению сложных дискретных моделей [5–7].

В данной работе на основе использования трехсеточных КЭ (ТрКЭ) рассмотрены два варианта построения последовательности решений задачи при расчете НДС слоистой цилиндрической оболочки. На основе метода ZZ найдены апостериорные оценки погрешностей. Проведено сравнение оценок погрешностей и характера сходимости решений при двух вариантах использования ТрКЭ.

## 1. Построение приближенных решений и оценка их погрешностей

Рассмотрим основные положения предлагаемого метода на примере расчета НДС слоистой цилиндрической оболочки в случае применения ТрКЭ  $V^{(3)}$  при аппроксимации перемещений полиномами Лагранжа (рис. 1). ТрКЭ  $V^{(3)}$  состоит из M двухсеточных КЭ (ДвКЭ)  $V_m^{(2)}$  (m = 1, ..., M), каждый из которых состоит из N однородных односеточных КЭ (ОдКЭ)  $V_n^{(1)}$  (n = 1, ..., N). При построении ТрКЭ используются три вложенные сетки. Мелкая сетка (базовое разбиение области) связана с разбиением области ТрКЭ на мелкие ОдКЭ, которые учитывают неоднородную структуру материала оболочки. Крупные сетки применяются для понижения размерности базового разбиения.



*Puc. 1* – Трехсеточный КЭ *Fig. 1 – A* three-grid FE

При построении ТрКЭ V<sup>(3)</sup> используются следующие соотношения:

$$\mathbf{K}^{(s)} \,\,\boldsymbol{\delta}^{(s)} = \mathbf{P}^{(s)}, \,\, s = 1, 2, 3\,, \tag{1}$$

где

$$\mathbf{K}^{(1)} = \int_{V} (\mathbf{B}^{(1)})^{T} \mathbf{D} \mathbf{B}^{(1)} dV, \quad \mathbf{P}^{(1)} = \int_{V} (\mathbf{N}^{(1)})^{T} \mathbf{F}^{(1)} dV - \int_{S} (\mathbf{N}^{(1)})^{T} \mathbf{q}^{(1)} dS,$$
  

$$\mathbf{K}^{(2)} = \sum_{n=1}^{N} (\mathbf{A}_{n}^{(2)})^{T} \mathbf{K}_{n}^{(1)} \mathbf{A}_{n}^{(2)}, \quad \mathbf{P}^{(2)} = \sum_{n=1}^{N} (\mathbf{A}_{n}^{(2)})^{T} \mathbf{P}_{n}^{(1)}, \quad \boldsymbol{\delta}_{n}^{(1)} = \mathbf{A}_{n}^{(2)} \boldsymbol{\delta}^{(2)},$$
  

$$\mathbf{K}^{(3)} = \sum_{m=1}^{M} (\mathbf{A}_{m}^{(3)})^{T} \mathbf{K}_{m}^{(2)} \mathbf{A}_{m}^{(3)}, \quad \mathbf{P}^{(3)} = \sum_{m=1}^{M} (\mathbf{A}_{m}^{(3)})^{T} \mathbf{P}_{m}^{(2)}, \quad \boldsymbol{\delta}_{m}^{(2)} = \mathbf{A}_{m}^{(3)} \boldsymbol{\delta}^{(3)},$$
  

$$\mathbf{K}_{n}^{(1)} = (\mathbf{T}_{n}^{(2)})^{T} \mathbf{K}^{(1)} \mathbf{T}_{n}^{(2)}, \quad \mathbf{P}_{n}^{(1)} = (\mathbf{T}_{n}^{(2)})^{T} \mathbf{P}^{(1)}, \quad n = 1, ..., N,$$
  

$$\mathbf{K}_{m}^{(2)} = (\mathbf{T}_{m}^{(3)})^{T} \mathbf{K}^{(2)} \mathbf{T}_{m}^{(3)}, \quad \mathbf{P}_{m}^{(2)} = (\mathbf{T}_{m}^{(3)})^{T} \mathbf{P}^{(2)}, \quad m = 1, ..., M.$$
(2)

Здесь **N**<sup>(1)</sup>, **B**<sup>(1)</sup>, **D** – матрицы функций формы, деформаций, модулей упругости; **F**<sup>(1)</sup>, **q**<sup>(1)</sup> – векторы объемных и поверхностных сил; V, S – область и поверхность КЭ  $V^{(1)}$ ; **T**<sup>(2)</sup><sub>n</sub>, **T**<sup>(3)</sup><sub>m</sub> – матрицы вращения, **K**<sup>(s)</sup>, **P**<sup>(s)</sup>,  $\delta^{(s)}$  – матрицы жескости и векторы узловых сил и перемещений в локальных системах координат  $O_s x_s y_s z_s$  для КЭ  $V^{(s)}$ , s = 1, 2, 3. Матрицы **A**<sup>(2)</sup><sub>n</sub>, **A**<sup>(3)</sup><sub>m</sub> понижают размерность векторов перемещений в ДвКЭ и ТрКЭ с помощью аппроксимирующих функций перемещений, построенных на крупных сетках ДвКЭ и ТрКЭ [5–7].

Отметим следующие особенности построения последовательности решений при использовании МнКЭ в случае, когда размерность СЛАУ МКЭ остается постоянной.

1. Как показывают численные эксперименты, погрешность решения  $\mathbf{u}^{(s)}$ ( $s \ge 2$ ) при использовании *s*-сеточных КЭ снижается при измельчении базовой сетки дискретизации.

2. Порядок полиномов Лагранжа в  $(s - \alpha)$ -сеточных КЭ  $(\alpha = 1, ..., s - 1)$  остается неизменным при измельчении базовой сетки области. На каждом шаге построения последовательности решений количество  $(s - \alpha)$ -сеточных КЭ, входящих в состав *s*-сеточного КЭ, растет, а общее количество *s*-сеточных КЭ в дискретной модели оболочки остается постоянным.

3. Процедура построения *s*-сеточного КЭ сводится к нахождению значения матрицы жесткости  $\mathbf{K}^{(s)}$  и вектора узловых сил  $\mathbf{P}^{(s)}$  *s*-сеточного КЭ и определяется значениями уже найденных на предыдущем этапе расчета матриц  $\mathbf{K}^{(s-\alpha)}$  и векторов  $\mathbf{P}^{(s-\alpha)}$  (*s*- $\alpha$ )-сеточных КЭ,  $\alpha = 1, ..., s-1$ , которые включают базовое разбиение *s*-сеточного КЭ [5–7].

4. Более подробно процедура нахождения матриц жесткости  $\mathbf{K}^{(s)}$  и вектора узловых сил  $\mathbf{P}^{(s)}$  изложена в работах [5, 6] где показано, что МнКЭ способны учитывать неоднородную (микронеоднородную) структуру и сложную форму

трехмерных тел с помощью базовых разбиений. Процедура построения МнКЭ позволяет найти вектор перемещений в узлах базовой (мелкой) сетки, связанной с ОдКЭ (s = 1), решая только СЛАУ малой размерности, которая соответствует узлам крупной сетки МнКЭ. Например, при s = 3 перемещения в ТрКЭ позволяют восстановить узловые перемещения в каждом ДвКЭ (s = 2), входящем в состав ТрКЭ, и далее, в каждом ОдКЭ (s = 1), входящем в структуру ДвКЭ.

Приведем основные соотношения, которые необходимы для проведения апостериорного контроля точности приближенных решений, полученных с применением МКЭ [10, 11]. Эти соотношения будут использованы для оценки погрешностей решений, полученных с помощью МнКЭ.

Для оценки суммарной погрешности результатов (метод ZZ) вводятся безразмерные параметры [10]

$$\eta = \frac{\|\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{u}\|} \cdot 100 \ \%, \ \eta_{\sigma} = \frac{\|\mathbf{e}_{\sigma}\|}{\|\boldsymbol{\sigma}\|} \cdot 100 \ \%.$$
(3)

При численных расчетах значения  $\eta$ ,  $\eta_{\sigma}$  в формулах (3) определяются соотношениями [11]

$$\eta \approx \frac{\|\mathbf{e}\|}{\left(\|\mathbf{u}_{h}\|^{2} + \|\mathbf{e}\|^{2}\right)^{1/2}} \cdot 100 \%, \quad \eta_{\sigma} \approx \frac{\|\mathbf{e}_{\sigma}\|}{\left(\|\boldsymbol{\sigma}_{h}\|^{2} + \|\mathbf{e}_{\sigma}\|^{2}\right)^{1/2}} \cdot 100 \%.$$
(4)

Здесь использованы обозначения:  $\mathbf{\sigma}, \mathbf{u}$  – тензор напряжений и вектор перемещений, которые являются точным решением исходной задачи;  $\mathbf{\sigma}_h, \mathbf{u}_h$  – соответствующие конечно-элементные решения;  $\mathbf{e} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_h$ ,  $\mathbf{e}_{\sigma} = \mathbf{\sigma} - \mathbf{\sigma}_h$  – погрешности перемещений и напряжений в расчетной области тела V.

Для интегральных оценок погрешности характеристик НДС используем норму L<sub>2</sub> [1]

$$\|\mathbf{e}\|_{L_{2}} = \left(\int_{V} \mathbf{e}^{T} \mathbf{e} dV\right)^{1/2}, \quad \|\mathbf{e}_{\sigma}\|_{L_{2}} = \left(\int_{V} (\mathbf{e}_{\sigma})^{T} \mathbf{e}_{\sigma} dV\right)^{1/2}, \\ \|\mathbf{u}\|_{L_{2}} = \left(\int_{V} \mathbf{u}^{T} \mathbf{u} dV\right)^{1/2}, \quad \|\mathbf{\sigma}\|_{L_{2}} = \left(\int_{V} (\mathbf{\sigma})^{T} \mathbf{\sigma} dV\right)^{1/2}.$$
(5)

Далее в тексте индекс  $L_2$  в обозначении нормы опускаем. Значение нормы погрешности для всей области V, состоящей из N КЭ, складывается из суммы норм погрешностей  $\|\mathbf{e}\|_n$ ,  $\|\mathbf{e}_{\sigma}\|_n$ , определенных для *n*-го КЭ, n = 1, ..., N, т. е.

$$\|\mathbf{e}\|^2 = \sum_{n=1}^{N} \|\mathbf{e}\|_n^2, \quad \|\mathbf{e}_{\sigma}\|^2 = \sum_{n=1}^{N} \|\mathbf{e}_{\sigma}\|_n^2.$$
 (6)

В работе [10] приведена формула для определения среднеквадратичного значения погрешности (удельного квадрата погрешности) напряжений в виде

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{\|\mathbf{e}_{\boldsymbol{\sigma}}\|}{V}\right)^{1/2}.$$
(7)

Этот параметр погрешности (7) можно использовать как для всей области конструкции, так и для каждого КЭ дискретной модели. Также можно ввести параметр  $\xi_n$  по формуле [10]:

$$\xi_n = \frac{\Delta \sigma_n}{\Delta \hat{\sigma}} \le 1, \quad n = 1, ..., N, \qquad (8)$$

где  $\Delta \hat{\sigma}$  – допустимая величина среднеквадратичной погрешности при определении напряжения  $\Delta \sigma_n$  в каждом КЭ. Сетка дискретизации является приемлемой для расчета с выбранным допустимым напряжением, если для всех элементов выполняется неравенство (8). Это позволяет корректировать выбранный закон дискретизации для получения допустимой погрешности в каждом КЭ.

Отметим, что точное решение исходной задачи для композитных тел сложной формы обычно неизвестно. В связи с этим в методе ZZ в приведенных выше формулах вместо точного решения  $\sigma$ ,  $\mathbf{u}$  используется приближенное, так называемое «точное» решение  $\mathbf{u}^*, \sigma^*$ . В этом случае соотношения для погрешностей  $\mathbf{e}$ ,  $\mathbf{e}_{\sigma}$  имеют вид

$$\mathbf{e} \approx \mathbf{u}^* - \mathbf{u}_h, \ \mathbf{e}_\sigma \approx \mathbf{\sigma}^* - \mathbf{\sigma}_h.$$
 (9)

Как правило, значения  $\mathbf{u}^*, \mathbf{\sigma}^*$  определяются путем минимизации взвешенных невязок с применением значений  $\mathbf{\sigma}_h, \mathbf{u}_h$  или путем усреднения значений  $\mathbf{\sigma}_h, \mathbf{u}_h$  [1, 9]. При использовании в расчетах НДС МнКЭ для определения апостериорных оценок погрешностей, для приближенного решения  $\mathbf{u}^{(s)}$ , построенного с помощью МнКЭ  $V^{(s)}$ , в качестве «точного» решения  $\mathbf{u}^*$  можно использовать приближенные решения  $\mathbf{u}^{(s-\alpha)}$  ( $\alpha = 1, ..., s-1$ ), построенные с использованием КЭ  $V^{(s-\alpha)}$ . Например, при использовании ТрКЭ можно принять  $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{(2)}$  или  $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{(1)}$ , где  $\mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)}$  – решения, полученные для оболочки с помощью ОдКЭ  $V_n^{(1)}$  или ДвКЭ  $V_m^{(2)}$ .

Рассмотрим на примере расчета композитной оболочки с помощью ТрКЭ применение классического метода построения последовательности решений с использованием последовательного измельчения сетки дискретизации (*h*-версия), когда размерность СЛАУ растет, и предлагаемого метода при сохранении размерности СЛАУ.

#### 2. Результаты численных экспериментов

Рассмотрим модельную задачу расчета НДС трехслойной цилиндрической оболочки в системе координат *Охуг*. При y = 0; 2*L* торцы оболочки защемлены. Длина оболочки 2L = 72, радиус срединной поверхности R = 48, толщина H = 9,6 при R/H = 5 и H = 3,2 при R/H = 15, толщина слоев – H/3. Модули Юнга слоев (начиная с нижнего) равны 1, 5, 10, коэффициент Пуассона – 0,3. На внешней поверхности оболочки длиной L/2 и углом раствора  $\alpha = \pi/2$ , симметричной относительно плоскостей *Оуг*, y = L действует давление q = -0,5 (рис. 2). В расчетах используется 1/4 часть оболочки.



*Puc.* 2 – Левая симметричная часть оболочки *Fig.* 2 – A left symmetrical part of the shell

Размерность базовых дискретных моделей  $R_k$  определяется по формулам:

$$m_{1,k} = 432k+1, \quad m_{2,k} = 108k+1, \quad m_{3,k} = 18k+1, \quad k = 1,...,4,$$
 (10)

где  $m_{1,k}$ ,  $m_{2,k}$ ,  $m_{3,k}$  – размерности сетки в тангенциальном, осевом и радиальном направлении оболочки. На базовых моделях  $R_k$  строятся многосеточные дискретные модели из ДвКЭ и ТрКЭ. Рассмотрим два варианта построения МнКЭ. В первом случае ДвКЭ и ТрКЭ имеют характерные размеры  $9h_{x,k}^{(1)} \times 9h_{y,k}^{(1)} \times H$  и  $27h_{x,k}^{(1)} \times 27h_{y,k}^{(1)} \times H$ , где  $h_{x,k}^{(1)}$ ,  $h_{y,k}^{(1)}$  – размеры ОдКЭ по двум координатам при k = 1, ..., 4. Этот случай соответствует классичеческому варианту измельчения сетки (h-версия). Во втором случае ТрКЭ имеют характерные размеры  $27kh_{x,k}^{(1)} \times 27kh_{y,k}^{(1)} \times H$ , k = 1, ..., 4. В этом случае крупная сетка сохраняет свой постоянный размер и, как следствие, СЛАУ имеет постоянную размерность (аналог hp-версии).

В ТрКЭ используются полиномы Лагранжа третьего порядка по всем координатам, причем узлы крупных сеток ДвКЭ и ТрКЭ расположены на общих границах разномодульных слоев, что улучшает сходимость последовательности конечно-элементных решений [7]. При вычислении для каждого  $R_k$  максимального значения  $\xi_{\max,k} = \max_{n=1,...,N} \xi_{n,k}$  по формуле (8) величина

допустимого значения  $\Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}}$  определяется соотношением

$$\Delta \hat{\boldsymbol{\sigma}} = a \|\boldsymbol{\sigma}\| / V^{1/2} , \qquad (11)$$

где a определяет величину доли среднеквадратичного значения напряжения во всем объеме V.

В табл. 1 представлены результаты расчетов оценки погрешности в норме  $L_2$  полей перемещений и напряжений для толстых (R/H = 5) и тонких (R/H = 15) трехслойных оболочек для четырех моделей дискретизации  $R_k$  (k = 1, ..., 4) и двух случаев характерных размеров ТрКЭ при a = 0,01. В данном примере значения  $\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\sigma}^*$ , которые мы считаем «точными» решениями, отвечают решению, построенному с применением ДвКЭ  $V^{(2)}$ . В табл. 1 использованы

обозначения  $\eta_k$ ,  $\eta_{\sigma,k}$ ,  $\xi_{\max,k}$  для первого случая (*h*-версия) и  $\eta_k^*$ ,  $\eta_{\sigma,k}^* \xi_{\max,k}^* - для$ второго (аналог *hp*-версии). Последовательности значений  $\eta_k$ ,  $\eta_{\sigma,k}$ ,  $\xi_{\max,k}$  и  $\eta_k^*$ ,  $\eta_{\sigma,k}^* \xi_{\max,k}^*$  в таблице демонстрируют хорошую асимптотическую сходимость перемещений и напряжений в обоих анализируемых случаях. Для толстой оболочки использование МнКЭ дает меньшую погрешность определения НДС оболочки, чем для тонкой оболочки. Отметим, что уже модель дискретизации  $R_1$  демонстрирует эффективность построенной сетки ( $\xi_k^* < 1$  для всех КЭ), т. е.

достаточно точное определение напряжений в каждом элементе.

| Результаты | расчетов | оболочек | для | моделей | $R_k$ |
|------------|----------|----------|-----|---------|-------|
|------------|----------|----------|-----|---------|-------|

| R/H   | 5              |                |                |                | 15             |                |                |                |
|---|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| k   | 1              | 2              | 3              | 4              | 1              | 2              | 3              | 4              |
| $\frac{\eta}{\eta_k^*}$                     | <u>0,79181</u> | <u>0,37319</u> | <u>0,03020</u> | <u>0,01612</u> | <u>1,29337</u> | <u>0,42523</u> | <u>0,16110</u> | <u>0,09064</u> |
|   | 0,79181        | 0,78601        | 0,13612        | <b>0,12621</b> | 1,29337        | 0,55454        | 0,32011        | <b>0,26480</b> |
| $\frac{\eta_{\sigma,k}}{\eta_{\sigma,k}^*}$ | <u>6,15401</u> | <u>4,53876</u> | <u>1,59181</u> | <u>1,16883</u> | <u>9,79531</u> | <u>5,24467</u> | <u>3,42884</u> | <u>2,57221</u> |
|   | 6,15401        | 5,23332        | 3,03222        | <b>2,84898</b> | 9,79531        | 6,06657        | 4,65014        | <b>4,08360</b> |
| $\frac{\xi_{\max,k}}{\xi_{\max,k}^*}$       | <u>0,22522</u> | <u>0,12589</u> | <u>0,01620</u> | <u>0,00913</u> | <u>0,58592</u> | <u>0,12460</u> | <u>0,05153</u> | <u>0,02892</u> |
|   | 0,22522        | 0,18561        | 0,10575        | <b>0,09826</b> | 0,58592        | 0,37744        | 0,30989        | <b>0,27385</b> |

**Results of calculation of shells for models**  $R_k$ 

Сравнение двух случаев ТрКЭ показывает, что в случае уменьшения размеров ТрКЭ (*h*-версия) сходимость последовательности решений более быстрая, а относительная погрешность для перемещений и напряжений меньше, чем в случае, когда размер ТрКЭ и соответствующая крупная сетка дискретизации не меняются при построении последовательности решений. Тем не менее характер сходимости и значения погрешности в случае сохранения размерности СЛАУ имеют приемлемый уровень при инженерных расчетах НДС оболочек.

