

Карельский научный центр
Российской академии наук

ТРУДЫ

КАРЕЛЬСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

№ 8, 2017

Серия МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Петрозаводск
2017

Научный журнал
**Труды Карельского научного центра
Российской академии наук**
№ 8, 2017
Серия МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Scientific Journal
**Transactions of the Karelian Research Centre of the
Russian Academy of Sciences**
№ 8, 2017
MATHEMATICAL MODELING AND INFORMATION
TECHNOLOGIES Series

Главный редактор
А. Ф. ТИТОВ, член-корр. РАН, д. б. н., проф.

Редакционный совет

А. М. АСХАБОВ, академик РАН, д. г.-м. н., проф.; О. Н. БАХМЕТ (зам. главного редактора), член-корр. РАН, д. б. н.; А. В. ВОРОНИН, д. т. н., проф.; И. В. ДРОБЫШЕВ, доктор биологии (Швеция – Канада); Э. В. ИВАНТЕР, член-корр. РАН, д. б. н., проф.; А. С. ИСАЕВ, академик РАН, д. б. н., проф.; Х. ЙООСТЕН, доктор биологии, проф. (Германия); А. М. КРЫШЕНЬ, д. б. н.; Е. В. КУДРЯШОВА, д. флс. н., проф.; О. Л. КУЗНЕЦОВ, д. б. н.; В. В. МАЗАЛОВ, д. ф.-м. н., проф.; Н. Н. НЕМОВА, член-корр. РАН, д. б. н., проф.; О. ОВАСКАЙНЕН, доктор математики, проф. (Финляндия); О. Н. ПУГАЧЕВ, академик РАН, д. б. н.; С. А. СУББОТИН, доктор биологии (США); Д. А. СУБЕТТО, д. г. н.; Н. Н. ФИЛАТОВ, член-корр. РАН, д. г. н., проф.; Т. Э. ХАНГ, доктор географии (Эстония); П. ХОЛТА, доктор геологии, проф. (Финляндия); К. ШАЕВСКИ, доктор математики, проф. (Польша); В. В. ЩИПЦОВ, д. г.-м. н., проф.

Editor-in-Chief
A. F. TITOV, RAS Corr. Fellow, DSc (Biol.), Prof.

Editorial Council

A. M. ASKHABOV, RAS Academician, DSc (Geol.-Miner.), Prof.; O. N. BAKHMET (Deputy Editor-in-Chief), RAS Corr. Fellow, DSc (Biol.); I. V. DROBYSHEV, PhD (Biol.) (Sweden – Canada); N. N. FILATOV, RAS Corr. Fellow, DSc (Geog.), Prof.; T. E. HANG, PhD (Geog.) (Estonia); P. HÖLTTÄ, PhD (Geol.), Prof. (Finland); A. S. ISAIEV, RAS Academician, DSc (Biol.), Prof.; E. V. IVANTER, RAS Corr. Fellow, DSc (Biol.), Prof.; H. JOOSTEN, PhD (Biol.), Prof. (Germany); A. M. KRYSHEN', DSc (Biol.); E. V. KUDRYASHOVA, DSc (Phil.), Prof.; O. L. KUZNETSOV, DSc (Biol.); V. V. MAZALOV, DSc (Phys.-Math.), Prof.; N. N. NEMOVA, RAS Corr. Fellow, DSc (Biol.), Prof.; O. OVASKAINEN, PhD (Math.), Prof. (Finland); O. N. PUGACHYOV, RAS Academician, DSc (Biol.); V. V. SHCHIPTSOV, DSc (Geol.-Miner.), Prof.; S. A. SUBBOTIN, PhD (Biol.) (USA); D. A. SUBETTO, DSc (Geog.); K. SZAJEWSKI, PhD (Math.), Prof. (Poland); A. V. VORONIN, DSc (Tech.), Prof.

Редакционная коллегия серии
«Математическое моделирование и информационные технологии»

Ю. В. ЗАЙКА, д. ф.-м. н., проф.; А. Н. КИРИЛЛОВ, д. ф.-м. н., доцент; В. Ф. КОЛЧИН, д. ф.-м. н., проф.; В. В. МАЗАЛОВ (ответственный редактор), д. ф.-м. н., проф.; Ю. Л. ПАВЛОВ (зам. ответственного редактора), д. ф.-м. н., проф.; Л. А. ПЕТРОСЯН, д. ф.-м. н., проф.; А. В. СОКОЛОВ, д. ф.-м. н., проф.; Т. П. ТИХОМИРОВА (ответственный секретарь), к. т. н., доцент.

Editorial Board of the «Mathematical Modeling and Information Technologies» Series

Yu. V. ZAIKA, DSc (Phys.-Math.), Prof.; A. N. KIRILLOV, DSc (Phys.-Math.), Assistant Prof.; V. F. KOLCHIN, DSc (Phys.-Math.), Prof.; V. V. MAZALOV (Editor-in-Charge), DSc (Phys.-Math.), Prof.; Yu. L. PAVLOV (Deputy Editor-in-Charge), DSc (Phys.-Math.), Prof.; L. A. PETROSIAN, DSc (Phys.-Math.), Prof.; A. V. SOKOLOV, DSc (Phys.-Math.), Prof.; T. P. TIKHOMIROVA (Executive Secretary), PhD (Tech.), Assistant Prof.

