МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Перспективы развития науки и образования

Сборник научных трудов по материалам международной научно-практической конференции

30 мая 2013 г.

Часть 3

ISBN 978-5-4343-0346-0

9 785434 303460

Тамбов
2013

ukonf.com/conf

Перспективы развития науки и образования: сборник научных трудов по материалам международной научно-практической конференции 30 мая 2013 г. Часть 3. Тамбов: ООО «Консалтинговая компания Юком», 2013. 178 с.

ISBN 978-5-4343-0343-9
ISBN 978-5-4343-0346-0 (*Часть 3*)

https://ukonf.com/doc/conf.2013.05.03.pdf

Издание предназначено для научных и педагогических работников, преподавателей, аспирантов, магистрантов и студентов с целью использования в научной работе и учебной деятельности. По материалам международной научно-практической конференции «Перспективы развития науки и образования», Россия, г. Тамбов, 30 мая 2013 г.

Информация об опубликованных статьях предоставляется в систему Российского индекса научного цитирования – **РИНЦ** (*договор 856-08/2013K*).

Электронная версия сборника опубликована в **Электронной библиотеке** (*свидетельство о регистрации СМИ Эл № ФС 77-57716*) и находится в свободном доступе на сайте: **ukonf.com/conf**

Научное издание. Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 11,13. Тираж 500 экз.
Издательство ООО «Консалтинговая компания Юком»
Адрес редакции: Россия, 392000, г. Тамбов, а/я 44
E-mail: conf@ukonf.com

СОДЕРЖАНИЕ

Обнаружено, что при введении небольших количеств галогенид-ионов потенциал электрода заметно смещается к более отрицательным значениям. Это подтверждает роль галогенид-ионов как активаторов коррозии в ДМФА.

В АН имеет место только одна область активного состояния меди, обусловленная ионизацией последней в форме меди (I). В отличие от амидов нитрилы, в т.ч. АН, характеризуются высокой энергией стабилизации меди (I). В безводном АН анодное растворение меди происходит без побочных явлений пассивации, однако, на фоне перхлорат ионов отмечается саморастворение металла, скорость которой достигает до $2{,}3\cdot10^{-5}$ г/см$^2\cdot$мин. В среде ДМСО и НАц поведение медного анода отличается от анодного поведения меди в ДМФА и АН. Вместе с тем оно напоминает анодное поведение меди в водных растворах. В отсутствие галогенид-ионов сами растворители не способствуют стабилизации меди (I) и продуктом электролиза является медь (II). Если использовать в качестве фоновых электролитов хлориды, то возможна генерация как меди (I), так и меди (II) с постоянной и близкой к 100% эффективностью тока.

Таким образом в любых средах галогенид-ионы сохраняют сродство к меди (I), в их отсутствие, если сам растворитель не играет роль комплексообразователя, растворение меди происходит с образованием меди (II).

…

1. Losew V.V., Narkosyan C.N., Molodov A.J. Electrochim. Acta, 17, 701, 1972.

2. Костромин А.И., Бадакшанов Р.М., Евгеньев М.И. В кн. «Электродные процессы и адсорбция». Ч.2, Изд-во Казанского ун-та. Казань, 1978, с.38.

3. Костромин А.И., Бадакшанов Р.М., Абдуллин И.Ф. Бадретдинова Г.З. В сб. «Третья Всесоюзная конференция по аналитической химии. Тезисы докладов». Минск, 1979.

4. Бадакшанов Р.М., Пастушенко Е.В.. Катаев В.А. В сб. «ЭМА-2004. IV Всероссийская конференция по электрохимическим методам анализа с международным участием». Уфа, 2004, с.35.

Байдин Г.В., Куропатенко В.Ф., Лупанов И.В.
Применение неравномерных сеток в расчетах электрических полей

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им.академ. Е.И.Забабахина», Снежинск
ГОУ ВПО «ЮУрГУ», Челябинск

Г.В. Байдин[1], В.Ф. Куропатенко[1, 2], И.В. Лупанов[1]
[1] ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина», Снежинск
[2] ГОУ ВПО «ЮУрГУ», Челябинск