Сравним эффективность применения МнКЭ с точки зрения экономии вычислительных ресурсов в двух вариантах расчетов для модели  $R_4$ . Размерность трехсеточной модели для первого варианта равна 110012, ширина ленты СЛАУ – 1764. Соответствующая трехсеточная модель при постоянном размере ТрКЭ имеет 6764 узловых неизвестных, ширина ленты СЛАУ – 468. Реализация второго варианта снижает размерность СЛАУ приблизительно в 16 раз и требует в 61 раз меньше объема памяти ЭВМ, чем в первом случае. Количество используемых КЭ уменьшается в 16 раз.

#### Заключение

Представленные в работе теоретические материалы и результаты численных экспериментов показывают, что предлагаемый метод построения последовательности приближенных решений при использовании МнКЭ и постоянной размерности СЛАУ МКЭ:

- порождает сходящиеся последовательности решений;

 – позволяет измельчать сетку дискретизации для учета неоднородной (микронеоднородной) структуры композитного материала для определения НДС без изменения размерности конечно-элементной задачи;

– позволяет строить решения с малой (заданной) погрешностью;

- обеспечивает экономию ресурсов ЭВМ и требует небольших временных затрат.

Предлагаемый подход особенно эффективен на стадии эскизного проектирования цилиндрических композитных оболочечных конструкций.

## ЛИТЕРАТУРА

- Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., Zhu J.Z. The finite element method: its basis and fundamentals. – Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2013. – 715 p.
- Reddy J.N. Mechanics of laminated composite plates and shells. Theory and analysis. New York: CRC Press, 2004. – 831 p.
- 3. Голованов А.И., Тюленева О.И., Шигабутдинов А.Ф. Метод конечных элементов в статике и динамике тонкостенных конструкций. М.: Физматлит, 2006. 392 с.
- 4. Кузьмин М.А., Лебедев Д.Л., Попов Б.Г. Расчеты на прочность элементов многослойных композитных конструкций. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2012. – 341 с.
- 5. Матвеев А.Д., Гришанов А.Н. Расчет композитных цилиндрических оболочек с применением многосеточных элементов // Вестник СибГАУ. – 2016. – № 3. – С. 587–594.
- 6. **Матвеев А.Д., Гришанов А.Н.** Трехмерные композитные многосеточные конечные элементы оболочечного типа // Известия АлтГУ. 2017. № 4. С. 120–125.
- Matveev A.D., Grishanov A.N. Multigrid finite elements in the calculations of multilayer cylindrical shells // Siberian Journal of Science and Technology. – 2018. – Vol. 19, N 1. – P. 27–36.
- Gratsch T.A., Bathe K.-J. A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis // Computers and Structures. – 2005. – Vol. 83. – P. 235–265.
- 9. Babuska I., Whiteman J. R., Strouboulis T. Finite elements: an introduction to the method and error estimation. Oxford: Oxford University Press, 2011. 336 p.
- Zienkiewicz O.C., Zhu J.Z. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis // International Journal for Numerical Methods in Engineering. – 1987. – Vol. 24. – P. 337–357.
- Yunus S.M., Pawlak T.P., Wheeler M.J. Application of the Zienkiewicz-Zhu error estimator for plate and shell analysis // International Journal for Numerical Methods in Engineering. – 1990. – Vol. 29. – P. 1281–1298.

# AN EFFICIENT METHOD OF BUILDING APPROXIMATE SOLUTIONS USING MULTIGRID FINITE ELEMENTS

# Grishanov A.N.

Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

A method of building converging sequences of solutions in numerical tasks for calculating an elastic deformable body using multigrid finite elements (MFE) is considered. An advantage of the method is fixed dimensions of the main finite elements method (MFE) of a linear algebraic equations system in building approximate solutions. The method is analogous to the hp-version of the MFE-expansion of the dimension of the finite element presentation of the task pane. A posteriori error estimates are obtained of the basis of the ZZ method suggested by O.C. Zienkiewicz and J. Z. Zhu, in the norm  $L_2$ . When building precise solutions the ZZ method uses MFEs that take into account a heterogeneous material structure and form discrete models of small dimension.

To give an example, an analysis of solution sequence convergence as well as of error estimates in the numerical calculation of the stress-strain state of three-layered cylindrical shells under local loading is presented. It is demonstrated that using MFE generates converging sequences of approximate solutions in the norm  $L_2$  both in the traditional method of discretization grid segmentation (MFE h-version) and in the suggested method Based on the ZZ method a posteriori error estimates are made. Comparison of error estimates and the nature of convergence in two versions of finite-elemental discretization is made using three-grid finite elements. The use of MFE in the suggested method of building approximate solutions allows one to get small dimension MFE equations systems, which ensures computer resource saving in comparison with the traditional discretization method.

*Keywords*: a posteriori error estimates, discretization models, convergence of solution sequence, small error, elasticity, cylindrical shell, multigrid finite elements.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-47-57

#### REFERENCES

- 1. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., Zhu J.Z. *The finite element method: its basis and fundamentals.* Oxford, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2013. 715 p.
- 2. Reddy J.N. *Mechanics of laminated composite plates and shells. Theory and analysis.* New York, CRC Press, 2004. 831 p.
- Golovanov A.I., Tyuleneva O.I., Shigabutdinov A.F. *Metod konechnykh elementov v statike i dinamike tonkostennykh konstruktsii* [Finite element method in statics and dynamics of thin-wall constructions]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2006. 392 p.
- Kuz'min M.A., Lebedev D.L., Popov B.G. Raschety na prochnost' elementov mnogosloinykh kompozitnykh konstruktsii [Strength calculations of elements of multilayer composite structures]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2012. 341 p.
- Matveev A.D., Grishanov A.N. Raschet kompozitnykh tsilindricheskikh obolochek s primeneniem mnogosetochnykh elementov [Calculation of composite cylindrical shells using multigrid elements]. Vestnik Sibirskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta im. akademika M.F. Reshetneva – Vestnik SibGAU, 2017, no. 3, pp. 587–594.
- Matveev A.D., Grishanov A.N. Trekhmernye kompozitnye mnogosetochnye konechnye elementy obolochechnogo tipa [Three-dimensional composite multi-grid finite elements of shell-type]. *Izvestiya Altaiskogo gosudarstvennogo universiteta – The News of Altai State University*, 2016, no. 4, pp. 120–125.
- Matveev A.D., Grishanov A.N. Multigrid finite elements in the calculations of multilayer cylindrical shells. *Siberian Journal of Science and Technology*, 2018, vol. 19, no. 1, pp. 27– 36.
- 8. Gratsch T., Bathe K.-J. A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis. *Computers and Structures*, 2005, vol. 83, pp. 235–265.
- 9. Babuska I., Whiteman J.R., Strouboulis T. *Finite elements: an introduction to the method and error estimation*. Oxford, Oxford University Press, 2011. 336 p.
- Zienkiewicz O.C., Zhu J.Z. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1987, vol. 24, pp. 337–357.
- Yunus S.M., Pawlak S.M., Wheeler M.J. Application of the Zienkiewicz-Zhu error estimator for plate and shell analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1990, vol. 29, pp. 1281–1298.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ



Гришанов Александр Николаевич – родился в 1953 году, соискатель кафедры «Прочность летательных аппаратов» Новосибирского государственного технического университета. Область научных интересов: методы конечных элементов. Опубликовано 13 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса 20. E-mail: a\_grishanov@ngs.ru).

**Grishanov Alexander Nicolaevich** (b. 1953) – a degree seeking applicant at the department of aircraft strength, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on finite element methods. He is the author of 13 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: a\_grishanov@ngs.ru).

Статья поступила 03 мая 2018 г. Received May 03, 2018

To Reference:

Grishanov A.N. Effektivnyi metod postroeniya priblizhennykh reshenii s primeneniem mnogosetochnykh konechnykh elementov [An efficient method of building approximate solutions using multigrid finite elements]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2018, no. 3 (40), pp. 47–57. doi: 10.17212/1727-2769-2018-3-47-57.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

июль-сентябрь

№ 3 (40)

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК621.314

2018

# НЕПОСРЕДСТВЕННЫЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ ЧАСТОТЫ ДЛЯ СТАРТЕР-ГЕНЕРАТОРНОЙ СИСТЕМЫ МАРШЕВОГО ДВИГАТЕЛЯ

# М.А. Жарков, В.Е. Сидоров, Е.Б. Преображенский, М.В. Балагуров, Р.Ю. Дубкова, С.А. Харитонов

Новосибирский государственный технический университет

В последние годы наблюдается бурный рост исследований и разработок, связанных с реализацией концепции «Более электрический самолет». Данная концепция подразумевает кроссплатформенную интеграцию всевозможных авиационных систем, таких как гидравлическая, топливная, система кондиционирования, система электроснабжения, вспомогательная силовая установка ВСУ, маршевый двигатель и другие. Также концепция предусматривает уход от гидравлических, пневматических и механических узлов к электрическим системам, которые обладают меньшими потерями на преобразование энергии и имеют более высокий уровень регулирования. На борту среднемагистральных самолетов уже появились системы генерирования электрической энергии переменной частоты и постоянной величины генерируемого напряжения, в качестве примера можно привести такие самолеты как Boing-787, А-380 и новейший и перспективный отечественный самолет МС-21. В таких системах, в частности, используются синхронные генераторы с возбуждением от постоянных магнитов. В статье представлена стартер-генераторная система для маршевого двигателя летательного аппарата. Особенностью представленной системы является применение синхронного двигателя с постоянными магнитами (СДПМ) и полупроводникового преобразователя. Система с СДПМ позволяет использовать алгоритм наблюдателя на основе вычисления потокосцепления, благодаря которому появляется возможность отказаться от датчика скорости и датчика положения ротора, что уменьшает массогабаритные показатели и уменьшает количество информационных линий системы. Также наблюдатель предоставляет близкие к реальным значения противоЭДС синхронной машины, что позволяет повысить эффективность использования магнитоэлектрического генератора в качестве стартера. В статье представлены результаты математического моделирования системы в стартерном режиме работы.

*Ключевые слова*: стартер, генератор, система электроснабжения, маршевый двигатель, летательный аппарат, синхронный генератор, полупроводниковый преобразователь.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-58-73

#### Введение

Современные тенденции проектирования электротехнического оборудования летательных аппаратов сопряжены с реализацией концепции «Более электрический самолет» [1–4], в частности большое внимание уделяется совмещению функций стартера и системы генерирования электрической энергии в одном агрегате, который получил название «стартер-генератор» [5, 6]. Данное техническое решение позволяет удовлетворить возрастающие требования к энергоэффективности и надежности авиационных систем.

Рассматриваемая в статье система представлена на рис. 1.

В состав стартер-генераторной системы, изображенной на рисунке, входят:

ВСУ – Вспомогательная силовая установка;

МЭГ – Магнитоэлектрический генератор;

© 2018 М.А. Жарков, В.Е. Сидоров, Е.Б. Преображенский, М.В. Балагуров, Р.Ю. Дубкова, С.А. Харитонов

УВ – Управляемый выпрямитель;

МПСУ УВ – Микропроцессорная система управления управляемым выпрямителем;

ЗИ – Зависимый инвертор;

МПСУ ЗИ – Микропроцессорная система управления зависимым инвертором; СДПМ – Синхронный двигатель с возбуждением от постоянных магнитов.



*Puc.* 1 – Структурная схема стартер-генераторной системы *Fig.* 1 – Structural diagram of a starter-generator system

Авиационная вспомогательная силовая установка представляет собой относительно небольшой газотурбинный двигатель, который через редукторную систему приводит в движение генераторы и гидронасосы, необходимые для запуска маршевого двигателя и первоначального обеспечения электроэнергией бортового оборудования [7]. Источником электроэнергии системы является МЭГ [8], который приводится во вращение от ВСУ. Маршевый двигатель также представляет собой газотурбинный двигатель, имеющий собственный синхронный генератор с постоянными магнитами, предназначенный для обеспечения электроэнергией летательного аппарата во время полета. В рассматриваемой системе предлагается использовать СДПМ в качестве стартер-генератора [9], а для реализации режима стартера будет использован непосредственный преобразователь частоты (НПЧ), который позволит синхронному двигателю достигнуть необходимой скорости вращения за установленное время. НПЧ состоит из трехфазного тиристорного выпрямителя и зависимого тиристорного инвертора. МПСУ инвертора и выпрямителя имеют общий канал связи для синхронизации своей работы.

Данная система обладает следующими преимуществами: 1) высокая удельная мощность; 2) отсутствие датчиков скорости электрических машин для синхронизации систем управления зависимым инвертором; 3) отсутствие фильтров в звене постоянного тока; 4) отсутствие коммутирующих конденсаторов у зависимого инвертора.

Все эти особенности направленны на уменьшение массогабаритных показателей и увеличение энергоэффективности и надежности, что является неотъемлемыми требованиями при построении авиационных систем.

## 1. Описание системы управления и алгоритмов

Система управления выпрямителем, как и инвертором, представляет классическую трехканальную систему импульсно-фазового управления (СИФУ) с диапазоном регулирования равным 120 эл. гр. СИФУ осуществляет синхронизацию с питающей сетью (в случае управления выпрямителем) или напряжением двигателя (в случае управления инвертором). В системе управления выпрямителем (рис. 2) модулирующий сигнал ( $U_{\rm M}$ ) задается из двухконтурной системы регулирования. Внешний контур – это контур по скорости, задающий уставку на ток DC-звена, а внутренний контур осуществляет регулирование тока Idc.



*Puc.* 2 – Структурная схема системы управления выпрямителем *Fig.* 2 – Structural diagram of the rectifier control system

Процесс работы системы можно разделить на два этапа.

#### Режим асинхронно-частотного пуска

Этот режим является начальным в процессе разгона двигателя. В данном режиме синхронный двигатель разгоняется до 15% от своей максимальной скорости.

Регулятор скорости в системе управления выпрямителя в этом режиме не работает. Работает только внутренний контур регулирования выходного тока выпрямителя с фиксированным заданием. Это дает возможность поддерживать постоянный момент двигателя и увеличивать действующие значение первой гармоники напряжения, прикладываемого к двигателю, что позволяет преодолеть противоЭДС машины во время разгона [10].

Данный режим осуществляет разгон синхронного двигателя, при котором, вектор подаваемого на двигатель напряжения не зависит от положения ротора и задает скорость вращения ротора двигателя. Принудительный режим обоснован тем, что для синхронизации СИФУ инвертора необходимо знать значение скорости машины и ее ЭДС, а как было отмечено выше, эти значения рассчитываются с помощью наблюдателя, работа которого затруднена на низких оборотах. Согласно алгоритму скорость вращения вектора напряжения линейно возрастает, постоянно опережая вектор ЭДС машины. Это отражено в векторной диаграмме в d-q координатах (рис. 3).

Так как отсутствует фильтр в звене постоянного тока, присущий классическим схемам с выпрямителем, то напряжения звена постоянного тока, как и сам ток, периодически спадают до нуля при переключении тиристоров выпрямителя. В связи с этим СИФУ инвертора заполняет весь диапазон работы каждого тиристора, составляющий 120 эл. гр., короткими импульсами для повторного открытия тиристоров при обрыве тока.

Отсутствие коммутирующих конденсаторов инвертора привело к следующему алгоритмическому решению: для осуществления коммутации тиристоров инвертора кратковременно выключается выпрямитель, т. е. прекращается подача отпирающих импульсов. Во время такой паузы выпрямителя и происходит переключение тиристоров, предотвращая таким образом короткое замыкание в стойке инвертора. Длительность паузы зависит от времени выключения тиристоров выпрямителя. Синхронизация работы СИФУ инвертора и выпрямителя происходит при помощи канала связи, реализованного на основе протокола CAN.



*Puc. 3* – Векторная диаграмма пуска синхронного двигателя *Fig. 3* – Vector diagram of a synchronous motor start-up

## Режим синхронного пуска

После достижения двигателем 15 % от максимальной скорости система переходит в замкнутый режим управления. Этот режим отличается тем, что в работу вступает наблюдатель, который рассчитывает значение скорости и восстанавливает ЭДС машины. СИФУ инвертора синхронизируется по полученной ЭДС, формируя вектор напряжения, совпадающий с вектором ЭДС, т. е. исключается дополнительная реактивная составляющая потребляемой мощности. Слежение за вектором ЭДС двигателя исключает факт опрокидывания машины. Система управления выпрямителем переходит в двухконтурное управление: внешний контур – регулирования скорости, внутренний – тока Idc. Система управления выпрямителем использует значение скорости, получаемое от МПСУ инвертора, ПИ-регулятор формирует задание для внутреннего регулятора таким образом, чтобы на валу машины создавался момент, необходимый для обеспечения заданного темпа нарастания скорости [11]. После достижения заданной скорости система поддерживает ее на заданном уровне, регулируя ток двигателя, необходимый для преодоления момента нагрузки.

## 2. Описание наблюдателя

Как уже отмечалось, особенностью описываемой системы является отсутствие датчика скорости двигателя для синхронизации системы управления инвертором. Для получения значения скорости и угла поворота ротора используется математический алгоритм наблюдателя на основе вычисления потокосцепления [12].

Данный тип наблюдателей является пассивным, так как данный наблюдатель восстанавливает вектор состояния системы на основании полученных косвенных измерений. В активных методах наблюдения предполагают внесение в систему дополнительных возмущений, и реакция системы на эти возмущения позволяет оценить необходимый параметр системы [13].

В отличие от остальных типов наблюдателей наблюдатель на основе вычисления потокосцепления не обладает сложными математическими операциями в своей основе. Также данный наблюдатель восприимчив к зашумленности входных сигналов, как и остальные типы пассивных наблюдателей, наблюдатель на основе потокосцепления не имеет возможности работы на низких скоростях машины изза низкого уровня напряжения статора машины [14].

Работа алгоритма наблюдателя основывается на вычислении мгновенных значений проекций вектора потокосцепления на оси α-β координат, используя выражения:

$$\Psi_{\alpha} = \int (U_{\alpha} - i_{\alpha} r_s) dt - L_s i_{\alpha} = \Psi_m \cos(\theta); \qquad (1)$$

$$\Psi_{\beta} = \int (U_{\beta} - i_{\beta} r_s) dt - L_s i_{\beta} = \Psi_m \sin(\theta),$$
(2)

где  $r_s$  – известное значение активного сопротивления обмоток статора;  $L_s$  – индуктивность обмоток.