ISSN 1997-3217 (печатная версия)
ISSN 2312-4504 (онлайн-версия)

Адрес редакции: 185910 Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11
тел. (8142)762018; факс (8142)769600
E-mail: trudy@krc.karelia.ru

Электронная полнотекстовая версия: <http://transactions.krc.karelia.ru>

© Карельский научный центр РАН, 2017
© Институт прикладных математических исследований
Карельского научного центра РАН, 2017

УДК 338.45:621.31(470.22)

ЗАДАЧИ И МЕТОДЫ РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩЕЙ ОПТИМИЗАЦИИ В ЭЛЕКТРОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ

Г. А. Борисов, Т. П. Тихомирова

*Институт прикладных математических исследований
Карельского научного центра РАН, Петрозаводск*

В статье обосновывается применение в электроэнергетической системе универсального метода минимизации расхода энергетического, эксплуатационного, финансового и экологического ресурса, заключающегося в стабилизации на заданном интервале времени суммарной мощности потребления и распределении поровну между генерирующими агрегатами стабилизированной нагрузки потребителей, если агрегаты одинаковые. В случае неодинаковых агрегатов для минимизации расхода какого-либо ресурса стабилизированная общая их нагрузка распределяется по условию равенства первых производных расходных характеристик агрегатов.

Ключевые слова: энергетический (топливный) ресурс; эксплуатационный ресурс; финансовый ресурс; экологический ресурс; минимизация расхода ресурсов; стабилизация нагрузки потребителей; равное распределение нагрузки потребителей.

G. A. Borisov, T. P. Tikhomirova. PROBLEMS AND METHODS OF RESOURCE- SAVING OPTIMIZATION IN AN ELECTRIC POWER SYSTEM

The paper substantiates the application of a universal method for minimizing the consumption of the energy resource, operating life, financial and environmental resources in an electric power system. The method consists in the stabilization of the total consumed power over a given time interval and the distribution of the stabilized consumer load equally among generating units in the case where all units are identical. Where the units are not identical, the consumption of a resource can be minimized by distributing their combined stabilized load based on the condition of equality of the first derivatives of the units' discharge characteristics.

Key words: energy (fuel) resource; operating life; financial resource; environmental resource; resource consumption minimization; consumer load stabilization; equal distribution of consumer loads.

Рыночная система управления функционированием электроэнергетики, заменившая ранее существовавшую в период плановой экономики систему иерархического централизованного оптимального управления, привела к ряду негативных тенденций [1]:

- увеличению потерь энергии и мощности на стадиях генерации, транспорта и распределения;
- высокой степени выработки эксплуатационного ресурса основного оборудования;

- росту штатного коэффициента и снижению производительности труда;
- снижению эффективности и объема капитальных вложений.

Произошло увеличение расхода всех видов ресурсов – энергетических, эксплуатационных, финансовых, экологических.

Итоговым результатом изменения системы управления электроэнергетики стало многократное повышение тарифов на электроэнергию и мощность, приводящее к снижению конкурентоспособности российской экономики. Ввиду этого основной целью «Энергетической стратегии России на период до 2030 года» является максимально эффективное использование энергетических ресурсов.

В данной работе обосновывается использование метода оптимального управления нормальным режимом электроэнергетической системы, минимизирующего расход энергетических, эксплуатационных и финансовых ресурсов.

Начало исследований по оптимизации нормальных режимов энергосистем было положено работой Н. А. Сахарова [2], в которой обосновано использование метода неопределенных множителей Лагранжа для наилучшего распределения активных нагрузок между несколькими параллельно работающими генераторами, позволяющего находить минимум суммарного расхода топлива при заданном значении их общей нагрузки. В дальнейшем этот метод был существенно развит в различных направлениях, учитывающих потери в сетях, изменения состава оборудования, использования ГЭС с водохранилищами, возможности численных методов оптимизации и математического программирования и др. Он широко применялся в дореформенный период в отечественных и зарубежных электроэнергетических системах для оптимального управления нормальными режимами [3]. Однако это не изменило сущности исходной задачи Н. А. Сахарова.

В условиях рыночной экономики целевой функцией энергопредприятия является получение максимальной прибыли или (в многолетнем периоде) дисконтированного дохода. Будем считать, что в условиях эксплуатации для такого предприятия отсутствуют капиталовложения, неизменны структура оборудования, штаты, расходные материалы, курс рубля, цены. Топливная составляющая себестоимости превалирует над суммой других. Тогда для каждого ограниченного интервала времени T , в пределах которого оптимизируется

нормальный (установившийся) режим, максимум прибыли Π получается при минимуме потерь энергии:

$$\max \Pi = C_{\text{Э}}W - C_T \left(W + \min \Delta t \sum_{j=1}^T \Delta B(P_j) \right), \quad (1)$$

где $C_{\text{Э}}$, C_T – цена (тариф) на электроэнергию и топливо;

W – объем реализованной энергии;

$\Delta B(P_j)$ – потери мощности;

Δt – интервал времени, в течение которого мощность P_j считается неизменной;

$\Delta t \sum_{j=1}^T \Delta B(P_j)$ – потери энергии.

В реальных условиях тарифы на электроэнергию и топливо увеличиваются с учетом фактических инфляций и издержек за предыдущий период (обычно год) и прибыли, необходимой для выплат дивидендов акционерам. Система государственного тарифного регулирования ограничивает прибыль некоторой нормой, которая получается при

$$d \leq \frac{\Pi}{C_{\text{Э}}W} = \frac{C_{\text{Э}}W - C_T \left(W - \Delta t \sum_{j=1}^T \Delta B(P_j) \right)}{C_{\text{Э}}W} \quad (2)$$

и

$$C_{\text{Э}} \leq \frac{C_T W - C_T \Delta t \sum_{j=1}^T \Delta B(P_j)}{(1-d)W}.$$

Обозначим

$$C_T \Delta t \sum_{j=1}^T \Delta B(P_j) = X,$$

тогда

$$\max \Pi = \max \left(\frac{C_T + X}{(1-d)} - C_T W - X \right) = \max \frac{C_T d \left(W_T + \Delta t \sum_{j=1}^T \Delta B(P_j) \right)}{(1-d)},$$

$$\arg \max \Pi = \arg \max \Delta t \sum_{j=1}^T \Delta B(P_j), \quad (3)$$

т. е. при заданной норме прибыли и энергии W максимум прибыли получается при максимуме потерь первичной энергии.