Работа поддержана РФФИ. Грант №13-01-00072

Каждая физическая модель описывает реальные физические процессы с погрешностью $\Delta_{ФИЗ}$. Погрешность математического моделирования складывается из погрешности физической модели и погрешности численного решения $\Delta = \Delta_{ФИЗ} + \Delta_{МАТ}$. Чтобы иметь возможность сравнения физических моделей и выбора модели с минимальным значением $\Delta_{ФИЗ}$, необходимо, чтобы было $\Delta_{МАТ} \ll \Delta_{ФИЗ}$. Особенно это важно, когда речь заходит о моделировании сложных, многофакторных и разномасштабных явлений. Примером могут служить импульсные ускорители электронов [1], используемые для рентгенографии быстропротекающих процессов. Глубина просвечивания массивных образцов оказывается тем больше, чем выше максимальное напряжение электрического поля в формируемом им импульсе. Реализуемая же величина напряжения зависит от взаимодействия нескольких взаимосвязанных конкурирующих процессов: разрядка конденсаторов, транспорт энергии, пробой изоляторов.

В математическом моделировании непрерывные функции заменяются табличными, а дифференциальные уравнения аппроксимируются разностными уравнениями. Необходимость одинакового ограничения погрешности аппроксимации во всей области отыскания решения требует измельчения шагов сетки в областях с большими значениями производных [2]-[5]. В данной работе исследуются решения задачи электростатики, получаемые по оригинальной разностной схеме на адаптивных сетках. Особое внимание обращается на поведение погрешности аппроксимации при переходе от равномерной сетки к неравномерной.

В электростатике уравнения Максвелла для электрического поля принимают вид уравнений Пуассона или Гельмгольца [6]. И в том, и в другом уравнении центральное место занимает оператор Лапласа, который в двумерной цилиндрической (r,z) геометрии имеет вид

$$L\varphi = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right), \qquad (1)$$

где $\varphi(r,z)$ – электрический потенциал. Покроем расчетную область ячейками одинаковой (квадратной) формы, но с разными размерами ребер. Таким образом, каждая ячейка по каждой из своих четырех границ граничит с одной или с несколькими соседними ячейками (Рис.1).

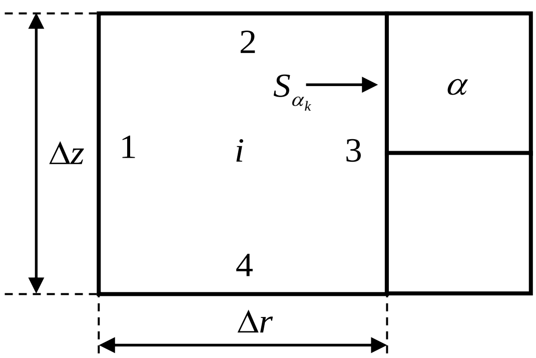

Рис. 1. Нумерация в ячейке расчетной области, на примере ячейки, имеющей два соседа по третьей стороне

Искомую функцию φ определим в центрах ячеек. Для получения разностных соотношений интегро-интерполяционным методом [7] умножим (1) на элемент объема $dV = 2\pi r dr dz$, и проинтегрируем по объему ячейки

$$\int\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{\partial\varphi}{\partial z}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)\right]2\pi r dr dz\,. \qquad (2)$$

Применив теорему Остроградского-Гаусса, запишем (2) в виде

$$\oiint \frac{\partial \varphi}{\partial r} 2\pi r dz + \oiint \frac{\partial \varphi}{\partial z} 2\pi r dr . \qquad (3)$$

Заменив с помощью теоремы о среднем значении поверхностный интеграл на каждой грани сеточной ячейки средним значением подынтегральной функции, получим на адаптивно-встраиваемой сетке, учитывая квадратность ячеек ($\Delta r_i = \Delta z_i = h_i$), разностный оператор Лапласа

$$\Lambda\varphi = \sum_{k=1,3}\sum_{\alpha_k} \frac{2h_{\alpha_k}\left(\varphi_{\alpha_k} - \varphi_i\right)}{h_i + h_{\alpha_k}} \frac{1}{h_i^2} \frac{r_{\alpha_k}}{r_i} + \sum_{k=2,4}\sum_{\alpha_k} \frac{2h_{\alpha_k}\left(\varphi_{\alpha_k} - \varphi_i\right)}{h_i + h_{\alpha_k}} \frac{1}{h_i^2}\left(1 + (3-k)\frac{h_i}{2r_i}\right). \qquad (4)$$

Разлагая входящие в (4) сеточные значения функции φ в ряды Тэйлора в центре сеточной ячейки, получим уравнение

$$\Lambda\varphi = L\varphi + R\varphi , \qquad (5)$$

где R зависит от количества соседних ячеек и имеет вид

$$R(n,m) = \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right)_i (A_n + A_m) + \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}\right)_i (B_n + B_m) + \frac{1}{r_i}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)_i (C_n + C_m) + \omega(h). \qquad (6)$$

Коэффициенты A_n, B_n, C_n зависят от n (число соседей слева и справа), коэффициенты A_m, B_m, C_m зависят от m, (число соседей сверху и снизу). Значения этих коэффициентов приведены в таблице 1.