Для уменьшения переходного процесса и фильтрации шумов в сигналах токов и напряжений интеграторы вычисления проекций потокосцепления (1 и 2) охватим неглубокой отрицательной обратной связью. Отрицательная связь реализуется на основе ПИ-регуляторов с большой постоянной времени [15]. Тогда выражения потокосцепления в пространстве Лапласа примут следующий вид:

$$\Psi_{\alpha} = \left[\frac{1}{s}(U_{\alpha} - r_s i_{\alpha}) - L_s i_{\alpha}\right] \frac{T_{\Pi} s^2}{K_{\Pi} + K_{\Pi} T_{\Pi} s + T_{\Pi} s^2};$$
(3)

$$\Psi_{\beta} = \left[\frac{1}{s}(U_{\beta} - r_s i_{\beta}) - L_s i_{\beta}\right] \cdot \frac{T_{\Pi}s^2}{K_{\Pi} + K_{\Pi}T_{\Pi}s + T_{\Pi}s^2},\tag{4}$$

где  $K_{\Pi}$  – коэффициент пропорциональности ПИ-регулятора;  $T_{\Pi}$  – постоянная времени ПИ-регулятора; *s* – переменная преобразования Лапласа.

Для исключения влияния изменения амплитуды токов и напряжений машины приведем амплитуду проекций потокосцепления к единичному значению, разделив на модуль вектора потокосцепления:

$$\Psi_{\alpha}' = \frac{\Psi_{\alpha}}{\sqrt{\Psi_{\alpha}^{2} + \Psi_{\beta}^{2}}};$$
(5)

$$\Psi'_{\beta} = \frac{\Psi_{\beta}}{\sqrt{\Psi_{\alpha}^{2} + \Psi_{\beta}^{2}}}.$$
 (6)

Это позволит перейти в процессе вычисления скорости к безразмерным величинам.

Угол поворота ротора равен углу поворота вектора потокосцепления и может быть вычислен следующим образом:

$$\theta = \operatorname{arctg}\left(\frac{\Psi_{\beta}}{\Psi_{\alpha}}\right). \tag{7}$$

Разработка системы управления была направлена на использование ее с применением микроконтроллеров с относительно небольшими вычислительными мощностями, так как большинство микроконтроллеров не имеет в своем математическом аппарате функцию «арктангенс». Угол поворота ротора может быть вычислен с использованием следящего контура фазовой автоподстройки частоты (СКФАЧ).

Принцип работы СКФАЧ опирается на априорное условие, что вектор потокосцепления вычислен верно, если его проекция на мнимую ось вращающейся системы координат d-q равна нулю:

$$\operatorname{Im}(\Psi_m) \approx 0. \tag{8}$$

Используя преобразование, позволяющее перейти из системы координат  $\alpha$ - $\beta$  во вращающуюся систему d-q координат, получим выражение для вычисления проекции вектора потокосцепления на мнимую ось:

$$Im(\Psi_m) = \Psi_\beta \cos(\theta) - \Psi_\alpha \sin(\theta) .$$
(9)

Условие, определяемое выражением (9), будет выполняться, если разница между реальным углом поворота ротора и вычисляемым будет равна нулю [16]. Данное условие отслеживается с помощью ПИ-регулятора, формирующего в качестве своего выходного сигнала значение скорости вращения ротора:

$$\omega = \operatorname{Im}(\Psi_m) K_s \left( 1 + \frac{1}{T_s s} \right), \tag{10}$$

где  $K_s$  – коэффициент пропорциональности;  $T_s$  – постоянная времени интегрирования; s – переменная преобразования Лапласа. Интегрируя выражение (10), можно получить значение угла поворота ротора

$$\theta = \omega \frac{1}{s} \,. \tag{11}$$

Полученная структура наблюдателя изображена на рис. 4.

ЭДС машины вычисляется с использованием функции «синус» из полученного значения угла положения ротора.



Рис. 4 – Структура наблюдателя вычисления угла поворота ротора на основе потокосцепления

Fig. 4 – The structure of the observer for calculating a rotation angle of the rotor based on the flux linkage

## 3. Моделирование

Моделирование проводилось в программном пакете PSIM, реализованная модель была максимально приближена к реальному устройству, в том числе была создана дискретная система управления на основе DLL-блока, с помощью которого реализуется имитация выполнения алгоритмов, написанных на языке программирования С.

Система рассчитывалась на работу синхронного двигателя с возбуждением от постоянных магнитов со следующими параметрами:

номинальная мощность 100 кВт;

максимальная мощность 150 кВт;

номинальное действующее напряжение фазы 115 В;

число фаз 3;

частота напряжения 400 Гц;

номинальная скорость вращения 24000 об/мин;

число пар полюсов 1;

момент инерции 0,014 кг  $\cdot$  м<sup>2</sup>.

Система питается от МЭГ, входящего в состав вспомогательной силовой установки, с максимальной мощностью 150 кВт и качеством напряжения, регламентированным по ГОСТ 54073–2010. Тиристоры, входящие в состав силовой схемы, были выбраны типа ТБ243-500-15, исходя из расчета частоты переключения, максимально возможному среднему протекающему току и максимальному обратному напряжению. На рис. 5 представлена имитационная модель силовой схемы преобразователя. Согласно принципу построения систем генерирования электрической энергии для летательных аппаратов существует необходимость в соединении нейтрали. Это приводит к протеканию через двигатель токов, кратных третьей гармонике, и дополнительному разогреву обмоток, но не влияет на создаваемый момент двигателя.



*Puc.* 5 – Математическая модель силовой части стартер-генераторной системы *Fig.* 5 – A mathematical model of the power part of the starter-generator system

Для подтверждения корректной работы наблюдателя в модель силовой схемы добавлен датчик скорости и датчик положения ротора. Модель блоков МПСУ представлена на рис. 6. Блоки МПСУ и силовая схема соединены сигнальными линиями.





На рис. 7 представлена диаграмма изменения скорости машины во время ее разгона, а также диаграммы фазного тока машины и тока DC-звена.

В течение первых 1,8 секунды система работает в режиме принудительного разгона. При этом, как видно на диаграмме, скорость машины колеблется. Это связано с тем, что в режиме принудительного разгона система управления разомкнута, т.е. нет регулирования скорости, а также угол поворота вектора подаваемого напряжения, не зависит от угла поворота ротора. В связи с этим действующее значение тока синхронного двигателя возрастает с увеличением скорости.





*Fig.* 7 – Waveforms of the speed change of the machine shaft, the current in the DC link and the phase current of the stator

После достижения двигателем скорости вращения 2700 об/мин система переходит в замкнутый режим работы. К этому моменту времени наблюдатель пришел в устойчивое состояние и значение рассчитываемой скорости равно реальной скорости машины. СИФУ инвертора синхронизируется с ЭДС синхронного двигателя, восстановленной наблюдателем. Это существенно снижает уровень потребляемого тока. Как видно на диаграмме, действующее значение тока машины сохранится на постоянном уровне, который создает момент на валу, разгоняющий двигатель с заданным темпом.

За 7,3 секунды двигатель достигает заданной скорости 24 000 об/мин. Уровень потребляемого тока снижается до значения, необходимого для поддержания скорости.

На рис. 8 и 9 показаны диаграммы скорости, первой гармоники тока фазы двигателя и тока Idc при скорости 2100 и 24 000 об/мин соответственно.



*Рис.* 8 – Осциллограммы фазного тока статора и тока DC-звена при скорости вала 2100 об/мин

*Fig.* 8 – Oscillograms of the phase current of the stator and the current of the DC link at a shaft speed of 2100 rpm





*Fig. 9* – Oscillograms of the phase current of the stator and the current of the DC link at a shaft speed of 24,000 rpm

Из-за отсутствия фильтров в звене постоянного тока ток Idc пульсирует с периодическими нулевыми паузами. Инвертор непосредственно передает ток Idc в двигатель, в связи с этим ток фазы двигателя представляет из себя сложную форму. При выделении первой гармоники из формы тока видно, что амплитудное значение первой гармоники тока вполовину меньше амплитуды исходной формы тока.

При исследовании работы наблюдателя в генераторном режиме синхронной машины выяснилось, что наблюдатель с точностью 0,7 % рассчитывает значение угла поворота ротора и предельно точно фазу ЭДС машины, результаты показаны на рис.10. Восстановленная ЭДС машины имеет амплитуду, определяемую пользователем, и может быть задана любой величины.



*Puc.* 10 – Осциллограммы работы наблюдателя *Fig.* 10 – Oscillograms of the observer's work

Восстановленный сигнал скорости машины имеет пульсации величиной 9,7 % относительно средней величины. Пульсации связаны с использованием следящего контура фазовой автоподстройки частоты для вычисления скорости. Среднее значение получаемой скорости вычисляется с точностью 0,7 %. Полученная точность вычисления говорит о том, что параметры наблюдателя были вычислены верно.

При работе преобразователя с использованием наблюдателя СИФУ синхронизируется с ЭДС машины, полученной при помощи наблюдателя (рис. 11).





Это позволяет исключить влияние искажений и зашумленности напряжения, а также формировать вектор напряжения, синфазный с вектором ЭДС машины.

На рис.12 показаны диаграммы подаваемых импульсов на тиристоры инвертора (F'), выпрямителя (F), запрещающего импульса (F\_D) и тока Idc. Из диаграммы видно, что при переключении тиристоров инвертора подается запрещающий импульс в СИФУ выпрямителя, блокирующий импульсы выпрямителя. Ток Idc спадает до нуля – это позволяет работающему тиристору инвертора выключиться, а следующему тиристору – включиться.



*Puc.* 12 – Импульсы управления при совместной работе выпрямителя и инвертора *Fig.* 12 – Control impulses in simultaneous operation of the rectifier and inverter

#### Заключение

В данной работе показана возможность создания стартер-генераторной системы для маршевого двигателя летательного аппарата на основе синхронного двигателя с постоянными магнитами и полупроводникового преобразователя. Предложена и реализована система управления на основе наблюдателя, восстанавливающего ЭДС машины и угол положения ротора. Адаптивный наблюдатель на основе потокосцепления позволяет отказаться от датчика скорости и датчика положения ротора, что уменьшает массогабаритные показатели и уменьшает количество информационных линий системы. Также наблюдатель предоставляет близкие к реальным значения ЭДС синхронной машины, что дает возможность эффективно использовать магнитоэлектрический генератор. Реализованы алгоритмы системы управления и проведено математическое моделирование системы в стартерном режиме работы.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Электрооборудование летательных аппаратов. В 2 т. Т. 1: учебник для вузов / под ред. С.А. Грузкова. М.: Изд-во МЭИ, 2005. 568 с.
- Волокитина Е.В. Исследования по созданию системы генерирования и запуска маршевого двигателя в концепции полностью электрифицированного самолета. Ч. 1 // Электроника и электрооборудование транспорта. – 2011. – № 4. – С. 29–33.
- Электрический самолет. Концепция и технологии / А.В. Лёвин, С.М. Мусин, С.А. Харитонов, К.Л. Ковелев, А.А. Герасин, С.П. Халютин; под ред. С.М. Мусина. – Уфа: УГАТУ, 2014. – 388 с.
- 4. Электрический самолет: от идеи до реализации / А.В. Лёвин, И.И. Алексеев, С.А. Харитонов, Л.К. Ковалев. М.: Машиностроение, 2010. 288 с.
- 5. Исмагилов Ф.Р. Имитационная модель авиационного стартер-генератора // Авиакосмическое приборостроение. – 2014. – № 9. – С. 27–32.
- Математическая модель системы запуска для трехкаскадного синхронного генератора с демпферной обмоткой / С.А. Харитонов, Д.В. Коробков, М.А. Жарков, В.С. Симин, П.А. Бачурин // Труды Международной шестнадцатой научно-технической конференции «Электроприводы переменного тока», 05–09 октября 2015 г. – Екатеринбург, 2015. – С. 153–158.
- 7. Харитонов С.А. Система «синхронный генератор с возбуждением от постоянных магнитов активный выпрямитель» (математическая модель) // Электротехника. 2009. № 12. С. 33–41.
- Бут Д.А. Бесконтактные электрические машины: учебное пособие для электромеханических и электроэнергетических специальностей вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высшая школа, 1990. 416 с.
- Харитонов С.А. Электромагнитные процессы в системах генерирования электрической энергии для автономных объектов: монография. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2011. – 536 с.
- Харитонов С.А. Электромагнитные процессы в системе генерирования постоянного тока типа "магнитоэлектрический генератор – выпрямитель" при переменной частоте вращения вала генератора // Научный вестник НГТУ. – 1999. – № 1. – С. 133–162.
- Reshetnikov A.N. Permanent magnet machine control of starter-generator // 14th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices EDM 2013, Erlagol, Altai. Novosibirsk, 2013. P. 330–332. doi: 10.1109/EDM. 2013.6642007.
- Zharkov M.A., Kharitonov S.A., Simin V.S. Electric starter mode of synchronous generator with permanent magnets //14th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices EDM 2013, Erlagol, Altai. Novosibirsk, 2013. P. 392–394. doi: 10.1109/EDM.2013.6642021.

- Applying the estimation system for synchronization of thyristor rectifier operating from the permanent magnet synchronous machine / V.E. Sidorov, D.V. Korobkov, M.A. Zharkov, M.V. Balagurov, A.G. Volkov // 18th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices EDM 2017, Erlagol, Altai. – Novosibirsk, 2017. – P. 579–583. – doi: 10.1109/EDM.2017.7981821.
- 14. Yuan Q. Sensorless control of permanent magnet synchronous motor with stator flux estimation // Journal of Computers. – 2013. – Vol. 8, N 1. – P. 108–112.
- 15. **Нос О.В.** Построение алгоритмов синхронизации трехфазных напряжений автономного инвертора и сети // Автометрия. – 2017. – Т. 53, № 4. – С. 66–73.
- Клиначев Н.В., Кулева Н.Ю., Воронин С.Г. Определение углового положения ротора синхронного двигателя с возбуждением от постоянных магнитов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Энергетика. – 2014. – Т. 14, № 2. – С. 49–54.

# DIRECT FREQUENCY CONVERTER FOR THE STARTER-GENERATOR SYSTEM OF THE MAIN PROPULSION ENGINE

# Zharkov M.A., Sidorov V.E., Preobrazhensky E.B., Balagurov M.V., Dubkova R.Yu., Kharitonov S.A. Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

In recent years, there has been a rapid growth in research and development related to the implementation of the concept of "More Electric Aircraft" (MEA). This concept implies crossplatform integration of various aviation systems, such as hydraulic, fuel, air conditioning, power supply system, APU, main engine and others. Also, the concept provides for care from hydraulic, pneumatic and mechanical units to electrical systems that have less energy conversion losses, and have a higher level of process control. There are already systems for generating electric energy of variable frequency and constant voltage on board the medium-haul aircraft. This excludes devices that provide frequency stabilization of the system. Such aircraft as Boing-787, A-380 and the newest Russian aircraft MC-21 are examples. In such systems, in particular, synchronous generators with permanent-magnet excitation are used. The article presents a starter-generator system for the aircraft flight engine. A feature of the presented system is the use of a synchronous motor with permanent magnets (PMSM) and a semiconductor converter. The system with PMSM allows the use of the adaptive observer algorithm based on flux linking, which makes it possible to abandon the speed sensor and the rotor position sensor. This reduces the weight and dimensions and reduces the number of information lines of the system. Also, the observer provides values of a synchronous machine close to real EMF, which makes it possible to effectively use a magnetoelectric generator. The article presents the results of mathematical modeling of the system in the starter mode of operation.

*Keywords*: starter, generator, power supply system, main engine, aircraft, synchronous generator, semiconductor converter.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-58-73

#### REFERENCES

- 1. Gruzkova S.A., ed. *Elektrooborudovanie letatel'nykh apparatov*. V 2 t. T. 1 [Electrical equipment of aircraft. In 2 vol. Vol. 1]. Moscow, MPEI Publ., 2005. 568 p.
- Volokitina E.V. Issledovaniya po sozdaniyu sistemy generirovaniya i zapuska marshevogo dvigatelya v kontseptsii polnost'yu elektrifitsirovannogo samoleta. Ch. 1 [Investigations of the system of generating and starting of mid-flight engine in "all electric aircraft" concept. Pt. 1]. Elektronika i elektrooborudovanie transporta – Electronics and electrical equipment of transport, 2011, no. 4, pp. 29–33.

- Levin A.V., Musin S.M., Kharitonov S.A., Kovalev K.L., Gerasin A.A., Khalyutin S.P. *Elektricheskii samolet. Kontseptsiya i tekhnologii* [Electric aircraft. The concept and technology]. Ufa, UGATU Publ., 2014. 388 p.
- Levin A.V., Alekseev I.I., Kharitonov S.A., Kovalev L.K. *Elektricheskii samolet: ot idei do realizatsii* [Electric aircraft: from idea to realization]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 2010. 288 p.
- Ismagilov F.R. Imitatsionnaya model' aviatsionnogo starter-generatora [Simulation model of an aviation starter generator]. Aviakosmicheskoe priborostroenie – Aerospace Instrument-Making, 2014, no. 9, pp. 27–32.
- 6. Kharitonov S.A., Korobkov D.V., Zharkov M.A., Simin V.S., Bachurin P.A. [Mathematical model of the starter system for a three-stage synchronous generator with a damping cage]. *Trudy Mezhdunarodnoi shestnadtsatoi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii "Elektroprivody peremennogo toka"* [Proceeding of the sixteenth international scientific-technical conference "Alternating current electrical drives"], Ekaterinburg, 2015, pp. 153–158. (In Russian).
- Kharitonov S.A. Sistema "sinkhronnyi generator s vozbuzhdeniem ot postoyannykh magnitov – aktivnyi vypryamitel" (matematicheskaya model') [Permanent-magnet synchronous generator-active rectifier system: mathematical model]. *Elektrotekhnika – Russian Electrical Engineering*, 2009, no. 12, pp. 33–42. (In Russian).
- 8. But D.A. *Beskontaktnye elektricheskie mashiny* [Non-contact electrical machines]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1990. 416 p.
- 9. Kharitonov S.A. *Elektromagnitnye protsessy v sistemakh generirovaniya elektricheskoi energii dlya avtonomnykh ob"ektov* [Electromagnetic processes in power generation systems for autonomous objects]. Novosibirsk, NSTU Publ., 2011. 536 p.
- 10. Kharitonov S.A. Elektromagnitnye protsessy v sisteme generirovaniya postoyannogo toka tipa "magnitoelektricheskii generator vypryamitel" pri peremennoi chastote vrashcheniya vala generatora [Electromagnetic processes in the system of generating a direct current of the type "magnetoelectric generator-rectifier" at a variable frequency of rotation of the generator shaft]. Nauchnyi vestnik Novosibirskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta Science bulletin of the Novosibirsk state technical university, 1999, no. 1, pp. 133–162.
- Reshetnikov A.N. Permanent magnet machine control of starter-generator. 14th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices EDM 2013, Erlagol, Altai, 2013, pp. 330–332. doi: 10.1109/EDM.2013.6642007.
- Zharkov M.A., Kharitonov S.A., Simin V.S. Electric starter mode of synchronous generator with permanent magnets. *14th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices EDM 2013*, Erlagol, Altai, 2013, pp. 392–394. doi: 10.1109/EDM.2013.6642021.
- Sidorov V.E., Korobkov D.V., Zharkov M.A., Balagurov M.V., Volkov A.G. Applying the estimation system for synchronization of thyristor rectifier operating from the permanent magnet synchronous machine. *The 18 International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices EDM 2017*, Erlagol, Altai, 2017, pp. 579–583. doi: 10.1109/EDM.2017.7981821.
- 14. Yuan Q. Sensorless control of permanent magnet synchronous motor with stator flux estimation. *Journal of Computers*, 2013, vol. 8, no. 1, pp. 108–112.
- Nos O.V. Postroenie algoritmov sinkhronizatsii trekhfaznykh napryazhenii avtonomnogo invertora i seti [Construction of algorithms for synchronization of three-phase voltages of an autonomous inverter and a network]. Avtometriya – Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing, 2017, vol. 53, no. 4, pp. 66–73. (In Russian).
- Klinachev N.V., Kuleva N.Yu., Voronin S.G. Opredelenie uglovogo polozheniya rotora sinkhronnogo dvigatelya s vozbuzhdeniem ot postoyannykh magnitov [Rotor position estimation for permanent magnet synchronous motor]. *Vestnik YuUrGU. Seriya: Energetika – Bulletin of South Ural State University. Series: Power Engineering*, 2014, vol. 14, no. 2, pp. 49–54.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Жарков Максим Андреевич – родился в 1988 году, ведущий инженер-конструктор, Институт силовой электроники, НГТУ. Область научных интересов: силовая электроника, авиационные системы генерирования, электропривод. Опубликовано 20 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. E-mail: maks.zharkoff@yandex.ru).