Это условие максимума прибыли привело к отмеченному в начале статьи увеличению расхода ресурсов в электроэнергетике.

Такая система управления грозит разрушением самой технологической системы и

требует разработки принципов эффективно-го управления ею [1], поскольку рыночная система показала крайне высокую неэффективность конкуренции. Это можно объяснить принципиальным несоответствием рыночных механизмов для управления сложной неаддитивной системой, которой является электро-энергетическая система, поскольку электро-энергия, поставляемая в общую электриче-скую сеть, не может быть идентифицирова-на как товар, произведенный тем или иным производителем [1]. Кроме того, не могут раз-деляться потери мощности и энергии, фор-мирующие издержки между потребителями, и, соответственно, устанавливаться пропорци-ональные им цены у потребителей.

Вследствие этого необходимы методы опе-ративного управления, учитывающие свой-ства сложных электроэнергетических систем:

- превалирование потерь энергии и мощно-сти над подведенной ими конечной энер-гией и мощностью;
- нелинейные и разрывные characterи-стики потерь мощности;
- случайный характер потребляемой по-требителями мощности.

Кроме того, эти методы должны учитывать новые тенденции в развитии электротехно-логий [1] (появление «умных» сетей и элементов, развитие распределенной генерации, накопи-телей энергии, регулирование спроса потре-бителей) и повысить эффективность управле-ния, сниженную в ходе рыночных реформ.

Восстановление работы системы централи-зованного иерархического управления в части управления нормальными режимами не решит кардинально задачу снижения расхода боль-шинства расходующих ресурсов, т. к. снизит только расход первичной энергии на 1–2 %. Ввиду этого необходим поиск других методов, более эффективных и универсальных.

Применявшийся в период плановой эконо-мики метод неопределенных множителей Лагранжа находит сумму локальных мини-мумов расхода первичной мощности на каж-дом заданном интервале времени, но не находит глобального минимума расхода энергии за сумму этих интервалов. Ввиду этого один из путей повышения энергетической эффектив-ности – нахождение глобального минимума.

Для нахождения минимума расхода энер-гии изменим цель и постановку задачи Н. А. Сахарова.

Как и в его задаче, примем, что в простей-шем случае имеется m агрегатов с расходны-

ми характеристиками, определяющими зави-симость расхода первичной мощности B от вы-ходной P , вида:

$$\begin{aligned} B_1 &= a_1 + b_1 \cdot P_1 + c_1 \cdot P_1^2 + d_1 \cdot P_1^3, \\ &\dots\dots\dots \\ B_i &= a_i + b_i \cdot P_i + c_i \cdot P_i^2 + d_i \cdot P_i^3, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (4)$$

$$B_m = a_m + b_m \cdot P_m + c_m \cdot P_m^2 + d_m \cdot P_m^3,$$

работающими параллельно на общую нагрузку

$$P_c = P_1 + \dots + P_i + \dots + P_m. \quad (5)$$

Общая нагрузка агрегатов P_c (суммарная мощность приемников и потери ее в сети) при-нимает через одинаковые промежутки време-ни Δt значения по графику $P_{c1}, P_{c2}, \dots, P_{cn}, \dots, P_{cn}$. В течение времени Δt выходная мощ-ность каждого агрегата считается неизменной.

Требуется найти значения общей нагрузки P_{cj} и каждого i -го агрегата P_{ij} в каждый j -й промежуток времени, чтобы достигалась сумма не локальных минимумов

$$\sum_{i=1}^m \min \Delta t \sum_{j=1}^n B_{ij}(P_{ij})$$

расхода первичной энергии W_1 , а наименьших минимумов из локальных, т. е. общий мини-мум многоэкстремальной функции ее расхода

$$W_1 = \min \Delta t \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n B_{ij}(P_{ij}) \quad (6)$$

при выработке за время

$$T = n \cdot \Delta t$$

заданного количества энергии

$$W_2 = \Delta t \sum_{j=1}^n P_{cj}. \quad (7)$$

В каждый j -й интервал времени общая на-грузка P_{cj} получается за счет генерации ее m агрегатами:

$$P_{cj} = P_{1j} + \dots + P_{ij} + \dots + P_{mj} = \sum_{i=1}^m P_{ij}, \quad (8)$$

а за весь период T генерируемая энергия W_2 составит величину (7).

На ее производство потребуется в соответ-ствии с расходными характеристиками агрега-тов первичная энергия

$$W_1 = \Delta t \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n B_{ij}(P_{ij}), \quad (9)$$

где $B_{ij}(P_{ij})$ – расход первичной мощности у i -го агрегата в j -й интервал времени.

В общем виде расходные характеристики (4) имеют вид

$$B_{ij}(P_{ij}) = \sum_{k=0}^3 a_{ki} P_{ij}^k, \quad (10)$$

поэтому

$$W_1 = \Delta t \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \sum_{k=0}^3 a_{ki} (P_{ij}^k). \quad (11)$$

Минимум функции (9)

$$W_1 = F(\{P_{ij}\})$$

получается при равенстве ее первых производных по всем переменным (относительных приростов агрегатов) величине λ :

$$\frac{\partial W_1}{\partial P_{ij}} = \lambda, \quad (12)$$

а условный минимум при фиксированном значении W_2 при выполнении условия (12) [4].