Таблица 1.

n	2	3	4	m	2	3	4
A_n	0	1/4	1/2	A_m	0	1/24	1/12
B_n	0	1/24	1/12	B_m	0	-1/8	-1/4
C_n	0	1/12	1/6	C_m	0	0	0

Так, если по каждой стороне ячейки имеется только по одному соседу, то $n=2$, $m=2$ и выражение (6) переходит к виду для равномерной сетки, имеющему второй порядок аппроксимации по h (на оси – первый порядок). Однако, как только хотя бы по одной стороне появляется более одного соседа, в выражении (6) появляются члены, не зависящие от h. Например, для случая, когда ячейка справа граничит с двумя соседями (рис. 1) со стороной вдвое меньшей, чем у самой этой ячейки ($n=3$, $m=2$), в выражении R (6) появляются члены, не зависящие от h

$$R(n,m) = \frac{1}{4}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right)_i + \frac{1}{24}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}\right)_i + \frac{1}{12}\frac{1}{r_i}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)_i + \omega(h). \qquad (7)$$

Из (5)-(7) следует, что при $n=3$, $m=2$ уравнение (5) принимает вид

$$\Lambda\varphi = L_1\varphi + \omega(h) \qquad (8)$$

где

$$L_1\varphi = \frac{5}{4}\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} + \frac{25}{24}\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{13}{12}\frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial r}.$$

Иными словами, аппроксимация оператора $\Lambda\varphi$ оператором $L\varphi$ не является сходящейся, а вот аппроксимация оператора $\Lambda\varphi$ оператором $L_1\varphi$ является сходящейся. Если теперь рассмотреть решение уравнений $\Lambda\varphi = 0$, $L\varphi = 0$, $L_1\varphi = 0$, то при $h = 0$ решение разностного уравнения $\Lambda\varphi = 0$ должно сходиться к точному решению дифференциального уравнения $L_1\varphi = 0$, а не к точному решению φ уравнения $L\varphi = 0$. Для оценки $|\varphi_1 - \varphi|$ рассмотрим модельную задачу. Пусть внутри осесимметричной конструкции в 2D цилиндрической геометрии в вакуумной области между двумя проводящими телами (катодом и анодом) (Рис.2).

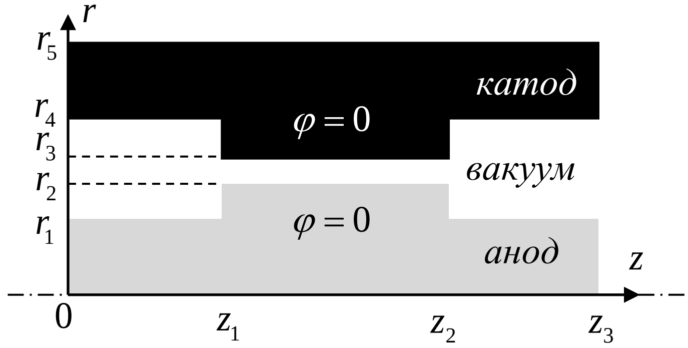

Рис. 2. Геометрия модельной задачи

Необходимо отыскать распределение потенциала электрического поля. Для этого требуется решить уравнение Лапласа

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right) = 0$$

в области, указанной на Рис. 1, $z_1 = 1/3 z_3$, $z_2 = 2/3 z_3$, $r_1 = 0.2 r_5$, $r_2 = 0.45 r_5$, $r_3 = 0.55 r_5$, $r_4 = 0.8 r_5$. С граничными условиями $\partial\varphi/\partial z = 0$ при $z = 0$, $z = z_3$, $0 \le r \le r_5$, $\varphi = 0$ в области анода (Рис. 1) в том числе и на его поверхности, и $\varphi = 1$ в области катода и на его поверхности. Если ширина цилиндрического зазора между анодом и катодом $r_3 - r_2$ существенно меньше его длины $z_2 - z_1$, то в сечении $z = 0.5 z_3$ решение близко к одномерному. Решение одномерного уравнения $\frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} = 0$ после перехода к безразмерной величине $R = r/r_2$ в области $1 \le R \le R_2$ ($R_2 = r_3/r_2 = 1.2222$) имеет вид $\varphi = 4.9833 \ln R$. Если в одномерной задаче выбрать сетку с длиной интервалов, определяемой по геометрической прогрессии со знаменателем $q = 2$, то при $h \to 0$ численное решение сходится к точному решению дифференциального уравнения

$$L_1\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{8}{9} r \frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} = 0,$$