Zharkov Maksim Andreevich (b. 1988) – leading design engineer, Institute of Power Electronics, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on power electronics, aircraft generating systems, and electric drive. He is the author of 20scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: maks.zharkoff@yandex.ru).



Сидоров Вадим Евгеньевич – родился в 1995 году, магистрант, НГТУ. Область научных интересов: электропривод, DC-DC преобразователи, силовая электроника. Опубликовано 3 научные работы. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. E-mail: reksarph@gmail.com).

**Sidorov Vadim Evgenievich**(b. 1995) – master student, NSTU. His research interests are currently focused on electric drive, DC-DC converters, and power electronics. He is the author of three scientific papers.(Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: reksarph@gmail.com).



Преображенский Евгений Борисович – родился в 1947 году, заведующий лабораториями кафедры электроники и электротехники, Новосибирский государственный технический университет. Область научных интересов: силовая электроника, системы хранения и генерирования электрической энергии.Опубликовано более 50 научных работ. (Адрес: Россия, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. E-mail: preob@ngs.ru).

**Preobrazhensky Evgeny Borisovich.** – head of the laboratories, Department of Electronics and Electrical Engineering, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on power electronics, power storage and generation systems. He is author of 50 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: preob@ngs.ru).



Балагуров Максим Владимирович – родился в 1990 году, ассистент, кафедра вычислительной техники, Новосибирский государственный технический университет. Область научных интересов: силовая электроника, авиационные системы генерирования, системы накопления электрической энергии. Опубликовано 22 научные работы. (Адрес: Россия, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. Е-mail: balagurov@corp.nstu.ru).

**Balagurov Maksim Vladimirovich** (b. 1990) – assistant lecturer at the department of computer engineering, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on power electronics, aircraft power generation systems and energy storage systems. He is the author of 22 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: balagurov@corp.nstu.ru).


Дубкова Регина Юрьевна – родилась в 1991 году, инженер 2 категории, Институт силовой электроники, НГТУ. Область научных интересов: силовая электроника, авиационные системы генерирования, непосредственные преобразователи частоты. Опубликовано 10 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. E-mail: sarakhanova\_nstu@mail.ru).

**Dubkova Regina Yurievna** (b. 1991) – engineer, Institute of Power Electronics, NSTU. Her research interests are currently focused on power electronics, aircraft generating systems, and direct frequency converters. She is the author of 10 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: sarakhanova nstu@mail.ru).



Харитонов Сергей Александрович – родился в 1950 году, д-р техн. наук, профессор, заведующий кафедрой электроники и электротехники, директор Института силовой электроники Новосибирского государственного технического университета. Область научных интересов: силовая электроника, авиационные системы генерирования, непосредственные преобразователи частоты, системы накопления электрической энергии. Опубликовано более 300 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. E-mail: Kharit1@yandex.ru).

Kharitonov Sergey Aleksandrovich (b. 1950) – Doctor of Science (Eng.), professor, head of the Department of Electronics and Electrical Engineering, Director of the Power Electronics Institute, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on power electronics, aircraft generating systems, and direct frequency converters. He is he author of 300 scientific papers.(Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: Kharit1@yandex.ru).

Статья поступила 19 февраля 2018 г. Received February 19, 2018

To Reference:

Zharkov M.A., Sidorov V.E., Preobrazhensky E.B., Balagurov M.V., Dubkova R.Yu., Kharitonov S.A. Neposredstvennyi preobrazovatel' chastoty dlya starter-generatornoi sistemy marshevogo dvigatelya [Direct frequency converter for the starter-generator system of the main propulsion engine]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2018, no. 3 (40), pp. 58–73. doi: 10.17212/1727-2769-2018-3-58-73.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

2018 июль-сентябрь

№ 3 (40)

\_\_\_\_\_

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК:519.854, 519.857, 519.863

## ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ ОПТИМАЛЬНОГО ОПЕРАТИВНОГО УПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЕМ ВОЗДУШНЫХ СУДОВ АВИАКОМПАНИИ

#### Ю.А. Мезенцев, И.В. Эстрайх

Новосибирский государственный технический университет

Представлены оригинальные постановка и алгоритмы решения одной из прикладных задач теории расписаний. Рассматриваемая задача оптимального управления флотом авиакомпании заключается в таком оперативном регулировании расписаний, которое минимизирует потери авиакомпании от нарушений заданных графиков движения воздушных судов. Данная задача обладает NP-полнотой и не может быть решена точно для скольконибудь реальных размерностей. Предложен параметрический эффективный алгоритм ее приближенного решения, являющийся расширением подобного алгоритма оптимизации расписаний системы несвязанных параллельных приборов с задержками начала обслуживания по критерию быстродействия (C<sub>max</sub>). Параметр алгоритма задает число анализируемых промежуточных вариантов расписания на каждом шаге и соответственно число отсеиваемых локально наихудших вариантов. Это позволяет гибко регулировать общую трудоемкость и точность получаемых корректирующих расписаний. Приведены содержательный пример применения алгоритма и статистика его тестирования на данных порождающей задачи по критерию Cmax. В дополнение к параметрическому алгоритму предложен улучшающий обменный алгоритм, позволяющий на завершающих шагах параметрического алгоритма конструировать улучшенные по критерию C<sub>max</sub> расписания. Приведены результаты вычислительных экспериментов с применением обоих алгоритмов на сгенерированных примерах приближенных к реальным размерностей, которые показали высокую общую эффективность подхода.

Ключевые слова: оптимальное регулирование расписаний, назначения флота воздушных судов, критерий быстродействия, эффективный параметрический алгоритм, дискретная оптимизация.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-74-90

### Введение

Одной из традиционных прикладных сфер применения методов оптимизации является планирование деятельности авиакомпаний. В этом случае планирование включает в себя ряд этапов, важнейшими из которых являются составление графиков движения, назначения флота воздушных судов (ВС), определение маршрутов, и составление экипажей. Подробный обзор по теме можно найти, например, в работе Grönkvist (2005) [1], разбор формальных постановок и основных подходов к решению основных задач можно найти в обзоре Sherali, Bish, Zhu (2006) [2], а также во множестве работ, посвященных отдельным направлениям прикладных исследований из числа перечисленных выше [3–23].

В частности, преимущественно задачам и алгоритмам назначения BC (Airline Fleet Assignment Modelling, или FAM) посвящены работы [3–7]. Преимущественно задачам маршрутизации Aircraft Routing Problem (ARP) посвящены публикации [8–16]. Совместное решение обеих задач (FAM и ARP) рассматривается, например, в работах [17–19]. Наконец, наиболее близкие к теме настоящей статьи

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект \No~2.2327.2017/PCh); НГТУ (темплан НИР НГТУ), проект ТП-ЭИ-1 17.

<sup>© 2018</sup> Ю.А. Мезенцев, И.В. Эстрайх

работы [1, 5, 20–22] посвящены задаче оптимального регулирования действующих расписаний, включая изменения маршрутов и назначений флота ВС.

Вполне очевидно, что перечисленные выше задачи тесно связаны между собой. Все их актуальные формальные представления принадлежат к классу труднорешаемых задач смешанного программирования. Используемые подходы для поиска приближенных решений опираются на классические схемы: методы лагранжевой релаксации, генерации столбцов и декомпозиции Бендерса, применяются известные вычислительные инструменты комбинаторной оптимизации и методов отсечений, программирование в ограничениях [1, 2].

Основой настоящей работы является оригинальная постановка в виде задачи оптимизации расписаний системы несвязанных параллельных приборов (ВС) с задержками начала обслуживания заявок (рейсов), адаптированная к рассматриваемой задаче оперативного управления движением ВС, которая предложена авторами в работах [23–25], а также специальный параметрический эффективный алгоритм ее приближенного решения [25, 26].

## 1. Содержательная постановка задачи оптимального оперативного управления графиками полетов рейсов авиакомпании

Исходные данные – расписание движения воздушных судов авиакомпании, нормативы времени полета всех типов воздушных судов, времени обслуживания и подготовки рейсов для всех типов воздушных судов.

Оперативная информация: о задержках рейсов на любой заданный момент времени во всех аэропортах.

Тогда содержательно задача оперативного управления заключается в таком перераспределении парка воздушных судов (ВС) по рейсам авиакомпании за планируемый период, которое минимизирует максимальное суммарное отклонение от исходного графика движения всего парка воздушных судов авиакомпании при выполнении всех условий исходного графика по пассажиропотоку, числу рейсов, нормативов обслуживания.

# 2. Формальная постановка задачи оптимального оперативного управления назначениями и графиком рейсов авиакомпании

Введем условные обозначения:

$$\begin{split} l &- \text{номер порта, } l \in L ,\\ i &- \text{номер рейса, } i \in I_l , \bigcup_{l \in L} I_l = I , \ I_l \bigcap I_{l'} = \emptyset, \forall l, l' \in L ,\\ s &- \text{тип BC, } s \in S ,\\ j &- \text{номер BC, } j \in J_s , \bigcup_{s \in S} J_s = J , \ J_s \bigcap J_{s'} = \emptyset, \forall s, s' \in S ,\\ t_i^0 &- \text{расписание вылета } i\text{-го рейса. } i \in I_l , \ \forall l \in L , \ T^0 = \left\| t_i^0 \right\|, \end{split}$$

 $\tau_i^0 - \phi$ актическая задержка *i* -го рейса на момент составления расписания,  $\tau_i^0 \ge 0$ ,  $i \in I_l$ ,  $\forall l \in L$ ,  $T^0 = \|\tau_i^0\|$ ,

 $t_i^0 + \tau_i^0$  – возможное фактическое время вылета рейса *i* в начальный момент времени построения расписания,

 $t_{i,j}$  – время обслуживания, подготовки и полета рейса i BC j,  $T = \|t_{i,j}\|$ ,  $i \in I_l$ ,  $\forall l \in L$ ,  $j \in J_s$ ,  $\forall s \in S$ .

Требуется найти  $x_{i,j}$  при условиях:

$$x_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если самолет } j \text{ назначается на рейс } i, \\ 0 & \text{в противном случае,} \\ i \in I_l, \forall l \in L, \quad j \in J_s, \quad \forall s \in S. \\ \sum_{j \in J} x_{i,j} = 1, \quad i \in I_l \; \forall l \in L, \end{cases}$$
(1)

(2) – на рейс *i* назначается только одно воздушное судно,

$$\underline{b}_{j} \leq \sum_{i \in I} x_{i,j} \leq \overline{b}_{j}, \quad j \in J_{s} \,\,\forall s \in S \,\,, \tag{3}$$

(3) – ВС *j* может быть назначено не менее чем на  $\underline{b}_j$  и не более чем на  $\overline{b}_j$  рейсов;  $\tau_{i,j}$  – возможное время задержки вылета воздушного судна *j* рейсом *i*,  $i \in I_l$ ,  $\forall l \in L$ ,  $j \in J_s$ ,  $\forall s \in S$  (может принимать отрицательные значения, что учитывается ограничениями (5) и (6)).

$$\tau_{i,j} = -t_i^0 - \tau_i^0 + \sum_{k \in I_k} (\tau_{k,j} + t_{k,j}) x_{k,j} , \ \forall i \notin I_k, \ j \in J_s , \ s \in S ,$$
(4)

(4) – задержка вылета BC *j* на текущем этапе (рейсе *i*) является рекурсивной функцией задержек предыдущих рейсов этого воздушного судна,

 $\hat{\tau}_{i,j} = \tau_{i,j} + y_{i,j} \ge 0, \quad i \in I_l, \quad \forall l \in L, \quad j \in J_s, \quad \forall s \in S, \quad (5)$ 

$$y_{i,i} \ge 0 \ i \in I_l, \ \forall l \in L, \ j \in J_s, \ \forall s \in S.$$
(6)

Условия (5) и (6) нейтрализуют отрицательные задержки за счет переменныхкомпенсаторов  $y_{i,j} \ge 0$ , тогда  $\hat{\tau}_{i,j} \ge 0$  – скорректированная задержка вылета ВС *j* рейсом *i*,

$$\sum_{i\in I_l} \hat{\tau}_{i,j} x_{i,j} + \sum_{i\in I_l} t_{i,j} x_{i,j} \le \lambda , \ j \in J_s , \ s \in S ,$$

$$(7)$$

$$\lambda \rightarrow \min$$
 . (8)

(7) и (8) – минимаксный критерий быстродействия. Его использование способствует организации равномерной загрузки парка воздушных судов, минимизируя максимальный суммарный простой BC из всего множества.

Вариант ограничения (7):

$$\sum_{i \in I_l} \hat{\tau}_{i,j} x_{i,j} \le \lambda \tag{7'}$$

Вместо, или вместе с (7), возможно применение аддитивного критерия минимизации суммарных задержек

$$\sum_{j \in J} \sum_{i \in I} \hat{\tau}_{i,j} x_{i,j} \to \min.$$
(9)

Выражения (4), опосредующие ограничения (5) и (7), содержат рекурсии, поскольку всякие последующие (по времени) значения  $\tau_{i,j}$  и  $\hat{\tau}_{i,j}$  зависят от предыдущих.

Вычисление  $\tau_{i,j}$  на всех предшествующих *i* шагах вызывает немалые затруднения из-за множественности вариантов их формирования, а раскрытие рекурсий и сведение постановки (1)–(8) к одноэтапной задаче смешанного программирования приводят к увеличению числа булевых переменных и ограничений задачи в  $\overline{I}/2$  раз, где  $\overline{I} = \sup I$  [24]. Это редуцирует структурную сложность (1)–(8) в вычислительную трудоемкость результирующей постановки, которая остается труднорешаемой при многократном увеличении исходной размерности [24].

Поэтому раскрытие рекурсий – отдельная тема, представляющая скорее теоретический, чем практический интерес. В то же время вполне очевидна прямая применимость к задаче (1)–(8) параметрического алгоритма на основе динамического программирования (ДП) с отсевом вариантов на каждом шаге [24, 25].

## 3. Параметрический алгоритм поиска субоптимальных решений

Из-за наличия рекурсий динамическое программирование – едва ли не единственный вычислительный метод, применимый непосредственно для решения задачи (1)–(8). Однако его прямое применение неэффективно, в том числе из-за того, что рассматриваемая задача обладает *NP*-полнотой. При попытке точного решения (1)–(8) ДП приводит к полному перебору всех допустимых вариантов. Нетрудно подсчитать число таких вариантов *N*. Например, если *k* – номер этапа и в (2) положить  $\underline{b}_j = 0$ , и  $\overline{b}_j = \sup I$ ,  $\overline{I} = \sup I$ ,  $\overline{J} = \sup J$ , то, как показано ниже, учитывая геометрическую прогрессию числа вариантов по шагам  $Д\Pi$ ,  $N = (\overline{J}^{\overline{I}+1} - \overline{J})/2$ . По этой причине метод ДП в задаче (1)–(8) имеет трудоемкость, превышающую экспоненциальную и в «чистом» виде на реальных размерностях неприменим.

Для построения эффективного приближенного алгоритма воспользуемся общей схемой ДП, производя отсев локально наихудших вариантов на ряде шагов (этапов) динамического программирования. Данный подход апробирован авторами ранее при решении задач оптимизации расписаний несвязанных неидентичных параллельных приборов с задержками начала обслуживания [25, 26] и показал хорошие практические результаты по точности результатов и быстродействию.

Будем считать упорядоченными все рейсы  $i \in I_l$ ,  $\forall l \in L$  по величинам исходных задержек (входному расписанию  $\|\tau_i^0\|$ ) с учетом местоположения BC на момент построения расписания. Тогда в соответствии с процедурой ДП определим номера этапов  $\eta = \overline{1, \overline{I}}$ . Обозначим через  $f_{\eta, j}(\hat{\tau}_{\eta, j}, t_{\eta, j}, x_{\eta, j}), j \in J_s$ ,  $\forall s \in S$  время завершения выполнения BC j рейса  $\eta$  на этапе  $\eta$ , а через  $\phi_{\eta}(\hat{\tau}_{\eta, j}, t_{i, j}, x_{i, j})$   $i = \overline{1, \overline{I}}, j = \overline{1, \eta}$  – условно минимальное время завершения выполнения всех рассматриваемых рейсов на этапах с первого по  $\eta$ -й.

$$f_{\eta,j}(\hat{\tau}_{\eta,j}, t_{\eta,j}, x_{\eta,j}) = \max\left\{0, [\tau_{\eta,j}x_{\eta,j} - \phi_{\eta-1,j}(\hat{\tau}_{\eta-1,j}, t_{i,j}, x_{i,j})]\right\} + t_{\eta,j}x_{\eta,j},$$

$$j = \overline{1, \overline{J}}, i = \overline{1, \eta-1}.$$
(10)

Рекуррентное соотношение Беллмана для этой задачи:

$$\phi_{\eta,j}(\hat{\tau}_{\eta-1,j}, t_{i,j}, x_{i,j}) = \left\{ f_{\eta,j}(\hat{\tau}_{\eta,j}, t_{\eta,j}, x_{\eta,j}) + \phi_{\eta-1,j}(\hat{\tau}_{\eta-1,j}, t_{i,j}, x_{i,j}) \right\},$$

$$i = \overline{1, \eta - 1};$$

$$(11)$$

$$\phi_{\eta}(\widehat{\tau}_{\eta,j}, t_{i,j}, x_{i,j}) = \max_{j} \left\{ \phi_{\eta,j}(\widehat{\tau}_{\eta-1,j}, t_{i,j}, x_{i,j}) \right\}, \ j \in J_{s}, s \in S, i = \overline{1, \eta}.$$
(12)

Для достижения максимального быстродействия по критерию (7)–(8) на последнем шаге следует выбрать минимальное значение  $\phi_{\overline{I}}(\hat{\tau}_{\overline{I},j},t_{i,j},x_{i,j})$ , т. е. найти:  $\lambda = \min \left\{ \phi_{\overline{I}}(\hat{\tau}_{\overline{I},j},t_{i,j},x_{i,j}) \right\}, j \in J_s, s \in S, i \in I_l, l \in L$ . Подсчитаем общее число вариантов расписаний, которые нужно найти для гарантированного определения наилучшего расписания:

$$N = \overline{J} + \overline{J}^2 + \dots + \overline{J}^k + \dots + \overline{J}^{\overline{I}} = \left(\overline{J}^{\overline{I}+1} - \overline{J}\right) / 2.$$
(13)

Отсев части промежуточных расписаний на этапах ДП возможен в различных вариациях. Если отбрасывать все варианты расписания на шаге k, кроме локально наилучшего, то такой способ построения расписания совпадает с жадным алгоритмом. Если оставлять все промежуточные расписания, это приведет к полному перебору вариантов. При этом на первом этапе будем иметь  $\overline{J}$ , на втором этапе –  $\overline{J}^2$ , на этапе  $k - \overline{J}^k$  вариантов промежуточного расписания. Если же пытаться найти компромисс между точностью и быстродействием, то с учетом стремления построить эффективный алгоритм число промежуточных расписаний должно полиномиально зависеть от количества булевых переменных задачи (1)–(8).