Условие (12) дает систему уравнений с $n \cdot m$ неизвестными вида

$$\Delta t \left(\sum_{k=1}^3 k a_{ki} P_{ij}^{k-1} \right) = \lambda. \quad (13)$$

Из равенства коэффициентов a_{ki} между собой, обусловленного неизменностью расходной характеристики вида (4) каждого i -го агрегата в

разные интервалы времени $\{1, \dots, j, \dots, m\}$, следует, что

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^3 k a_{ki} P_{i1}^{k-1} &= \dots = \sum_{k=1}^3 k a_{ki} P_{ij}^{k-1} = \\ &= \dots = \sum_{k=1}^3 k a_{ki} P_{in}^{k-1}, \end{aligned} \quad (14)$$

и характеристики каждого агрегата не зависят от интервалов времени. Поэтому

$$P_{i1} = \dots = P_{ij} = \dots = P_{in} = P_{i \text{ ср}} = \frac{W_i}{T}, \quad (15)$$

и работать каждый агрегат должен все время T с постоянной мощностью.

В соответствии с (8) при неизменной в течение времени T мощность каждого генерирующего агрегата неизменна и равна средней их общей нагрузке

$$P_{c_j} = \frac{W_2}{T} = P_{c \text{ ср}}. \quad (16)$$

В результате для определения минимума потребляемой за период T первичной энергии $\min W_1$ из условий (7), (12) получается более простая система $n+1$ уравнений

$$\begin{cases} a_{11} + 2a_{21} + 3a_{31} P_{1 \text{ ср}}^2 = \lambda, \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ a_{1i} + 2a_{2i} + 3a_{3i} P_{i \text{ ср}}^2 = \lambda, \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ a_{1n} + 2a_{2n} + 3a_{3n} P_{n \text{ ср}}^2 = \lambda, \\ P_{1 \text{ ср}} + \dots + P_{i \text{ ср}} + \dots + P_{n \text{ ср}} = \frac{W_2}{T} = P_{c \text{ ср}}. \end{cases} \quad (17)$$

Решение этой системы дает значения стабилизированной мощности каждого агрегата $P_{i \text{ ср}}$ за период T .

Таким образом, для получения общего минимума расхода первичной энергии в системе, состоящей из n генерирующих агрегатов, работающих на общую нагрузку, требуется эту нагрузку стабилизировать в течение времени T на уровне средней и распределить ее по условию равенства относительных приростов между генерирующими агрегатами.

Сформулированная задача (4), (5), (6) может считаться обобщением задачи Н. А. Сахарова и задачи минимизации расхода первичной энергии на одном нелинейном элементе энергосистемы [5].

Основной недостаток такого метода управления – стабилизированный график мощности потребителей в системе, лишаящий потребителей энергии свободы выбора момента включения, и величины потребляемой мощности.

Частично (при небольшом количестве параллельно работающих агрегатов), без дополнительных потерь первичной энергии этого можно избежать, составляя график работы агрегатов таким образом, чтобы время плановых ремонтов и простоев в резерве агрегатов приходилось на провал графика нагрузки, а в период максимума работали все агрегаты.

Реализация обобщенной задачи генерирования электроэнергии с минимумом расхода первичной энергии позволяет повысить эффективность управления в системе, так как даст минимум расхода первичной энергии, а не сумму локальных ее минимумов на отдельных промежутках времени. Кроме того, при достижении минимума расхода первичной энергии в качестве косвенного достигается минимум располагаемой в системе суммарной мощности, необходимой для выработки требуемого количества выработанной энергии.

Стабилизируемая во времени при таком методе оптимизации мощность отдельных агрегатов и всей системы приводит к стабилизации первичной мощности и, соответственно, к стабилизации себестоимости производства электроэнергии, что устраняет одну из причин роста тарифов – увеличение потерь первичной энергии. Поэтому данное свойство оптимального режима имеет важное следствие – получаемая при нем энергия стационарна. Она имеет неизменные во времени параметры, в том числе и стоимостные, и становится адекватной рыночным условиям.

Частная задача для одного элемента энергосистемы выявляет возможность разделения потерь энергии ΔW_i на две составляющие, которые можно назвать статической и динамической [6, 7].

$$\Delta W_i = \Delta t \sum_{i=1}^n (B_i(P_{i\text{cp}}) - P_{i\text{cp}}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 B_i(P_i)}{\partial P_i^2} \sum_j^T (P_{ij} - P_{i\text{cp}})^2, \quad (18)$$

где первый член – статические потери энергии, а второй – динамические потери энергии, зависящие от дисперсии конечной мощности $\sum_j^T (P_{ij} - P_{i\text{cp}})^2$.

Первая статическая составляющая потерь энергии определяется средним значением выходной мощности по расходной характеристике элемента. Вторая зависит от дисперсии отклонения нагрузки от среднего значения и второй производной расходной характеристики.

Стабилизация нагрузки влияет только на динамическую составляющую потерь, и поэтому полная стабилизация дает снижение динамической составляющей до нуля.

Условием для возникновения динамической составляющей потерь энергии является наличие дисперсии (неравномерности графика нагрузки) и второй производной расходной характеристики элемента. Таким же условием обладает эксплуатационный ресурс электрооборудования, определяемый преимущественно старением его электроизоляции и подшипников, зависящим от температуры перегрева [8, 9], определяемым нагрузкой.