которое имеет вид $\varphi_1 = 44.3515\left(R^{1/9} - 1\right)$. В области $1 \le R \le R_2$

$$\max\left|\frac{\varphi - \varphi_1}{\varphi}\right| < 0.01.$$

Такая погрешность вполне приемлема в условиях, когда параметры рассчитываемой установки задаются с точностью не выше 5%.

В заключении рассмотрим, в соответствии с [8] вопрос о поведении погрешности аппроксимации $\omega(h)$ в (8). Для этого используем метод измельчения сетки. В исходном расчете длину ребра сеточной ячейки обозначим h_0, в расчете с номером k $h_k = h_0 2^{-k}$. В качестве характеристики решения на k-ой сетке используем величину $\psi_k = \sum_i \left|\varphi_k(r_i, z_i)\right| r_{ik} \Delta r_{ik} \Delta z_{ik}$, где суммирование ведется по всем ячейкам сетки. Характер зависимости $\omega(h)$ при $h \to 0$, то есть характер зависимости $\left\|\varphi_k - \varphi_{k+1}\right\|_{L_1}$ от числа точек h_k / h_0 приведен на Рис. 3.

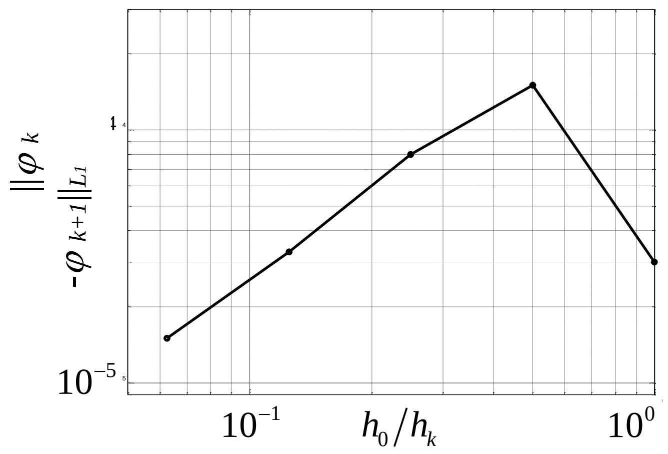

Рис. 3. Сходимость в норме *L₁*

Как видно из Рис. 3 скорость сходимости к решению уравнения $L_1\varphi = 0$ есть величина первого порядка, кроме первого дробления сетки $k = 1$. И хотя предельное решение уравнения $L_1\varphi = 0$ отличается от решения уравнения $L\varphi = 0$, метод неоднородных сеток применим для моделирования электрических полей в электрофизических установках с разномасштабными конструктивными элементами.

…

1. В.Ю.Кононенко, А.И.Кормилицын, Н.П.Кураков и др. Экспериментальная база установок РФЯЦ-ВНИИТФ для радиационных исследований и испытаний изделий электронной техники. // ВАНТ, 2008. – серия: Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру, вып.2, С.121-125

2. В.Д. Лисейкин. О построении регулярных сеток на n-мерных поверхностях. // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1991. Т. 31, №12. С. 1670-1689.

3. В.Д. Лисейкин. О вариационном методе построения адаптивных сеток на n-мерных поверхностях. // Докл. АН СССР. 1991. Т. 139, №3. С. 546-549.

4. Ю.И. Шокин, В.Д. Лисейкин, А.С. Лебедев, Н.Т. Данаев, И.А. Китаева. Методы римановой геометрии в задачах построения разностных сеток. – Новосибирск: Наука, 2005. – 254с.

5. M.J. Berger and J. Oliger. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. J. of Comput. Phys. 53:484-512, 1984.

6. Л.А.Вайнштейн. Электромагнитные волны. -М.: Радио и связь, 1988

7. А.А. Самарский. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977

8. Г.В. Байдин, И.А. Литвиненко, И.В. Лупанов. О численной сходимости на неравномерных сетках одной разностной схемы для задачи теплопроводности// Вестник НИЯУ МИФИ, 2013, Том 2, №1, С. 52-58.