Рассмотрим одну из таких компромиссных вариаций. Определим максимально возможное число вариантов K, оставляемое на этапе k для дальнейшего анализа. Для удобства изложения примем в качестве K некоторую константу. Например, положим K = 1024 и определим максимальное число  $K' = \overline{J}^k \leq K$ . Поскольку на каждом этапе ДП число вариантов промежуточных расписаний увеличивается в  $\overline{J}$  раз, произведем отсев  $1-1/\overline{J}$  доли локально наихудших из генерируемых вариантов на всяком этапе, начиная с k+1-го.

Вполне очевидно значение k:  $k = \left[\frac{\ln(K)}{\ln(\overline{J})}\right]$ , где  $\left[\cdot\right]$  – целая часть числа.

Подсчитаем общее число генерируемых алгоритмом вариантов расписаний. На первом этапе –  $\overline{J}$  вариантов, на этапе  $k - \overline{J}^k$  вариантов, на этапах с k+1 по  $\overline{I}$ -й – также  $\overline{J}^k$  вариантов. Тогда общее число промежуточных расписаний N' составит:

$$N' = \overline{J} + \overline{J}^{2} + \dots + \overline{J}^{k-1} + \overline{J}^{k} + \dots + \overline{J}^{k} = \left(\overline{J}^{k-1} - \overline{J}\right) / 2 + \left(\overline{I} - k + 1\right) \cdot \overline{J}^{k}.$$
 (14)

Поскольку k – некоторая константа, выражение (14) отображает полиномиальную зависимость трудоемкости параметрического алгоритма ДП с отсевом вариантов от размерности задачи (1)–(8). При этом параметр k – степень такого полинома. Для наглядности сравним N с N', положив k = 3,  $\overline{I} = 1000$ ,  $\overline{J} = 100$ . Тогда  $N = (100^{1001} - 100)/2$ ,  $N' = (100^2 - 100)/2 + (100 - 2) \cdot 100^3 = 98\ 009\ 900$ . Данные обстоятельства опосредуют вполне заурядную трудоемкость параметрического алгоритма, которая определяется параметром k, и фактически бесконечную трудоемкость метода ДП.

В соответствии с (14) можно оценить полную трудоемкость параметрического алгоритма. Для этого достаточно определить трудоемкость этапа, начиная с номера k, которая непосредственно зависит от числа комбинаций переменных  $x_{i,j}$  на

этапе k. Обозначим эту величину как  $P_k$ , тогда очевидно:  $P_k = \overline{J}^k$ . Фактически это означает, что на каждом этапе, начиная с k, алгоритм требует вычисления  $P_k$  вариантов ограничений (7) для всех возможных значений  $x_{k,j}$ . В целом на всех этапах имеем:  $P_1 = \overline{J}$ ,  $P_2 = \overline{J}^2$ ,  $P_l = \overline{J}^k$ ,  $l = \overline{k, \overline{l}}$ . В рассмотренном выше примере  $P_k = 100^3$ , и с учетом (14) получаем немалую трудоемкость для задачи реальной размерности. Данное затруднение преодолевается либо снижением k, либо декомпозицией.

Опишем параметрический алгоритм ДП с отсевом локально наихудших промежуточных вариантов.

#### Алгоритм Ар

1. Ввод исходных данных  $(\tau_i^0, t_{i,j}), j \in J_s, s \in S, i \in I_l, l \in L$ , параметров k

и N'. Положим  $\phi_{0,j}(\tau_0^0, t_{i,j}, x_{i,j}) \equiv 0$ , определим начальный номер шага  $\eta \coloneqq 0$ .

2.  $\eta := \eta + 1$ .

3. Проверка номера этапа. Если  $\eta > \overline{I}$  – переход к пункту 7, если нет – следующий пункт.

4. На этапе  $\eta$  определяем порядок следования последующих этапов (переупорядочиваем список рейсов), вычисляем величины задержек  $\hat{\tau}_{\eta,j}$ , в соответствии с (10)–(12) генерируем все допустимые варианты назначений, вычисляем  $f_{\eta,j}(\hat{\tau}_{\eta,j}, t_{\eta,j}, x_{\eta,j})$  и длины расписаний  $\phi_{\eta,j}(\hat{\tau}_{\eta,j}, t_{i,j}, x_{i,j})$ .

5. Проверка  $N^{\eta}$  – числа вариантов  $\phi_{\eta,j}(\hat{\tau}_{\eta,j}, t_{i,j}, x_{i,j})$  на этапе  $\eta$ . Если  $\eta < k$ ,

т.е.  $N^{\eta} \leq N'$  – переход к п. 2. В противном случае – следующий пункт.

6. Отсев  $1-1/\overline{J}$  части из всех порожденных п. 4 вариантов с наибольшими значениями длины расписания  $\phi_{\eta,j}(\hat{\tau}_{\eta,j}, t_{i,j}, x_{i,j})$ . Возврат к п. 2.

7. Выбор вариантов кратчайших расписаний. Составление результирующих расписаний обратным ходом ДП.

Замечание к алгоритму  $A_P$  относительно оценки значений задержек  $\hat{\tau}_{i,i}$ .

На каждом шаге алгоритма требуется оценивание значений  $\hat{\tau}_{i,j}$  для BC, которые еще не прибыли в аэропорт отправки рейса. Оценивание значений  $\hat{\tau}_{i,j}$  осуществляется посредством решения подзадач поиска всех кратчайших путей в графе возможных связей между аэропортами. В общем случае это приходится делать на каждом шаге, так как пошагово они могут меняться в зависимости от предыдущих локальных назначений на рейсы.

# 4. Демонстрационный пример

Ниже приведен иллюстративный фрагмент применения предложенного алгоритма для построения ближайшего к исходно заданному расписания вылетов и назначения рейсов для трех BC, обозначенных номерами 1, 2 и 3 двух различных типов.

## Таблица 1 / Table 1

|                  |          |            | 0         |        |          |           |            |
|------------------|----------|------------|-----------|--------|----------|-----------|------------|
|                  | Арропорт | Арропорт   | Время     | обслуж | сивания  | Напалгиое | Напальное  |
| Рейс отправления |          | назначения | тип<br>ВС | время  | номер ВС | наличие   | расписание |
| 1                | 1        | 2          | 1т        | 5      | 1        | 1т        | 1          |
| 2                | 2        | 3          | 1т        | 3      | 2        | 1т        | 2          |
| 3                | 2        | 1          | 2т        | 4      | 3        | 2т        | 1          |
| 4                | 3        | 1          | 2т        | 2      |          |           | 1          |
| 5                | 1        | 3          | 1т        | 2      |          |           | 2          |
| 6                | 3        | 2          | 1т        | 4      |          |           | 2          |
| 7                | 1        | 2          | 2т        | 4      |          |           | 4          |
| 8                | 1        | 3          | 2т        | 2      |          |           | 4          |
| 9                | 3        | 1          | 1т        | 3      |          |           | 4          |
| 10               | 2        | 1          | 1т        | 5      |          |           | 4          |
| 11               | 2        | 3          | 1т        | 3      |          |           | 5          |

Данные о рейсах Flight data

Исходные данные о рейсах и затратах времени приведены в табл. 1.

#### Таблица 2 / Table 2

# Первый шаг алгоритма Algorithm: step one

| $\eta = 1$ | <i>x</i> <sub>1,1</sub> | <i>x</i> <sub>1,2</sub> | <i>x</i> <sub>1,3</sub> | $f_{1,j}$   | $\phi_{1,j} = \{f_{1,j}\}, \ \phi_1 = \max_j \{\phi_{1,j}\}$   |
|------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------|--|
|            | 1                       | 0                       | 0                       | (1+5, 0, 0) | $\phi_1 = \max\{6; 0; 0\} = 6$   |
| Рейс 1     | 0                       | 1                       | 0                       | (0, ~, 0)   | $\phi_{1} = \max\left\{0, \underline{\tau}_{1,2}, 0\right\} = \underline{\tau}_{1,2},$ $\underline{\tau}_{1,2} = \min\left\{13, 14\right\} = 13$ |
|            | 0                       | 0                       | 1                       | (0, 0, ~)   | $\phi_1 = \max\left\{0, 0, \infty\right\} = \infty$  |

В табл. 1 графа «время» соответствует  $t_{i,j}$ , графа «местоположение» отображает наличие или отсутствие ВС в аэропорту вылета на каждом шаге построения расписания, «начальное расписание» соответствует  $\tau_i^0$ . Графа «номер» соответствует *j* (номеру ВС). В табл. 1 данные отсортированы по значениям  $\tau_i^0$  с учетом местоположения ВС. В соответствии с этим порядком пронумерованы рейсы.

Параметры алгоритма: k = 1, (N' = 3),  $\overline{J} = 3$ ,  $\overline{I} = 11$ .

Таблица 3 / Table 3

|            |                         |                         |                         |                         |                         | Step two     |   |
|------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|--------------|---|
| $\eta = 2$ | <i>x</i> <sub>1,1</sub> | <i>x</i> <sub>1,2</sub> | <i>x</i> <sub>2,1</sub> | <i>x</i> <sub>2,2</sub> | <i>x</i> <sub>2,3</sub> | $f_{2,j}$    | $\phi_{2,j} = \{f_{2,j} + \phi_{1,j}\}, \ \phi_2 = \max_j \{\phi_{2,j}\}$ |
| Рейс 1 +   | 1                       | 0                       | 1                       | 0                       | 0                       | (6+3, 0, 0)  | $\phi_2 = \max\{6+3; 0+0; 0+0\} = 9$                                      |
| Рейс 2     | 1                       | 0                       | 0                       | 1                       | 0                       | (0, 2+3, 0)  | $\phi_2 = \max\{6+0; 0+5, 0+0\} = 6$                                      |
|            | 1                       | 0                       | 0                       | 0                       | 1                       | (0, 0, ~)    | $\phi_2 = \max\left\{6+0,  0,  \infty\right\} = \infty$                   |
|            | 0                       | 1                       | 1                       | 0                       | 0                       | (13+3, 0, 0) | $\phi_2 = \max\{13+3; 0+0; 0+0\} = 16$                                    |
|            | 0                       | 1                       | 0                       | 1                       | 0                       | (0, 2+3, 0)  | $\phi_2 = \max\{13+0; 0+5, 0+0\} = 13$                                    |
|            | 0                       | 1                       | 0                       | 0                       | 1                       | (0, 0, ~)    | $\phi_2 = \max\left\{13 + 0,  0,  \infty\right\} = \infty$                |

Второй шаг

Поскольку k = 1, сокращаем размерность (вычеркнутые варианты выделены заливкой).

После третьего шага изменяются местоположение BC и данные о текущих рейсах, т. е. порядка задержках  $\hat{\tau}_{i,j}$ , что приводит к необходимости изменения порядка назначения выполнения шагов алгоритма (см. п. 4  $A_P$ ). Изменение порядка назначения рейсов приведено в табл. 4, строки которой упорядочены по возрастанию  $\hat{\tau}_{i,j}$  с учетом текущих местоположений BC.

Таблица 4 / Table 4

|      |                         |                        | Время     | и обслужив | ания     | Наналиноа         | П          |
|------|-------------------------|------------------------|-----------|------------|----------|-------------------|------------|
| Рейс | Аэропорт<br>отправления | Аэропорт<br>назначения | тип<br>ВС | время      | номер ВС | начальное наличие | расписание |
| 1    | 1                       | 2                      | 1т        | 5          | 1        | 1т                | 1          |
| 2    | 2                       | 3                      | 1т        | 3          | 2        | 1т                | 2          |
| 3    | 2                       | 1                      | 2т        | 4          | 3        | 2т                | 1          |
| 4    | 3                       | 1                      | 2т        | 2          |          |                   | 1          |
| 5    | 1                       | 3                      | 1т        | 2          |          |                   | 2          |
| 6    | 3                       | 2                      | 1т        | 4          |          |                   | 2          |
| 7    | 1                       | 2                      | 2т        | 4          |          |                   | 4          |
| 8    | 1                       | 3                      | 2т        | 2          |          |                   | 4          |
| 9    | 3                       | 1                      | 1т        | 3          |          |                   | 4          |
| 10   | 2                       | 1                      | 1т        | 5          |          |                   | 4          |
| 11   | 2                       | 3                      | 1т        | 3          |          |                   | 5          |

# Упорядоченные данные Ordered data

Вычисления четвертого шага приведены в табл. 5.

Таблица 5 / Table5

Четвертый шаг Step four

|                    |                         |                         |                         |                         |           | Step Iour  |
|--------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-----------|--|
| $\eta = 4$         | <i>x</i> <sub>2,1</sub> | <i>x</i> <sub>2,2</sub> | <i>x</i> <sub>4,1</sub> | <i>x</i> <sub>4,2</sub> | $f_{4,j}$ | $\phi_{4,j} = \{ f  4_{11,j} + \phi_{3,j} \} , \ \phi_4 = \max_j \{ \phi_{4,j} \}$ |
| Рейсы:<br>1, 2, 3, | 1                       | 0                       | 1                       | 0                       | (4,0,0)   | $\phi_4 = \max\{6+3+0+4; 0+0+0+0; 0+0+5+0\} = 13$                                  |
| 6                  | 1                       | 0                       | 0                       | 1                       | (0,4,0)   | $\phi_4 = \max\{6+3+0+0; 0+0+0+40; 0+0+5+0\} = 9$                                  |
|                    | 0                       | 1                       | 1                       | 0                       | (4,0,0)   | $\phi_4 = \max\left\{6{+}0{+}0{+}4;  0{+}5{+}0{+}0;  0{+}0{+}5{+}0\right\} = 10$   |
|                    | 0                       | 1                       | 0                       | 1                       | (0,4,0)   | $\phi_4 = \max\{6+0+0+0; 0+5+0+4; 0+0+5+0\} = 9$                                   |
|                    | 0                       | 1                       | 1                       | 0                       | (4,0,0)   | $\phi_4 = \max\{13+0+0+4; 0+5+0+0; 0+0+5+0\} = 17$                                 |
|                    | 0                       | 1                       | 0                       | 1                       | (0,4,0)   | $\phi_4 = \max\{13+0+0+0; 0+5+0+4; 0+0+5+0\} = 13$                                 |

В соответствии с заданным параметром k=1 вычеркиваем локально наихудшие варианты текущего расписания (для  $\phi_4 \ge 13$ ).

Результаты вычислений на завершающем одиннадцатом шаге сведены в табл. 6. Заливкой в табл. 6 выделены исключенные из рассмотрения варианты назначений.

Таблица 6 / Table 6

# Завершающий шаг Final step

|   |   |                         |                          |  |  | i mai stop   |
|---|---|-------------------------|--------------------------|--|--|--|
| η=11                                      | <i>x</i> <sub>8,1</sub>                   | <i>x</i> <sub>8,2</sub> | <i>x</i> <sub>11,1</sub> | <i>x</i> <sub>11,2</sub>   | $f_{11,j}$   | $\phi_{11,j} = \{f_{11,j} + \phi_{10,j}\}, \ \lambda = \phi_{11} = \max_{j} \{\phi_{11,j}\}$   |
| Рейсы:<br>1,2,3,6,<br>7,10,11,<br>5,8,4,9 | Рейсы:<br>1,2,3,6,<br>7,10,11,<br>5,8,4,9 |                         | (3,0,0)                  | $  \phi_{11} = \max \{ 6+0+0+0+0+0+3+[2+2]+0+0+3; \\ 0+5+0+4+0+5+0+0+0+0; \\ 0+0+5+0+4+0+0+0+[4+2]+2+0 \} = 17 $ |  |  |
| 1 0                                       |   | 0                       | 1                        | (3,0,0)  | $      \phi_{11} = \max \{ 6 + 0 + 0 + 0 + 0 + 5 + 0 + 2 + 0 + 0 + 3; \\ 0 + 5 + 0 + 4 + 0 + 0 + 3 + 0 + 0 + 0 + 0; \\ 0 + 0 + 5 + 0 + 4 + 0 + 0 + 0 + [4 + 2] + 2 + 0 \} = 17 $ |  |
|   | 1 0 0 0 (3,0,0)                           |                         | (3,0,0)                  | $  \phi_{11} = \max\{6+0+0+0+0+0+3+0+0+0+3; \\ 0+5+0+4+0+5+0+2+0+0+0; \\ 0+0+5+0+4+0+0+0+[4+2]+2+0\} = 17 $      |  |  |
|   | 0   | 1                       | 1 1 0                    |  | (0,3,0)  | $      \phi_{11} = \max \{ 6 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 3 + [2 + 2] + 0 + 0 + 0; \\ 0 + 5 + 0 + 4 + 0 + 5 + 0 + 0 + 0 + 0 + [3 + 2]; \\ 0 + 0 + 5 + 0 + 4 + 0 + 0 + 0 + [4 + 2] + 2 + 0 \} = 19 $ |
|   | 0   | 1                       | 0                        | 1  | (0,3,0)  | $      \phi_{11} = \max \{ 6 + 0 + 0 + 0 + 0 + 5 + 0 + 2 + 0 + 0 + 0; \\ 0 + 5 + 0 + 4 + 0 + 0 + 3 + 0 + 0 + 0 + 3; \\ 0 + 0 + 5 + 0 + 4 + 0 + 0 + 0 + [4 + 2] + 2 + 0 \} = 17 $             |
|   | 0   | 1                       | 0                        | 0  | (0,3,0)  | $  \phi_{11} = \max \{ 6+0+0+0+0+0+3+0+0+0; \\ 0+5+0+4+0+5+0+2+0+0+3, \\ 0+0+5+0+4+0+0+0+[4+2]+2+0 \} = 19 $   |

Квадратными скобками в суммировании длительностей обслуживания ВС рейсов выделены варианты отсутствия соответствующих бортов в аэропорту вылета. В этом случае приходится доставлять ВС из другого ближайшего аэропорта. Время доставки учтено внутри квадратных скобок.

Таким образом, в результате получено четыре равноценных по критерию (7)– (8) варианта назначений ВС на рейсы и расписания их движения ( $\lambda = 17$  для всех вариантов).