Для электрооборудования срок службы изоляции обмоток T определяется законом Аррениуса

$$T = A \exp(-B(\nu_{\text{oc}} + \Delta\nu_n)), \quad (19)$$

где ν_{oc} – температура окружающей среды, °С; $\Delta\nu_n$ – превышение температуры изоляции над температурой окружающей среды, °С.

В соответствии с формулой (19) у изоляции обмоток выбирается предельно допустимая температура нагрева в зависимости от принимаемого срока ее службы и класса по нагревостойкости, так называемая максимальная номинальная рабочая температура. Получаемые при максимальной номинальной рабочей температуре мощность и ток принимаются за номинальные. Вследствие этого в установившемся режиме работы с постоянным значением максимальной номинальной рабочей температуры $\nu_{\text{oc}} + \Delta\nu_n^{\text{max}}$ все тепло изолированного проводника, образующееся в нем потерями мощности ΔP_{H} при номинальном значении нагрузки P_{H} , рассеивается в окружающую среду, и соблюдается простейший баланс [10]

$$\Delta P_{\text{H}} = R \cdot \Delta\nu_n^{\text{max}}, \quad (20)$$

где R – коэффициент теплоотдачи с поверхности изоляции, Вт/°С; ν_n^{max} – предельно допустимое превышение температуры обмотки над температурой окружающей среды ν_{oc} , °С.

Исходя из условия (20), определяется численное значение коэффициента теплоотдачи

$$R = \frac{\Delta P_{\text{H}}}{\Delta\nu_n^{\text{max}}}. \quad (21)$$

Ввиду постоянства коэффициента теплоотдачи появляется возможность определять текущее значение температуры перегрева изоляции при любом установившемся значении потерь мощности ΔP :

$$\Delta\nu_n = \frac{\Delta P}{R} = \frac{\Delta P \cdot \Delta\nu_n^{\text{max}}}{\Delta P_{\text{H}}}. \quad (22)$$

В свою очередь, потери мощности имеют две составляющие – постоянную (холостого хода) ΔP_{xx} и переменную (нагрузочную), поэтому

$$\Delta P = \Delta P_{\text{xx}} + \Delta P_{\text{H}} \cdot k_{\text{HГ}}^2 = \Delta P_{\text{xx}} + \Delta P_{\text{H}} \cdot \frac{P^2}{P_{\text{H}}^2}, \quad (23)$$

где ΔP_{H} – нагрузочные потери при номинальной мощности; $k_{\text{HГ}}$ – коэффициент нагрузки.

Тогда температура нагрева обмотки и изоляции в формуле (19) при любом значении нагрузки будет определяться тремя составляющими:

$$\nu_{\text{oc}} + \Delta\nu_n^{\text{max}} = \nu_{\text{oc}} + \frac{\Delta P_{\text{xx}}}{R} + \frac{\Delta P_{\text{H}}}{R} \cdot \frac{P^2}{P_{\text{H}}^2}, \quad (24)$$

т. е. суммой температур окружающей среды, перегрева при работе в длительном режиме холостого хода, перегрева от нагрузочных потерь, пропорциональных квадрату коэффициента нагрузки $k_{\text{HГ}} = P/P_{\text{H}}$.

В итоге формула (19) при подстановке в нее (24) принимает вид

$$T = A \exp \left[-B \cdot \left(\nu_{oc} + \frac{\Delta \nu_n^{\max}}{\Delta P_n} \cdot \Delta P_{xx} + \frac{\Delta \nu_n^{\max}}{\Delta P_n} \cdot \Delta P_{nn} \cdot \frac{P^2}{P_n^2} \right) \right]. \quad (25)$$

Такой вид зависимости срока службы изоляции электрооборудования дает возможность определить выработку эксплуатационного ресурса N , определяемую по формуле

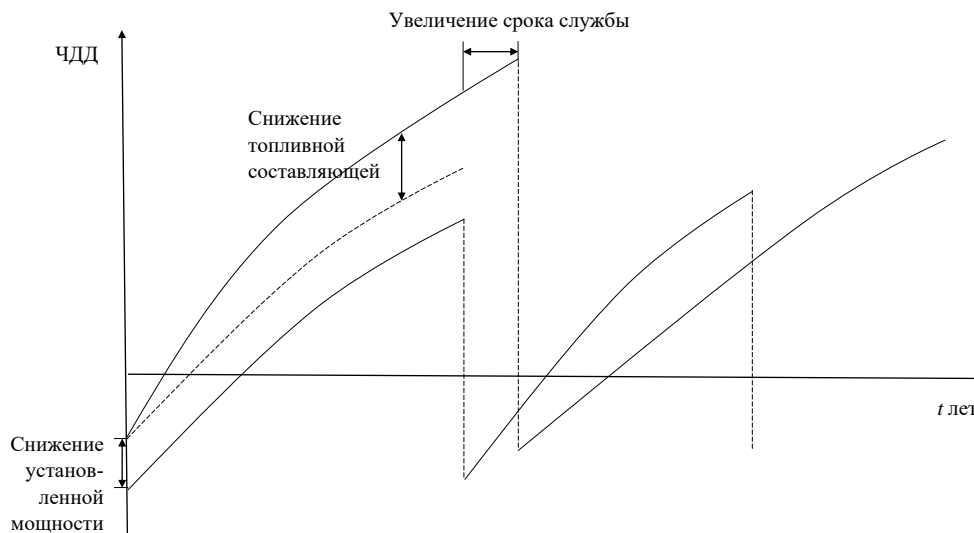
$$N = t \cdot \frac{T_n}{T}, \quad (26)$$

где t – текущее время, в течение которого нагрузка электрооборудования неизменна; T_n – нормативный срок службы изоляции; T – расчетный срок службы изоляции при текущем значении нагрузки P .