В табл. 7 и 8 отображены все наилучшие варианты назначений и соответствующие расписания движения ВС. В графах «начало» отображается время вылета, в графах «конец» – совокупное время завершения полета, обслуживания на земле и подготовки к следующему рейсу.

Таблица 7 / Table 7

| i  | <i>j</i> = 1 | <i>j</i> = 2 | <i>j</i> = 3 | Начало | Конец | <i>j</i> = 1 | <i>j</i> = 2 | <i>j</i> = 3 | Начало | Конец |
|----|--------------|--------------|--------------|--------|-------|--------------|--------------|--------------|--------|-------|
| 1  | 1            | 0            | 0            | 1      | 6     | 1            | 0            | 0            | 1      | 6     |
| 2  | 0            | 1            | 0            | 2      | 5     | 0            | 1            | 0            | 2      | 5     |
| 3  | 0            | 0            | 1            | 1      | 5     | 0            | 0            | 1            | 1      | 5     |
| 4  | 0            | 1            | 0            | 5      | 9     | 0            | 1            | 0            | 5      | 9     |
| 5  | 0            | 0            | 1            | 5      | 9     | 0            | 0            | 1            | 5      | 9     |
| 6  | 0            | 1            | 0            | 9      | 14    | 1            | 0            | 0            | 6      | 11    |
| 7  | 1            | 0            | 0            | 6      | 9     | 0            | 1            | 0            | 9      | 12    |
| 8  | 1            | 0            | 0            | 11     | 13    | 1            | 0            | 0            | 11     | 13    |
| 9  | 0            | 0            | 1            | 13     | 15    | 0            | 0            | 1            | 13     | 15    |
| 10 | 0            | 0            | 1            | 15     | 17    | 0            | 0            | 1            | 15     | 17    |
| 11 | 1            | 0            | 0            | 13     | 16    | 1            | 0            | 0            | 13     | 16    |

| Варианты 1, 2 кратчайшего расписания |
|--------------------------------------|
| Shortest schedule: options 1 and 2   |

Таблица 8 / Table 8

# Варианты 3, 4 кратчайшего расписания Shortest schedule: options 3 and 4

| i  | <i>j</i> = 1 | <i>j</i> = 2 | <i>j</i> = 3 | Начало | Конец | j = 1 | <i>j</i> = 2 | <i>j</i> = 3 | Начало | Конец |
|----|--------------|--------------|--------------|--------|-------|-------|--------------|--------------|--------|-------|
| 1  | 1            | 0            | 0            | 1      | 6     | 1     | 0            | 0            | 1      | 6     |
| 2  | 0            | 1            | 0            | 2      | 5     | 0     | 1            | 0            | 2      | 5     |
| 3  | 0            | 0            | 1            | 1      | 5     | 0     | 0            | 1            | 1      | 5     |
| 4  | 0            | 1            | 0            | 5      | 9     | 0     | 1            | 0            | 5      | 9     |
| 5  | 0            | 0            | 1            | 5      | 9     | 0     | 0            | 1            | 5      | 9     |
| 6  | 0            | 1            | 0            | 9      | 14    | 1     | 0            | 0            | 6      | 11    |
| 7  | 1            | 0            | 0            | 6      | 9     | 0     | 1            | 0            | 9      | 12    |
| 8  | 0            | 1            | 0            | 14     | 16    | 1     | 0            | 0            | 11     | 13    |
| 9  | 0            | 0            | 1            | 13     | 15    | 0     | 0            | 1            | 13     | 15    |
| 10 | 0            | 0            | 1            | 15     | 17    | 0     | 0            | 1            | 15     | 17    |
| 11 | 1            | 0            | 0            | 9      | 12    | 0     | 1            | 0            | 12     | 15    |

Приведенный пример наглядно демонстрирует универсальность алгоритма  $A_P$ . Он пригоден и для решения задачи FAM, и для решения смешанной задачи (FAM + ARP). Это же свойство позволяет находить наилучшее по параметру k решение целевой задачи оптимального регулирования расписаний, которое минимизирует потери авиакомпании от нарушений изначально заданных графиков движения воздушных судов.

# 5. Улучшающий обменный алгоритм

Для улучшения решения, полученного параметрическим алгоритмом  $A_P$ , можно применить процедуру, основанную на обмене рейсами между ВС. Опишем этот алгоритм.

На первом этапе выбирается BC с наибольшим суммарным временем обслуживания рейсов и производится попытка передачи одного из рейсов другому BC. Если при этом происходит уменьшение значения целевой функции, процесс повторяется, в противном случае рассматривается следующий рейс.

На втором этапе выбирается BC с наибольшим суммарным временем обслуживания рейсов. Последовательно рассматриваются рейсы данного BC. В каждом случае осуществляется поиск рейса, который это BC обслуживает за меньшее время, но назначенный другому BC. Производится обмен рейсами между воздушными судами. Если при этом происходит уменьшение значения целевой функции, второй этап повторяется, в противном случае изменения отменяются и осуществляется поиск другого подходящего для обмена рейса. Общий обменный алгоритм, как и алгоритм, реализуемый на втором этапе, обозначим как  $A_C$ . Более подробно  $A_C$  на втором этапе можно описать следующим образом.

## Алгоритм АС

1. Выбирается  $BC_m$  с наибольшим суммарным временем обслуживания рейсов  $\lambda_m = \lambda$ .

- Положим *i* := 1.
- 3. Если *i* := *m*, перейти к п. 14.
- 4. Положим *l* := 1.
- 5. Если *x<sub>m,l</sub>* = 0, перейти к п. 12.
- 6. Положим ј ≔1.
- 7. Если j = l или  $x_{i,j} = 0$ , или  $t_{m,j} \ge t_{m,l}$ , или  $t_{i,l} t_{i,j} \ge \lambda_m \lambda_i$ , перейти к п. 10.
- 8. Положим  $x_{i,j} = 0$ ,  $x_{m,j} = 1$ ,  $x_{i,l} = 1$ ,  $x_{m,l} = 0$ .
- 9. Вычислим значение целевой функции. Если оно уменьшилось, перейти к п. 1, иначе положить  $x_{i,j} = 1$ ,  $x_{m,j} = 0$ ,  $x_{i,l} = 0$ ,  $x_{m,l} = 1$ .
  - , where nonowing  $x_{i,j} = 1$ ,  $x_{m,j} = 0$ ,  $x_{i,l} = 0$ ,  $x_m$ ,
  - Положим *j* := *j* +1.
  - 11. Если  $j \leq \overline{J}$ , перейти к п. 7.
  - 12. Положим l := l + 1.
  - 13. Если  $l \leq \overline{J}$ , перейти к п. 5.
  - 14. Положим i := i + 1.
  - 15. Если  $i \leq \overline{I}$ , перейти к п. 3, иначе завершить алгоритм.

## 6. Результаты тестирования алгоритмов

Программная реализация параметрического алгоритма  $A_P$  и обменного алгоритма  $A_C$  позволила исследовать их свойства на примерах приближенных к реальным размерностей. Алгоритмы тестировались на данных задачи оптимизации расписаний системы несвязанных параллельных приборов с задержками начала обслуживания [23, 24]. Табл. 9 содержит результаты тестирования реализаций задачи (1)–(8) с использованием средств решения бикритериальной релаксации задачи (1)–(8) [24, 27, 28] и представленных выше алгоритмов  $A_P$  и  $A_C$ . Все тесты имеют одинаковую размерность. Число рейсов  $\overline{I} = 100$ , число BC  $\overline{J} = 5$ . Алгоритмы  $A_P$  и  $A_C$  применены с двумя значениями параметра k = 4 и k = 5.

Таблица 9 / Table 9

| Мо  | t <sub>da</sub>                               | $\lambda_{da}$ | t <sub>dp</sub> | $\lambda_{dp}$       | $p_{dp}$ | $\Delta_{dp}$ | $\lambda_{dp}^{c}$ | $p_{dp}^c$     | $\Delta_{dp}^{c}$ | $t_{dp}$ | $\lambda_{dp}$               | <i>P</i> dp | $\Delta_{dp}$ | $\lambda_{dp}^{c}$ | $p_{dp}^{c}$ | $\Delta^c_{dp}$ |
|-----|---|----------------|-----------------|----------------------|----------|---------------|--------------------|----------------|-------------------|----------|------------------------------|-------------|---------------|--------------------|--------------|-----------------|
| JN≌ | (4:M:C) $\overline{I} = 100$ , $\overline{J}$ |                |                 | $00, \overline{J} =$ | =5, k =  | 4             |                    | A <sub>C</sub> |                   |          | $\overline{J} = 5$ , $k = 5$ |             |               | $A_C$              |              |                 |
| 1   | 0:07:18                                       | 389            | 17              | 368                  | -5,40    | -1            | 364                | -6,4           | -25               | 435      | 363                          | -6,68       | -26           | 359                | -7,71        | -30             |
| 2   | 0:15:29                                       | 335            | 18              | 337                  | 0,60     | 2             | 335                | 0,00           | 0                 | 436      | 331                          | -1,19       | -4            | 329                | -1,79        | -6              |
| 3   | 0:09:21                                       | 401            | 17              | 382                  | -4,74    | -19           | 382                | -4,7           | -19               | 438      | 375                          | -6,48       | -26           | 375                | -6,48        | -26             |
| 4   | 0:01:42                                       | 356            | 18              | 370                  | 3,93     | 14            | 366                | 2,81           | 10                | 437      | 365                          | 2,53        | 9             | 361                | 1,40         | 5               |
| 5   | 0:12:11                                       | 334            | 17              | 337                  | 0,90     | 3             | 333                | -0,3           | -1                | 435      | 337                          | 0,90        | 3             | 337                | 0,90         | 3               |
| 6   | 4:43:14                                       | 363            | 17              | 377                  | 3,86     | 14            | 369                | 1,65           | 6                 | 434      | 375                          | 3,31        | 12            | 361                | -0,55        | -2              |
| 7   | 0:11:56                                       | 403            | 18              | 404                  | 0,25     | 1             | 404                | 0,25           | 1                 | 434      | 404                          | 0,25        | 1             | 401                | -0,50        | -2              |
| 8   | 1:34:02                                       | 395            | 17              | 398                  | 0,76     | 3             | 397                | 0,51           | 2                 | 433      | 386                          | -2,28       | -9            | 386                | -2,28        | -9              |
| 9   | 0:03:33                                       | 364            | 17              | 372                  | 2,20     | 8             | 372                | 2,20           | 8                 | 434      | 371                          | 1,92        | 7             | 371                | 1,92         | 7               |
| 10  | 0:15:37                                       | 395            | 17              | 392                  | -0,76    | -3            | 366                | -7,3           | -29               | 434      | 389                          | -1,52       | -6            | 376                | -4,81        | -19             |
|     |   | Средн          | ee              |                      | 0,16     | 0,2           |                    | -1,14          | -4,7              |          |                              | -0,93       | -3,9          |                    | -1,99        | -7,9            |

Сравнительные характеристики алгоритмов Comparative characteristics of the algorithms

В табл. 9  $t_{da}$ ,  $\lambda_{da}$  – соответственно время решения (в формате часы:минуты:секунды) и значение критерия эффективности, в результате применения базового алгоритма, основанного на бикритериальной релаксации с использованием инструментов IBMILOGCPLEX [23, 24].  $t_{dp}$ ,  $\lambda_{dp}$ ,  $p_{dp}$  и  $\Delta_{dp}$  – время решения (в секундах), значение критерия, относительное и абсолютное ухудшение (улучшения при отрицательном значении) критерия, достигнутые алгоритмом  $A_p$  в сравнении с базовым алгоритмом.  $\lambda_{dp}^c$ ,  $p_{dp}^c$  и  $\Delta_{dp}^c$  – те же значения, полученные с применением алгоритма  $A_C$ .

В целом очевиден абсолютный выигрыш в быстродействии, объясняемый эффективностью алгоритма  $A_P$  и его комбинации с  $A_C$ . А также практически полное превосходство в близости получаемых решений к оптимальным в сравнении с базовым алгоритмом. Табл. 10 и 11 содержат статистику тестирования алгоритмов для оценки затрат времени на решение реализаций задачи оптимального регулирования назначений и расписаний движения флота авиакомпании реальных размерностей.

Таблица 11 / Table 11 Тесты I = 100, J = 30, k = 2,Tests I = 100, J = 30, k = 2

| № теста | $t_{dp}$ | $\lambda_{dp}$ | $\lambda_{dp}^{c}$ |
|---------|----------|----------------|--------------------|
| 1       | 18       | 106            | 106                |
| 2       | 18       | 105            | 105                |
| 3       | 18       | 107            | 107                |
| 4       | 18       | 106            | 106                |
| 5       | 17       | 108            | 108                |
| 6       | 18       | 114            | 114                |
| 7       | 18       | 105            | 104                |
| 8       | 18       | 108            | 106                |
| 9       | 18       | 106            | 106                |
| 10      | 19       | 105            | 105                |

Размерности тестов (100 рейсов, 30 воздушных судов) и время решения позволяют надеяться на высокую эффективность разработанного инструментария для решения реальных задач планирования авиакомпаний.

## Заключение

Полученные результаты свидетельствуют о продуктивности примененных подходов для решения актуальных задач планирования авиаперевозок, включая назначения флота BC, маршрутизации и регулирования расписаний движения BC в случае необходимости. Таким образом, разработка имеет неплохие перспективы внедрения в практику планирования авиакомпаний любого масштаба. Апостериорные оценки точности и быстродействия алгоритмов позволяют также сделать вывод о преимуществе разработанного инструментария перед аналогами.

## ЛИТЕРАТУРА

- Grönkvist M. The tail assignment problem: Thesis for the degree of Doctor of Philosophy / Chalmers University of Technology and Göteborg University. – Göteborg, Sweden, 2005. – 276 p.
- Sherali H.D., Bish E.K., Zhu X. Airline fleet assignment concepts, models and algorithms // European Journal of Operational Research. – 2006. – Vol. 172, N 1. – P. 1–30.
- 3. The fleet assignment problem: solving a large-scale integer program / C.A. Hane, C. Barnhart, E.L. Johnson, R.E. Marsten, G.L. Nemhauser, and G. Sigismondi // Mathematical Programming. 1995. Vol. 70, N 1–3. P. 211–232.
- Some properties of the fleet assignment problem / Z. Gu, E.L. Johnson, G.L. Nemhauser, and Y. Wang // Operations Research Letters. – 1994. – Vol. 15, N 2. – P. 59–71.
- Coldstart: fleet assignment at delta air lines / R. Subramanian, R.P. Scheff, J.D. Quillinan, D.S. Wiper, and R.E. Marsten // Interfaces. – 1994. – Vol. 24, N 1. – P. 104–120.
- Ozdemir Y., Basligil H., Nalbant K.G. Optimization of fleet assignment: a case study in Turkey // An International Journal of Optimization and Control: Theories & Applications. – 2012. – Vol. 2, N 1. – P. 59–71.

- Blegur F.M.A., Bakhtiar T., Aman A. Scenarios for fleet assignment: a case study at Lion Air // IOSR Journal of Mathematics. – 2014. – Vol. 10, iss. 5. – P. 64–68.
- Kabbani N.M., Patty B.W. Aircraft routing at American airlines // Proceedings of the Thirty-Second Annual Symposium of AGIFORS. – Budapest, Hungary, 1992. – P. 12–28.
- The aircraft rotation problem / L.W. Clarke, E.L. Johnson, G.L. Nemhauser, and Z. Zhu // Annals of Operations Research. – 1997. – Vol. 69. – P. 33–46.
- Benders decomposition for simultaneous aircraft routing and crew scheduling / J.-F. Cordeau, G. Stojkovi'c, F. Soumis, and J. Desrosiers // Transportation Science. – 2001. – Vol. 35, N 4. – P. 375–388.
- Flight string models for aircraft fleeting and routing / C. Barnhart, N.L. Boland, L.W. Clarke, E.L. Johnson, G.L. Nemhauser, and R.G. Shenoi // Transportation Science. – 1998. – Vol. 32, N 3. – P. 208–220.
- Elf M., Jünger M., Kaibel V. Rotation planning for the continental service of a European airline // Mathematics – Key Technologies for the Future. – Berlin; Heidelberg: Springer, 2003. – P. 675–689.
- Sarac A., Batta R., Rump C.M. A branch-and-price approach for operational aircraft maintenance routing // European Journal of Operational Research. – 2006. – Vol. 175, N 3. – P. 1850–1869.
- Gopalan R., Talluri K.T. The aircraft maintenance routing problem // Operations Research. 1998. – Vol. 46, N 2. – P. 260–271.
- A very large-scale neighborhood search algorithm for the combined through-fleetassignment model / R.K. Ahuja, J. Goodstein, A. Mukherjee, J.B. Orlin, D. Sharma // INFORMS Journal on Computing. – 2007. – Vol. 19, N 3. – P. 416–428.
- A network airline revenue management framework based on decomposition by origins and destinations / S.I. Birbil, J.B.G. Frenk, J.A.S. Gromicho, S. Zhang // Transportation Science. – 2013. – Vol. 48, N 3. – P. 313–333.
- Yan S., Tseng C.-H. A passenger demand model for airline flight scheduling and fleet routing // Computers & Operations Research. – 2002. – Vol. 29, N 11. – P. 1559–1581.
- Sandhu R., Klabjan D. Integrated airline fleeting and crew-pairing decisions // Operations Research. – 2007. – Vol. 55, N 3. – P. 439–456.
- Rakshit A., Krishnamurty N., Yu G. System operations advisor: a real-time decision support system for managing airline operations at United Airlines // Interfaces. – 1996. – Vol. 26, N 2. – P. 50–58.
- Lettovsky L. Airline operations recovery: an optimization approach: PhD thesis / School of Industrial & Systems Engineering, Georgia Institute of Technology. – Atlanta, GA, USA, 1997. – 271 p.
- Airline disruption management perspectives, experiences and outlook / N. Kohl, A. Larsen, J. Larsen, A. Ross, S. Tiourine // Journal of Air Transport Management. – 2007. – Vol. 13, N 3. – P. 149–162.
- 22. **Rosenberger J.M.** Topics in airline operations: PhD thesis / School of Industrial & Systems Engineering, Georgia Institute of Technology. Atlanta, GA, USA, 2002. 265 p.
- 23. **Мезенцев Ю.А.** Оптимизация расписаний параллельных динамических систем в календарном планировании // Информационные технологии. 2008. № 2. С. 24–33.
- Avdeenko T.V., Mezentsev Yu.A. Efficient approaches to scheduling for unrelated parallel machines with release dates // IFAC-Papers Online. – 2016. – Vol. 49, iss. 12. – P. 1743– 1748.
- Avdeenko T.V., Mezentsev Yu.A., Estraykh I.V. Heuristic approach to unrelated parallel machines scheduling under availability and resource constraints // IFAC-PapersOnline. – 2017. – Vol. 50, iss. 1. – P. 13096–13101.
- Mezentsev Yu.A., Estraykh I.V. Problems and optimization algorithms of schedules of parallel-serial systems with undefined service routes // Abstracts of the International Conference "Constructive Nonsmooth Analysis and Related Topics". – St. Petersburg, 2017. – Pt. 2. – P. 79–83.