Зависимость выработки эксплуатационного ресурса от нагрузки подобна расходным характеристикам или ресурсным характеристикам агрегатов. Она непрерывна, имеет положительные первую и вторую производные. Ввиду этого минимизация расхода эксплуатационного ресурса электрооборудования полностью соответствует методам минимизации рас-

хода энергетического ресурса (топлива) в системе – стабилизации общей нагрузки потребителей, равенства нагрузок параллельно работающих агрегатов при их идентичности или равенства относительных приростов эксплуатационных ресурсов агрегатов в противном случае.

Здесь также следует отметить, что оптимизация расхода первичной энергии и эксплуатационного ресурса влияет на несколько составляющих основной целевой функции эксплуатации электрооборудования – чистого дисконтированного дохода. Оптимизация расхода энергетического ресурса позволяет уменьшить топливную составляющую в издержках эксплуатации. Кроме того, она снижает требуемую для покрытия максимума графика мощности располагаемую, а в итоге и установленную мощность системы а следовательно, требующиеся капиталовложения на строительство источника энергии, на пропускную способность элементов электрической сети. Оптимизация расхода эксплуатационного ресурса оборудования увеличивает срок службы оборудования и, соответственно, увеличивает чистый дисконтированный доход при оценке жизненного цикла оборудования. Эти влияния оптимизации на ЧДД показаны на рисунке.



Изменение составляющих ЧДД при оптимизации режима

Рассмотрев задачи и методы оптимизации расхода первичной энергии, срока службы изоляции и в конечном итоге чистого дисконтированного дохода, можно заключить, что имеется много общего в управлении этими ресурсами – одинаковый вид целевой функции; одинаковое управляющее воздействие на динамическую составляющую потерь ресурсов (стабилизация выходной мощности). Для минимизации статической составляющей потерь этих ресурсов используется условие равенства первых производных расходных характеристик агрегатов и законов Аррениуса, описывающих основную составляющую процесса старения оборудования. Ввиду их значительного различия оптимальное распределение нагрузок между агрегатами будет отличаться. Однако в случае, если параллельно работающие агрегаты имеют одинаковые ресурсные (расходные) характеристики, распределение в целях оптимизации расхода первичной энергии и ресурса изоляции будет одинаковым.

Оценки экономической эффективности применения изложенных задач и методов оптимизации нормальных режимов энергосистемы известны только для распределения нагрузок между агрегатами традиционным методом. Величина снижения расхода первичной энергии оценивается в пределах 1 % при суточном цикле оптимизации нагрузок системы [3].

Для оценки снижения динамической составляющей нагрузочных потерь первичной энергии не в электрическом, а в топливно-энергетическом хозяйстве, с использованием расходных (ресурсных) характеристик технологических переделов топливно-энергетического хозяйства Республики Карелия получена зависимость величины их снижения от коэффициента заполнения суточного графика в пределах от 0 до 1 [7]. Если принять, что коэффициент заполнения суточного графика большинства отечественных региональных энергосистем составлял величину 0,75–0,8 [11], то снижение динамической составляющей потерь составит величину 10 %. Сама динамическая составляющая может осторожно оцениваться в две трети от всех потерь в хозяйстве, т. е. $0,84 \times 0,67 = 0,56$, т. е. 56 % от всего объема первичной энергии. Тогда полная стабилизация суточного графика нагрузки конечного потребления может оцениваться снижением потерь первичной энергии в 5,6 %.

Косвенный эффект от стабилизации мощности – максимальное снижение располагае-

мой в системе мощности и соответствующее снижение установленной. Это снижение определяется величиной коэффициента заполнения суточного графика. При значении его, равном 0,75–0,8, максимальное снижение установленной мощности генерации и соответствующее снижение пропускной способности сетей и всех их элементов составит величину 20–25 %. Эта составляющая чистого дисконтированного дохода превосходит все другие. Кроме того, эффект проявляется сразу после ввода оборудования энергосистемы в эксплуатацию.

Экономический эффект от снижения расхода эксплуатационного ресурса или увеличения срока службы электрооборудования относится к заключительному периоду его эксплуатации ввиду высокого уровня инфляции.

В связи с этим в настоящее время из-за дефицита инвестиций в электроэнергетике последние 25 лет более 50% оборудования отработали свой ресурс. Для него продление срока службы и отнесение в будущее затрат на его замену имеет важное значение.

Снижение при оптимизации нормальных режимов электроэнергетических систем расхода энергетических и эксплуатационных ресурсов одновременно снижает и негативное воздействие их на природную среду.

Таким образом, приближенные оценки показывают высокую эффективность предлагаемых методов оптимизации нормального режима энергосистем. Ввиду этого целесообразна дальнейшая их разработка в направлении способов реализации сглаживания и полной стабилизации графиков нагрузки, без которых полученные оценки дают лишь валовый (теоретический) потенциал предлагаемых методов.

Выводы

1. Необходимым условием снижения расхода ресурсов в электроэнергетической системе при рыночных отношениях является снижение инфляции до низкого уровня, при котором стабилизируются тарифы на конечную энергию, становится целесообразной минимизация расхода всех видов ресурсов.
2. Для минимизации расхода первичной энергии в электроэнергетической системе с несколькими работающими агрегатами требуется стабилизация в течение регулируемого периода времени мощности потребителей и распределение нагрузки

между агрегатами по методу Н. А. Сахарова – равенству первых производных расходных характеристик агрегатов.