- Mezentsev Yu.A. Binary cut-and-branch method for solving linear programming problems with boolean variables // Proceedings DOOR 2016. – Vladivostok, 2016. – Vol. 1623. – P. 72–85.
- 28. **Mezentsev Yu.A.** Binary cut-and-branch method for solving mixed integer programming problems // Abstracts of the International Conference "Constructive Nonsmooth Analysis and Related Topics". St. Petersburg, 2017. Pt. 2. P. 74–78.

# AN OPTIMAL FLEET ASSIGNMENT AND FLIGHT SCHEDULING PROBLEM FOR AN AIRLINE COMPANY

#### Mezentsev Yu.A., Estraykh I.V.

Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

An original problem statement and solution algorithms are presented for an applied problem in the scheduling theory. The idea of the optimal fleet assignment and Flight Scheduling problem considered in this paper is to find a scheduling control method that minimizes the losses of the airline company caused by aircraft schedule disruptions. The problem is NP-complete and cannot be solved accurately for any real-life number of dimensions. An efficient parametric algorithm is proposed for finding an approximate solution of the problem. The proposed algorithm is an extension of the schedule optimization algorithm for a system of unrelated parallel machines with login delays which is based on the Cmax criterion. The algorithm parameter specifies the number of the analyzed intermediate schedule options at each step and, accordingly, the number of locally eliminated worst-case options. It allows one to flexibly regulate the overall complexity and accuracy of the resulting corrective schedules. A supporting example of applying the algorithm as well as statistics of testing it on the data of an originating task by the Cmax criterion is presented. In addition to the parametric algorithm, an improving exchange algorithm is proposed that allows one to design the improved schedules by the Cmax criterion. The results of computational experiments using both algorithms on the generated examples with the dimensions close to real ones which showed a high overall efficiency of the approach are presented,

*Keywords:* optimal scheduling, airline fleet assignment,  $C_{\text{max}}$  criterion, efficient parametric algorithm, discrete optimization.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-74-90

## REFERENCES

- 1. Grönkvist M. *The tail assignment problem*. Thesis for the degree of Doctor of Philosophy. Chalmers University of Technology and Göteborg University. Göteborg, Sweden, 2005. 276 p.
- 2. Sherali H.D., Bish E.K., Zhu X. Airline fleet assignment concepts, models, and algorithms. *European Journal of Operational Research*, 2006, vol. 172, no. 1, pp. 1–30.
- Hane C.A., Barnhart C., Johnson E.L., Marsten R.E., Nemhauser G.L., Sigismondi G. The fleet assignment problem: solving a large-scale integer program. *Mathematical Programming*, 1995, vol. 70, no. 1–3, pp. 211–232.
- 4. Gu Z., Johnson E.L., Nemhauser G.L., Wang Y. Some properties of the fleet assignment Problem. *Operations Research Letters*, 1994, vol. 15, no. 2, pp. 59–71.
- Subramanian R., Scheff R.P., Quillinan J.D., Wiper D.S., Marsten R.E. Coldstart: fleet assignment at delta air lines. *Interfaces*, 1994, vol. 24, no. 1, pp. 104–120.
- Ozdemir Y., Basligil H., Nalbant K.G. Optimization of fleet assignment: a case study in Turkey. *An International Journal of Optimization and Control: Theories & Applications*, 2012, vol. 2, no. 1, pp. 59–71.
- 7. Blegur F.M.A., Bakhtiar T., Aman A. Scenarios for fleet assignment: a case study at Lion Air. *IOSR Journal of Mathematics*, 2014, vol. 10, iss. 5, pp. 64–68.

- Kabbani N.M., Patty B.W. Aircraft Routing at American Airlines. Proceedings of the Thirty-Second Annual Symposium of AGIFORS, Budapest, Hungary, 1992, pp. 12–28.
- Clarke L.W., Johnson E.L., Nemhauser G.L., Zhu Z. The aircraft rotation problem. *Annals of Operations Research*, 1997, vol. 69, pp. 33–46.
- Cordeau J.-F., Stojkovi'c G., Soumis F., Desrosiers J. Benders decomposition for simultaneous aircraft routing and crew scheduling. *Transportation Science*, 2001, vol. 35, no. 4, pp. 375–388.
- Barnhart C., Boland N.L., Clarke L.W., Johnson E.L., Nemhauser G.L., Shenoi R.G. Flight string models for aircraft fleeting and routing. *Transportation Science*, 1998, vol. 32, no. 3, pp. 208–220.
- Elf M., Jünger M., Kaibel V. Rotation planning for the continental service of a European airline. *Mathematics – Key Technologies for the Future*. Berlin, Heidelberg, Springer, 2003, pp. 675–689.
- Sarac A., Batta R., Rump C.M. A branch-and-price approach for operational aircraft maintenance routing. *European Journal of Operational Research*, 2006, vol. 175, no. 3, pp. 1850– 1869.
- 14. Gopalan R., Talluri K.T. The aircraft maintenance routing problem. *Operations Research*, 1998, vol. 46, no. 2, pp. 260–271.
- Ahuja R.K., Goodstein J., Mukherjee A., Orlin J.B., Sharma D. A very large-scale neighborhood search algorithm for the combined through–fleet–assignment model. *INFORMS Journal on Computing*, 2007, vol. 19, no. 3, pp. 416–428.
- Birbil S.I., Frenk J.B.G., Gromicho J.A.S., Zhang S. A network airline revenue management framework based on decomposition by origins and destinations. *Transportation Science*, 2013, vol. 48, no. 3, pp. 313–333.
- Yan S., Tseng C.-H. A passenger demand model for airline flight scheduling and fleet routing. *Computers & Operations Research*, 2002, vol. 29, no. 11, pp. 1559–1581.
- Sandhu R., Klabjan D. Integrated airline fleeting and crew-pairing decisions. *Operations Research*, 2007, vol. 55, no. 3, pp. 439–456.
- Rakshit A., Krishnamurty N., Yu G. System operations advisor: a real-time decision support system for managing airline operations at United Airlines. *Interfaces*, 1996, vol. 26, no. 2, pp. 50–58.
- Lettovsky L. Airline operations recovery: an optimization approach. PhD thesis. School of Industrial & Systems Engineering, Georgia Institute of Technology. Atlanta, GA, USA, 1997. 271 p.
- Kohl N., Larsen A., Larsen J., Ross A., Tiourine S. Airline disruption management perspectives, experiences and outlook. *Journal of Air Transport Management*, 2007, vol. 13, no. 3, pp. 149–162
- 22. Rosenberger J.M. *Topics in airline operations*. PhD thesis. School of Industrial & Systems Engineering, Georgia Institute of Technology. Atlanta, GA, USA, 2002. 265 p.
- Mezentsev Yu.A. Optimizatsiya raspisanii parallel'nykh dinamicheskikh sistem v kalendarnom planirovanii [Optimization of schedules for dynamic parallel service systems]. *Informatsionnye tekhnologii – Information Technology*, 2008, no. 2, pp. 24–33.
- 24. Avdeenko T.V., Mesentsev Yu.A. Efficient approaches to scheduling for unrelated parallel machines with release dates. *IFAC-Papers Online*, 2016, vol. 49, iss. 12, pp. 1743–1748.
- 25. Avdeenko T.V., Mezentsev Yu.A., Estraykh I.V. Heuristic approach to unrelated parallel machines scheduling under availability and resource constraints. *IFAC-PapersOnline*, 2017, vol. 50, iss. 1, pp. 13096–13101.
- Mezentsev Yu.A., Estraykh I.V. Problems and optimization algorithms of schedules of parallel-serial systems with undefined service routes. *Abstracts of the International Conference "Constructive Nonsmooth Analysis and Related Topics"*, St. Petersburg, 2017, pt. 2, pp. 79–83.
- 27. Mezentsev Yu.A. Binary cut-and-branch method for solving linear programming problems with boolean variables. *Proceedings DOOR 2016*. Vladivostok, 2016, vol. 1623, pp. 72–85.

28. Mezentsev Yu.A. Binary cut-and-branch method for solving mixed integer programming problems. *Abstracts of the International Conference "Constructive Nonsmooth Analysis and Related Topics"*, St. Petersburg, 2017, pt. 2, pp. 74–78.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Мезенцев Юрий Анатольевич – родился в 1955 году, д-р техн. наук, профессор кафедры автоматизированных систем управления НГТУ. Область научных интересов: задачи и методы дискретного программирования. Опубликовано 65 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: mezencev@corp.nstu.ru).

**Mezentsev Yury Anatolievich** (b. 1955) – Doctor of Sciences (Eng.), professor at the Automated Control Systems Department, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on problems and methods of discrete programming. He is the author of 65 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: mezencev@corp.nstu.ru).



Эстрайх Игорь Викторович – родился в 1961 году, старший преподаватель кафедры автоматизированных систем управления НГТУ. Область научных интересов: задачи и методы дискретного программирования. Опубликовано 9 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: estrajx@corp.nstu.ru).

Estraykh Igor Viktorovich (b. 1961) – seniorlLecturer at the Automated Control Systems Department, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on problems and methods of discrete programming. He is the author of 9 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: estrajx@corp.nstu.ru).

> Статья поступила 29 июня 2018 г. Received June 29, 2018

To Reference:

Mezentsev Yu.A., Estraykh I.V. Ob odnoi zadache optimal'nogo operativnogo upravleniya dvizheniem vozdushnykh sudov aviakompanii [An optimal fleet assignment and flight scheduling problem for an airline company]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2018, no. 3 (40), pp. 74–90. doi: 10.17212/1727-2769-2018-3-74-90.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

2018 июль-сентябрь

№ 3 (40)

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 621.331

# ШИРОКОПОЛОСНЫЕ ГИБРИДНЫЕ ФИЛЬТРЫ ДЛЯ ТРЕХФАЗНЫХ ЧЕТЫРЕХПРОВОДНЫХ СЕТЕЙ

## А.Ф. Синяговский, М.О. Чернышов, В.П. Довгун, В.В. Новиков, С.А. Темербаев Сибирский федеральный университет

Основной причиной увеличения токов нейтральных проводников в трехфазных четырехпроводных сетях низкого напряжения являются современное офисное оборудование и несимметрия нагрузок. В статье рассмотрена новая конфигурация гибридного широкополосного фильтра для управления качеством электроэнергии в трехфазных четырехпроводных сетях. Предложенный фильтр образован последовательным соединением пассивного широкополосного фильтра и однофазного инвертора. Фильтр может работать как в пассивном, так и в гибридном режиме.

Компенсационные характеристики предложенного фильтра проанализированы с помощью моделирования в среде МАТLAВ. Анализ показал, что предложенный гибридный фильтр является эффективным средством ослабления токов нейтральных проводников.

*Ключевые слова*: трехфазная четырехпроводная сеть, гибридный силовой фильтр, ток нейтрального провода.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-91-102

## Введение

Значительное ухудшение качества электроэнергии в трехфазных четырехпроводных сетях низкого напряжения, которое наблюдается в последние годы, вызвано изменением характера электрических нагрузок офисных, коммерческих и бытовых потребителей. Основную долю нагрузок этих потребителей составляют сравнительно маломощные нелинейные электроприемники, такие как энергосберегающие системы освещения, офисная и компьютерная техника, частотнорегулируемые электроприводы.

В спектре тока, потребляемого однофазными нелинейными нагрузками, преобладает составляющая с частотой третьей гармоники. Гармоники, кратные трем, в трехфазных четырехпроводных сетях образуют систему нулевой последовательности и суммируются в нейтральных проводниках. Это приводит к увеличению потерь, ускоренному старению изоляции и вызванному этим сокращению срока службы электрооборудования, а в ряде случаев – к авариям, вызванным перегревом и разрушением нулевых проводников кабельных линий. Увеличение падения напряжения между нейтральной точкой и землей приводит к сбоям в работе чувствительного электронного оборудования. Кроме того, большие уровни токов третьей гармонической составляющей вызывают дополнительный нагрев обмоток трансформаторов.

Другая проблема трехфазных сетей низкого напряжения заключается в том, что неравномерное включение однофазных нагрузок может вызвать значительную несимметрию токов и напряжений сети. При этом систему нулевой последовательности образуют не только гармоники, кратные трем, но и другие гармоники, что приводит к дополнительному увеличению токов нейтральных проводников.

Ухудшение качества электроэнергии в сетях коммерческих и офисных потребителей вызывает увеличение капитальных вложений и эксплуатационных расхо-

© 2018 А.Ф. Синяговский, М.О. Чернышов, В.П. Довгун,

В.В. Новиков, С.А. Темербаев

дов, связанных с преждевременной заменой оборудования и необходимостью проводить организационные и технические мероприятия по улучшению ситуации. Это требует установки пассивных или активных фильтрокомпенсирующих устройств (ФКУ).

Основные функции компенсирующих устройств, устанавливаемых в трехфазных четырехпроводных сетях низкого напряжения, заключаются в ослаблении токов нейтральных проводников, уменьшении несимметрии напряжений, компенсации реактивной мощности.

Простейшим решением является пассивный фильтр, включенный параллельно нагрузке. На эффективность применения таких фильтров в сетях 0,4 кВ значительное влияние оказывает высокий уровень активного сопротивления сети. Поэтому их использование часто не дает желаемого эффекта [1–3].

Другой вариант пассивного компенсирующего устройства для трехфазных четырехпроводных сетей представляет собой пассивный заграждающий фильтр, настроенный на частоту третьей гармоники и включенный в нейтральный провод [4, 5]. Заграждающий фильтр эффективно ослабляет спектральные составляющие тока нейтрального проводника, имеющие частоту третьей гармоники. Однако анализ, проведенный в [4], показал, что включение заграждающего фильтра вызывает уменьшение среднего значения напряжения на входе выпрямителя. Это приводит к уменьшению выпрямленного напряжения и снижению энергетических показателей преобразовательных устройств.

Распространенным средством уменьшения токов в нейтральных проводниках являются трансформаторы с обмотками, соединенными по схеме «зигзаг». Принцип действия устройства, реализованного по такой схеме, основан на взаимной компенсации магнитных потоков, вызванных токами нулевой последовательности. Такие устройства имеют минимальное сопротивление для токов, образующих систему нулевой последовательности как на основной частоте, так и на частотах высших гармоник. Общая теория пассивных компенсирующих устройств, использующих такой принцип, рассмотрена в [1].

Серьезный недостаток рассматриваемой схемы заключается в том, что она имеет большие габариты и вес. Это может вызвать трудности при установке компенсирующих устройств в офисных зданиях. Кроме того, зигзаг-трансформатор имеет малое сопротивление и для составляющих нулевой последовательности, создаваемых внешней сетью. Это может вызвать значительное увеличение тока в нейтральном проводнике, если напряжение сети несимметрично и содержит составляющие, образующие систему нулевой последовательности.

Универсальным техническим средством управления качеством электроэнергии в трехфазных сетях, обеспечивающим компенсацию реактивной мощности и ослабление высших гармоник, являются активные фильтры (АФ) на основе трехфазных инверторов [6]. Недостатком таких устройств является большое количество ключей, сложные алгоритмы управления. Широкое применение АФ ограничивается их сложностью и высокой стоимостью. Для эффективного ослабления высших гармоник активный фильтр должен иметь значительную мощность, сравнимую с мощностью нелинейной нагрузки. Вследствие этого использование силовых активных фильтров может оказаться экономически нецелесообразным.

Компромиссным решением являются гибридные компенсирующие устройства, представляющие комбинацию активного и пассивного фильтров. Совместное использование пассивного и активного фильтров позволяет уменьшить мощность и стоимость последнего. При этом активный фильтр служит для улучшения компенсационных характеристик пассивного устройства. Гибридные фильтрокомпенсирующие устройства для трехфазных четырехпроводных сетей рассматривались в [3, 7]. Недостаток гибридных ФКУ, рассмотренных в этих работах, заключается в том, что в качестве пассивного компонента используется зигзаг-трансформатор.

В настоящей статье предложена конфигурация гибридного фильтрокомпенсирующего устройства для трехфазных четырехпроводных сетей, в котором пассивная часть реализована широкополосным фильтром, настроенным на частоты гармоник, образующих систему нулевой последовательности. Замена зигзагтрансформатора пассивным фильтром упрощает и удешевляет конструкцию ФКУ.

## 1. Гибридный широкополосный фильтр

Схема предлагаемого гибридного фильтра показана на рис. 1.



*Puc. 1* – Схема гибридного фильтра *Fig. 1* – Configuration of the hybrid filter

В качестве пассивного фильтра используется широкополосный фильтр (ШПФ), имеющий малое сопротивление на частотах высших гармоник (n = 3, 5, ...). На рис. 2 показана схема ШПФ пятого порядка. Фильтр имеет три входа, подключаемых к разноименным фазам сети.

Силовая часть активного фильтра в схеме на рис. 1 представляет собой однофазный инвертор. Напряжение активного фильтра пропорционально гармоническим составляющим тока нейтрального проводника:

$$U_{\mathrm{a}\mathrm{b}} = R_{\mathrm{a}\mathrm{b}\mathrm{l}}I_n^{(1)} + R_{\mathrm{a}\mathrm{b}\mathrm{2}}I_n^{(h)} \,.$$



*Puc.* 2 – Широкополосный пассивный фильтр *Fig.* 2 – Broadband passive filter

Здесь  $R_{a\phi1}$ ,  $R_{a\phi2}$  – управляющие параметры активного фильтра,  $I_n^{(1)}$  – составляющая тока нейтрального проводника с частотой основной гармоники;  $I_n^{(h)}$  – высокочастотные составляющие тока нейтрали.

Управляющие параметры  $A\Phi$  имеют частотные характеристики режекторного и полосно-пропускающего фильтров, настроенных на частоту сети  $\omega_c$ :

$$R_{a\phi1}(e^{j\omega}) = \begin{cases} 1 & \omega \neq \omega_0, \\ 0 & \omega = \omega_0; \end{cases}$$
$$R_{a\phi2}(e^{j\omega}) = \begin{cases} 0 & \omega \neq \omega_0, \\ 1 & \omega = \omega_0. \end{cases}$$

Перечислим преимущества предлагаемого устройства.

1. Важным достоинством является относительно невысокая стоимость, поскольку для силовой части активного фильтра необходим только однофазный инвертор. Кроме того, в трехфазной сети используется только один пассивный фильтр.

2. Удобство установки, так как фильтр включается параллельно нагрузке.

3. Предлагаемое устройство может работать как в пассивном (инвертор отключен), так и в гибридном режиме.

Схема замещения трехфазной сети и гибридного фильтра для составляющих токов и напряжений, образующих симметричную систему нулевой последовательности, показана на рис. 3. Источником высших гармоник может быть внешняя сеть или нелинейная нагрузка, представленная источником тока  $3J_{0\rm H}$ . Здесь  $\dot{E}_{0\rm c}$ ,  $\dot{J}_{0\rm H}$  – составляющие напряжения сети и тока нагрузки, образующие систему нулевой последовательности;  $Z_{\rm n}\phi$ ,  $Z_{\rm c}$  и  $Z_N$  – комплексные сопротивления соответственно пассивного фильтра, фазных и нейтрального проводников на частоте *k*-й гармоники. Активный фильтр в схеме замещения на рис. 3 представлен управляемым источником напряжения  $U_{\rm a}\phi = R_{\rm a}\phi I_n$ .



 Рис. 3 – Схема замещения сети и гибридного фильтра для составляющих нулевой последовательности
 Fig. 3 – Zero-sequence equivalent circuit of the power system and hybrid filter

Ток нейтрального проводника

$$\dot{I}_{n} = \frac{3E_{0c}}{Z_{c} + Z_{\Pi\Phi} + 3(Z_{N} + R_{a\Phi})} - \frac{Z_{\Pi\Phi}J_{0H}}{Z_{c} + Z_{\Pi\Phi} + 3(Z_{N} + R_{a\Phi})}.$$
(1)

Напряжение в точке общего подключения нелинейной нагрузки и гибридного фильтра

$$\dot{U}_{\text{TOT}} = \frac{(Z_{\Pi\Phi} + 3R_{a\Phi})E_{0c}}{Z_{c} + Z_{\Pi\Phi} + 3(Z_{N} + R_{a\Phi})} + \frac{Z_{\Pi\Phi}(Z_{c} + 3R_{a\Phi})J_{0H}}{Z_{c} + Z_{\Pi\Phi} + 3(Z_{N} + R_{a\Phi})}.$$
(2)

Напряжение между нейтральными точками

$$\dot{U}_{nN} = \frac{3Z_n E_{0c}}{Z_c + Z_{\Pi\phi} + 3(Z_N + R_{a\phi})} - \frac{Z_n Z_{\Pi\phi} \dot{J}_{0H}}{Z_c + Z_{\Pi\phi} + 3(Z_N + R_{a\phi})}.$$
(3)

Из формул (1–3) следует, что для составляющих токов и напряжений, образующих симметричную систему нулевой последовательности, действие активного фильтра эквивалентно включению резистора  $R_{a\phi}$  последовательно с сопротивлением нейтрального провода  $Z_n$ . Это способствует уменьшению тока в нейтральном проводнике, снижению напряжения между нейтральными точками. Кроме того, уменьшается возможность возникновения нежелательных резонансных явлений между сетью и пассивным фильтром. Если  $R_{a\phi} >> Z_c$ , активный фильтро оказывает доминирующее влияние на характеристики гибридного устройства.

Пассивный фильтр (рис. 2) представляет собой резистивно нагруженный *LC*-четырехполюсник лестничной структуры. Общий метод расчета широкополосных силовых фильтров произвольного порядка, основанный на использовании методов синтеза пассивных *LC*-фильтров, рассмотрен в [8]. Однако фильтры, рассмотренные в [8], имеют монотонную частотную характеристику входного сопротивления. В рассматриваемом случае необходимо, чтобы широкополосный фильтр осуществлял селективное подавление наиболее мощных гармоник, в первую очередь третьей. Для получения требуемой частотной характеристики были использованы методы оптимизации. Задача оптимизации была сформулирована следующим образом: найти значения элементов цепи, обеспечивающих минимум целевой функции

$$\Phi(\overline{x}) = \sum_{(k)} w_k \left( Z\left(\overline{x}, \omega_k\right) - R_k \right)^2, \quad k = 1, 2, \dots, \overline{x} \in \{L_i, C_i\},$$
(4)

при выполнении ограничений на значения элементов:

$$L_i > 0$$
,  $C_i > 0$ .

В формуле (4) приняты следующие обозначения:

 $Z(\overline{x}, \omega_k)$  – модуль входного сопротивления фильтра на частоте  $\omega_k$ ;

 $R_k$  – требуемое значение входного сопротивления на частоте  $\omega_k$ ;

*w<sub>k</sub>* – весовые коэффициенты, учитывающие важность *k*-го слагаемого.

С помощью предложенной процедуры оптимизации были рассчитаны значения элементов фильтра пятого порядка, обеспечивающего подавление третьей гармоники и ослабление высокочастотных составляющих (n = 5, 7, ...). Для оптимизации использовался пакет *Optimization Toolbox* программного комплекса *MatLab*.

## 2. Моделирование характеристик гибридного фильтра

Для исследования характеристик предложенного фильтра используем модель, реализованную в системе *Matlab*.

Схема модели показана на рис. 4. Параметры модели сети: сопротивление сети  $R_{\rm c} = 1$  Ом, индуктивность  $L_{\rm c} = 0,318$  мГн. Нагрузка имеет линейную и нелинейную части. Нелинейной нагрузкой являются однофазные мостовые выпрямители. Параметры нелинейной нагрузки: сопротивление нагрузки  $R_{\rm H} = 40$  Ом, емкость сглаживающего фильтра C = 530 мкФ, индуктивность  $L_{\rm H} = 1,2$  мГн. Мощность нагрузки  $S_{\rm H} = 2,13$  кВА.



*Puc.* 4 – Модель гибридного фильтра в системе Matlab *Fig.* 4 – MATLAB model of the hybrid filter

Линейная нагрузка представляет последовательную *RL*-цепь, включенную в каждую фазу. Параметры линейной нагрузки: активное сопротивление  $R_{\rm H} = 15$  Ом, индуктивность  $L_{\rm H} = 47,8$  мГн. Мощность нагрузки  $S_{\rm H} = 1,57$  кВА.

Значения параметров активного фильтра:  $R_{a \phi 1} = 0$  Ом ,  $R_{a \phi 2} = 13$  Ом .

*Симметричная нагрузка*. На рис. 5 показана кривая тока  $I_n$  в нейтральном проводнике. Пассивный фильтр включается в момент t = 0, 2 с. При t = 0, 4 с включается активный фильтр.



На рис. 6 показан спектр тока  $I_n$  для различных режимов работы фильтра.



Результаты моделирования сети с симметричной нагрузкой сведены в табл. 1.

Таблица 1 / Table 1

Результаты моделирования сети (симметричная нагрузка) Summary of simulation results (balanced load)

|            |           | v         |              | ( ,           |                  |
|------------|-----------|-----------|--------------|---------------|------------------|
| Режим сети | $I_a$ (A) | $I_n$ (A) | $U_{Nn}$ (B) | THD $I_a$ (%) | THD $U_{an}$ (%) |
| Без ФКУ    | 21,33     | 24,6      | 2,45         | 53,71         | 4,38             |
| ПФКУ       | 19,05     | 10,8      | 1,77         | 44,28         | 2,88             |
| ГФКУ       | 18,78     | 1,6       | 1,27         | 39,72         | 2,77             |

Результаты моделирования показывают, что при симметричном режиме трехфазной сети гибридный фильтр эффективно ослабляет ток нейтрального проводника, а также уменьшает составляющие напряжения в точке общего присоединения, имеющие частоту третьей гармоники. После включения фильтра действующее значение тока нейтрального проводника  $I_n$  уменьшилось более чем в 15 раз, с 24,6 до 1,6 А. Суммарный коэффициент гармоник линейного тока  $I_a$  уменьшился с 53,7 до 39,72 %. Отметим, что при этом мощность активного фильтра не превышает 10 % мощности пассивного фильтра.

**Несимметричная нагрузка.** Для исследования характеристик предложенного фильтра при несимметричном режиме были изменены параметры линейной нагрузки в фазе *A*: сопротивление нагрузки  $R_{\rm H} = 10$  Ом, индуктивность L = 31,847 мГн. Остальные параметры сети остались без изменений. На рис. 7 показана кривая тока в нейтральном проводе при несимметричном режиме работы сети. Как и в первом случае, пассивный и активный фильтры включаются в моменты t = 0,2 с и t = 0,4 с соответственно.





На рис. 8 показан спектр тока  $I_n$  для различных режимов работы фильтра.

Результаты моделирования сети с симметричной нагрузкой сведены в табл. 2.

Таблица 2 / Table 2

Результаты моделирования сети (несимметричная нагрузка) Summary of simulation results (nonbalanced load)

| Режим сети | <i>I</i> <sub><i>a</i></sub> (A) | $I_n$ (A) | <i>U<sub>Nn</sub></i> (B) | THD $I_a$ (%) | THD $U_{an}$ (%) |
|------------|----------------------------------|-----------|---------------------------|---------------|------------------|
| Без ФКУ    | 25,57                            | 25        | 2,5                       | 42,6          | 2,23             |
| ПФКУ       | 22,8                             | 11,84     | 1,84                      | 35,69         | 2,96             |
| ГФКУ       | 21,4                             | 5,24      | 1,32                      | 34            | 2,79             |

После включения фильтра действующее значение тока  $I_n$  уменьшилось с 25 до 5,24 А.

#### Заключение

Рассмотрена новая конфигурация широкополосного гибридного фильтра, предназначенного для ослабления тока нейтрального проводника, вызванного нелинейным характером и несимметрией однофазных нелинейных нагрузок. Важным достоинством предложенного фильтра является его невысокая стоимость, поскольку для реализации силовой части фильтра необходим однофазный инвертор. Кроме того, не требуется трансформатор с обмотками, соединенными по схеме «зигзаг».

Исследованы характеристики предложенного фильтра для случаев симметричной и несимметричной нелинейной нагрузки. Моделирование показало, что предложенный гибридный фильтр эффективно ослабляет ток нейтрального проводника и напряжение между нейтральными точками как в симметричной, так и в несимметричной трехфазной цепи.

# ЛИТЕРАТУРА

- 1. Шидловский А.К., Жаркин А.Ф. Высшие гармоники в низковольтных электрических сетях. Киев: Наукова думка, 2006. 210 с.
- Impacts over the distribution grid from the adoption of distributed harmonic filters on low-voltage customers / M.Ed.L. Tostes, U.H. Bezerra, R.D.S. Silva, J.A.L. Valente, C.C.M. de Moura, T.M.M. Branco // IEEE Ttransactions on Power Delivery. 2005. Vol. 20, N 1. P. 384-389.
- A new hybrid power conditioner for suppressing harmonics and neutral-line current in threephase four-wire distribution power systems / J.-C. Wu, H.-L. Jou, H.-H. Hsiao, S.-T. Xiao // IEEE Transactions on Power Delivery. – 2014. – Vol. 29, N 4. – P. 1525–1532.
- Key T., Lai J.-S. Analysis of harmonic mitigation methods for building wiring systems // IEEE Transactions on Power Systems. – 1998. – Vol. 13, N 3. – P. 890–897.
- Piel J., Lowenstein M. Experimental measurements of energy consumption changes in a wye distribution system serving multiple computer loads as various harmonic solutions are applied // Proceedings of IEEE 11th International Conference on Harmonics and Quality of Power (ICHQP). – Lake Placid, NY, 2004. – P. 294–298.
- Akagi H. Active harmonic filters // Proceedings of the IEEE. 2005. Vol. 93, N 12. P. 2128–2141.
- Choi S., Jang M. Analysis and control of a single-phase-inverter-zigzag-transformer hybrid neutral-current suppressor in three-phase four wire systems // IEEE Transactions on Industry Electronics. – 2007. – Vol. 54, N 4. – P. 2201–2208.
- Синтез фильтрокомпенсирующих устройств для систем электроснабжения: коллективная монография / Н.П. Боярская, В.П. Довгун, Д.Э. Егоров, С.А. Темербаев, Е.С. Шевченко; под ред. В.П. Довгуна. Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2014. 192 с.

# BROADBAND HYBRID FILTER FOR THREE-PHASE FOUR-WIRE POWER SYSTEMS

# Sinyagovskiy A.F., Chernyshov M.O., Dovgun V.P., Novikov V.V., Temerbaev S.A. Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia

Load unbalance and modern office equipment result in a significant neutral current in threephase four-wire low-voltage power systems. This paper considers a new configuration of hybrid broadband filter for power quality management in three-phase four-wire low voltage power systems. The proposed hybrid filter is composed of a single-phase power converter and the broadband passive filter connected in series. The hybrid filter can be operated in both passive and hybrid mode. The compensating performance of the filter is confirmed with computer simulation using MATLAB software. Analysis and simulation proved that the hybrid filter is an effective solution for neutral current mitigation.

Keywords: three-phase four-wire power system; hybrid power filter; neutral line current.

DOI: 10.17212/1727-2769-2018-3-91-102

## REFERENCES

- Shidlovskii A.K., Zharkin A.F. Vysshie garmoniki v nizkovol'tnykh elektricheskikh setyakh [Higher harmonics in low-voltage electrical networks]. Kiev, Naukova dumka Publ., 2006. 210 p.
- Tostes M.Ed.L., Bezerra U.H., Silva R.D.S., Valente J.A.L., Moura C.C.M. de, Branco T.M.M. Impacts over the distribution grid from the adoption of distributed harmonic filters on low-voltage customers. *IEEE Transactions on Power Delivery*, 2005, vol. 20, no. 1, pp. 384–389.
- 3. Wu J.-C., Jou H.-L., Hsiao H.-H., Xiao S.-T. A new hybrid power conditioner for suppressing harmonics and neutral-line current in three-phase four-wire distribution power systems. *IEEE Transactions on Power Delivery*, 2014, vol. 29, no. 4, pp. 1525–1532.
- 4. Key T., Lai J.-S. Analysis of harmonic mitigation methods for building wiring systems. *IEEE Transactions on Power Systems*, 1998, vol. 13, no. 3, pp. 890–897.
- Piel J., Lowenstein M. Experimental measurements of energy consumption changes in a wye distribution system serving multiple computer loads as various harmonic solutions are applied. *Proceedings of IEEE 11th International Conference on Harmonics and Quality of Power* (ICHOP), Lake Placid, NY, 2004, pp. 294–298.
- 6. Akagi H. Active harmonic filters. *Proceedings of the IEEE*, 2005, vol. 93, no. 12, pp. 2128–2141.
- 7. Choi S., Jang M. Analysis and control of a single-phase-inverter-zigzag-transformer hybrid neutral-current suppressor in three-phase four wire systems. *IEEE Transactions on Industry Electronics*, 2007, vol. 54, no. 4, pp. 2201–2208.
- Boyarskaya N.P., Dovgun V.P., Egorov D.E., Temerbaev S.A., Shevchenko E.S. Sintez fil'trokompensiruyushchikh ustroistv dlya sistem elektrosnabzheniya [Synthesis of filtering and compensating devises for power delivery systems]. Krasnoyarsk, Siberian federal university Publ., 2014. 192 p.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Синяговский Артем Феликсович – родился в 1965 году, канд. техн. наук, доцент кафедры систем автоматики, автоматизированного управления и проектирования, Институт космических и информационных технологий, ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет». Область научных интересов: системы управления качеством электроэнергии. Опубликовано 19 научных работ. (Адрес: 660074, Россия, г. Красноярск, ул. Киренского, 26. E-mail: asinyagovskiy@sfu-kras.ru). Sinyagovskiy Artem Feliksovich (b. 1965) – Candidate of Sciences (Eng.), associated professor at the department of Systems of automatic equipment, automated management and design, Institute of Space and Information Technologies, Siberian Federal University. His research interests are currently focused on power quality management systems. He is author of 19 scientific papers. (Address: 26, Kirensky St., Krasnoyarsk, 660074, Russia. E-mail: asinyagovskiy@sfu-kras.ru).



Чернышов Максим Олегович – родился в 1991 году, аспирант кафедры систем автоматики, автоматизированного управления и проектирования, Институт космических и информационных технологий, ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет». Область научных интересов: системы управления качеством электроэнергии. Опубликовано 17 научных работ. (Адрес: 660074, Россия, г. Красноярск, ул. Киренского, 26. E-mail: chernyshov.m.o@gmail.com).

**Chernyshov Maxim Olegovych** (b. 1991) – post-graduate student at the department of Systems of automatic equipment, automated management and design, Institute of Space and Information Technologies, Siberian Federal University. His research interests are currently focused on power quality management systems. He is author of 19 scientific papers. (Address: 26, Kirensky St., Krasnoyarsk, 660074, Russia. E-mail: chernyshov.m.o@gmail.com).



Довгун Валерий Петрович – родился в 1955 году, д-р техн. наук, профессор кафедры систем автоматики, автоматизированного управления и проектирования, Институт космических и информационных технологий, ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет». Область научных интересов: синтез аналоговых и цифровых цепей и систем; системы управления качеством электроэнергии. Опубликовано 160 научных работ. (Адрес: 660074, Россия, г. Красноярск, ул. Киренского, 26. E-mail: valerydovgun@gmail.com).

**Dovgun Valery Petrovich** – (b. 1955) – Doctor of Sciences (Eng.), professor at the department of Systems of automatic equipment, automated management and design, Institute of Space and Information Technologies, Siberian Federal University. His research interests are currently focused on synthesis of analog and digital circuits and systems, power quality management systems. He is author of 160 scientific papers. (Address: 26, Kirensky St., Krasnoyarsk, 660074, Russia. E-mail: valerydovgun@gmail.com).



Новиков Виктор Валерьевич – родился в 1983 году, канд. техн. наук, доцент кафедры систем автоматики, автоматизированного управления и проектирования, Институт космических и информационных технологий, ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет». Область научных интересов: электроэнергетика, системы управления качеством электроэнергии. Опубликовано 17 научных работ. (Адрес: 660074, Россия, г. Красноярск, ул. Киренского, 26. E-mail: nvfagot@mail.ru).

Novikov Viktor Valerievich – (b. 1983) – Candidate of Sciences (Eng.), associate professor at the Department of Automation Systems, Automated Control and Design, Institute of Space and Information Technologies, Siberian Federal University. His research interests are currently focused on energy systems, power quality management systems. He is author of 17 scientific papers. (Address: 26, Kirensky St., Krasnoyarsk, 660074, Russia. E-mail: nvfagot@mail.ru).



Темербаев Сергей Андреевич – родился в 1989 году, канд. техн. наук, доцент кафедры систем автоматики, автоматизированного управления и проектирования, Институт космических и информационных технологий, ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет». Область научных интересов: электроэнергетика, качество электроэнергии. Опубликовано 23 научные работы. (Адрес: 660074, Россия, г. Красноярск, ул. Киренского, 26. E-mail: temwork@mail.ru).

**Temerbaev Sergey Andreevich** – (b. 1989) – Candidate of Sciences (Eng.), associate professor at the department of Systems of automatic equipment, automated management and design, Institute of Space and Information Technologies, Siberian Federal University. His research interests are currently focused on power systems, power quality monitoring. He is author of 23 scientific papers. (Address: 26, Kirensky St., Krasnoyarsk, 660074, Russia. E-mail: temwork@mail.ru).

Статья поступила 10 сентября 2018 г. Received September 10, 2018

To Reference:

Sinyagovskiy A.F., Chernyshov M.O., Dovgun V.P., Novikov V.V., Temerbaev S.A. Shirokopolosnye gibridnye fil'try dlya trekhfaznykh chetyrekhprovodnykh setei [Broadband hybrid filter for three-phase four-wire power systems]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2018, no. 3 (40), pp. 91– 102. doi: 10.17212/1727-2769-2018-3-91-102.

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

# ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Выпуск 3(40) июль-сентябрь 2018

Выпускающий редактор И.П. Брованова Корректор И.Е. Семенова Компьютерная верстка Н.В. Гаврилова

Налоговая льгота – Общероссийский классификатор продукции Издание соответствует коду 95 2000 ОК 005-93 (ОКП)

Подписано в печать 25.10.2018. Бумага офсетная. Формат 70×108 1/16 Тираж 300 экз. Уч.-изд. л. 9,1. Печ. л. 6,5. Изд. № 248. Заказ № 1429

Отпечатано в типографии Новосибирского государственного технического университета 630073, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20