3. Снижение расхода первичной энергии происходит при стабилизации мощности потребителей за счет снижения динамической составляющей потерь энергии, а при наивыгоднейшем распределении нагрузки между агрегатами – за счет снижения статической составляющей потерь энергии. Снижение динамической составляющей потерь энергии происходит и при стабилизации нагрузки одного агрегата системы.
4. Аналогичными свойствами и методами минимизации расхода ресурсов обладает ресурс изоляции (эксплуатационный ресурс) электрооборудования системы. Ввиду этого при одинаковых параллельно работающих агрегатах системы стабилизация суммарной потребляемой мощности и одинаковое распределение ее между работающими агрегатами приводит к получению глобального минимума расхода финансовых ресурсов – минимуму издержек эксплуатации и максимуму чистого дисконтированного дохода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Волков Э. П., Баринов В. А. Вопросы совершенствования системы управления развитием и функционированием электроэнергетики в условиях ее реформирования // Изв. РАН. Энергетика. 2008. № 6. С. 35–48.
2. Сахаров Н. А. Метод наивыгоднейшего распределения активных нагрузок между несколькими работающими генераторами // Электричество. 1927. № 5. С. 167–169.
3. Баринов В. А., Совалов С. А. Режимы энергосистем: Методы анализа и управления. М.: Энергоатомиздат, 1990. 440 с.

REFERENCES

1. Volkov E. P., Barinov V. A. Voprosy sovershenstvovaniya sistemy upravleniya razvitiem i funktsionirovaniem elektroenergetiki v usloviyakh ee reformirovaniya [Issues of the control system improvement of the Russian power industry operation and development under reform]. *Izv. RAN. Energetika* [Proceed. of the RAS. Power Engineering]. 2008. No. 6. P. 35–48.
2. Sakharov N. A. Metod naivyygodneishego raspredeleniya aktivnykh nagruzok mezhdu neskol'kimi rabotayushchimi generatorami [A method for the optimal active loads dispatching

4. *Методические рекомендации по оценке инвестиционных проектов*: Офиц. изд. 2 ред. М.: Экономика, 2000. 421 с.

5. Борисов Г. А., Тихомирова Т. П. Обобщенная и частная задача минимизации расхода первичной энергии в системе // *Обозрение прикладной и промышленной математики*. 2014. Вып. 1. С. 39–41.

6. Борисов Г. А., Тихомирова Т. П. Методы минимизации потерь энергии и мощности в топливно-энергетическом хозяйстве региона // *Труды КарНЦ РАН. Сер. Математическое моделирование и информационные технологии*. 2013. № 1, вып. 4. С. 12–17.

7. Борисов Г. А., Тихомирова Т. П. Оценка динамической составляющей нагрузочных потерь энергии в элементах электрических сетей // *Труды КарНЦ РАН. Сер. Математическое моделирование и информационные технологии*. 2014. № 4. С. 25–28.

8. Борисов Г. А., Тихомирова Т. П. Увеличение ресурсов изоляции и подшипников электрических двигателей путем наивыгоднейшего распределения нагрузок // *Ученые записки ПетрГУ. Сер. Естественные и технические науки*. 2012. Т. 1, № 8. С. 83–85.

9. Борисов Г. А., Тихомирова Т. П. Задачи и методы максимального увеличения ресурса изоляции силовых трансформаторов // *Труды КарНЦ РАН. Сер. Математическое моделирование и информационные технологии*. 2015. № 10. С. 24–27. doi: 10.17076/mat137

10. *Проектирование электрических машин*: Учебник для вузов / Под. ред. И. П. Копылова. М.: Высшая школа, 2002. 757 с.

11. Родионов В. Г. Энергетика: проблемы настоящего и возможности будущего. М.: ЭНАС, 2010. 352 с.

Поступила в редакцию 21.06.2017

among several running generators]. *Elektrichestvo* [Electricity]. 1927. No. 5. P. 167–169.

3. Barinov V. A., Sovalov S. A. Rezhimy energosistem: Metody analiza i upravleniya [Regimes of power systems: methods of analysis and management]. Moscow: Energoatomizdat, 1990. 440 p.

4. *Методические рекомендации по оценке инвестиционных проектов*: Офиц. изд. 2 ред. [Methodological recommendations for investment projects assessment. Official ed. 2nd rev.]. Moscow: Ekonomika, 2000. 421 p.

5. *Borisov G. A., Tikhomirova T. P.* Obobshchennaya i chastnaya zadacha minimizatsii raskhoda pervichnoi energii v sisteme [Generalized and partial problems of minimizing primary energy consumption in a power system]. *Obozrenie prikladnoi i promyshlennoi matematiki [Journal of Applied and Industrial Mathematics]*. 2014. Vol. 1. P. 39–41.

6. *Borisov G. A., Tikhomirova T. P.* Metody minimizatsii poter' energii i moshchnosti v toplivno-energeticheskom hozyaistve regiona [Methods to minimize energy and power losses in the regional fuel-and-energy sector]. *Trudy KarNTs RAN [Trans. KarRC RAS]*. 2013. No. 1. P. 12–17.

7. *Borisov G. A., Tikhomirova T. P.* Otsenka dinamicheskoi sostavlyayushchei nagruzochnykh poter' energii v elementakh elektricheskikh setei [Assessment of the dynamic component of load losses of energy from power grids elements]. *Trudy KarNTs RAN [Trans. KarRC RAS]*. 2014. No. 4. P. 25–28.

8. *Borisov G. A., Tikhomirova T. P.* Uvelichenie resursov izolyatsii i podshipnikov elektricheskikh

dvigatelei putem naivygodneishego raspredeleniya nagruzok [Extending service life of isolation and bearings in electric motors by optimizing load distribution]. *Uchenye zapiski PetrGU. Ser. Estestvennye i tekhnicheskie nauki [Proceed. of Petrozavodsk St. Univ. Natural and Engineering Sciences]*. 2012. Vol. 1, no. 8. P. 83–85.

9. *Borisov G. A., Tikhomirova T. P.* Zadachi i metody maksimal'nogo uvelicheniya resursa izolyatsii silovykh transformatorov [Tasks and methods for maximizing the insulation resource of power transformers]. *Trudy KarNTs RAN [Trans. KarRC RAS]*. 2015. No. 10. P. 24–27.

10. *Proektirovanie elektricheskikh mashin: Uchebnik dlya vuzov [Design of electric machines: an university textbook]*. Ed. I. P. Kopylov. Moscow: Vysshaya shkola, 2002. 757 p.

11. *Rodionov V. G.* Energetika: problemy nastoyashchego i vozmozhnosti budushchego [Energetics: current problems and future prospects]. Moscow: JeNAS, 2010. 352 p.

Received June 21, 2017

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

Борисов Георгий Александрович

к. т. н.

эл. почта: borisov@krc.karelia.ru

Тихомирова Тамара Петровна

ученый секретарь, к. т. н.

Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН

ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,

Республика Карелия, Россия, 185910

эл. почта: tihomiro@krc.karelia.ru

тел.: (8142) 785520

CONTRIBUTORS:

Borisov, Georgy

e-mail: borisov@krc.karelia.ru

Tikhomirova, Tamara

Institute of Applied Mathematical Research,

Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences

11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk,

Karelia, Russia

e-mail: tihomiro@krc.karelia.ru

tel.: (8142) 785520

УДК 004.01:006.72 (470.22)

ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СТАТИСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ДАННЫХ

В. М. Буре, О. А. Митрофанова

*Санкт-Петербургский государственный университет
Агрофизический научно-исследовательский институт, Санкт-Петербург*

Существует ряд задач, связанных с прогнозом пространственного распределения экологических параметров. В работе в качестве примеров применения статистических методов для анализа экологических данных рассматриваются две схожие задачи. Первая задача заключается в количественной оценке обеспеченности растений азотом по данным аэрофотосъемки. Точный прогноз потребности растений в питательных веществах в период выращивания необходим для эффективного использования удобрений, выгодной урожайности и высокого качества продукции. Метод решения этой задачи основан на анализе оптических характеристик растений по цифровым изображениям. Для усовершенствования данного метода разработан модуль, отвечающий за автоматическое построение калибровочных кривых для количественной оценки обеспеченности растений азотом. Вторая задача заключается в оценке уровня экологического показателя в выделенной зоне поля. Предполагается, что исходными данными является набор экологических или агрохимических параметров, измеренных контактным способом, а также аэрофотоснимок рассматриваемого объекта. В статье предложен подход к решению задачи с совместным использованием методов кригинга и бинарной регрессии. На первом этапе проводится вариограммный анализ, после чего строится набор оценок экологического параметра с помощью метода ординарного кригинга. Далее задается пороговое значение параметра для рассматриваемой зоны, вводится фиктивная переменная, которая принимает значение 1, если значение параметра превысило пороговое, и 0 в ином случае. Таким образом, получается основа для логистической регрессии, где в факторы входит набор оценок, спрогнозированных методом кригинга. Кроме того, в статье представлены примеры реализации рассмотренных методов.

Ключевые слова: аэрофотосъемка; обобщенная характеристика цвета; построение калибровочных кривых; экологические данные; ординарный кригинг; бинарная регрессия.

V. M. Bure, O. A. Mitrofanova. AN EXPERIENCE OF USING STATISTICAL METHODS FOR THE ANALYSIS OF ECOLOGICAL DATA

There is a number of problems associated with the prediction of the spatial distribution of ecological parameters. In this paper, two similar problems are considered as examples of the application of statistical methods for the analysis of ecological data. The first problem is to quantify the nitrogen status of plants relying on aerial photos. Accurate prediction of plant nutritional needs during the growing season is necessary for efficient use of fertilizers, optimal yields and high quality products. A method of solving this problem is based on the analysis of the optical characteristics of plants in digital images. To improve this method, a module responsible for automatic construction of calibration curves for the quantitative assessment of plant nitrogen status was developed. The second problem is to assess the level of ecological indicators in selected field areas. It is assumed that the initial data are a set of ecological or agro-chemical data measured in situ, as well as an aerial photographic image of the object. This paper proposes approaching this problem by using a combination of the kriging and binary regression methods. The first step is variogram analysis, and then a set of ecological parameter estimates is built by the ordinary kriging method. Next, we set a threshold level for the given zone, introduce a dummy variable that takes the value 1 if the parameter value exceeds the threshold, and 0 otherwise. Thus, we get a basis for a logistic regression where factors include a set of estimates predicted by kriging. The article also presents application examples for these methods.

Key words: aerial photography; generalized color characteristic; construction of calibration curves; ecological data; ordinary kriging; binary regression.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время важное значение имеют различные аспекты статистического анализа экологических данных, а также методы анализа цифровых изображений при решении следующих экологических задач [1, 5]:

- обнаружение чрезвычайных ситуаций;
- мониторинг состояния растений;
- прогноз урожайности;
- дифференцированное внесение азотных удобрений;
- мониторинг состояния мелиоративных систем;
- и др.

Довольно часто возникают задачи, связанные с прогнозом пространственного распределения экологических данных. Рассмотрим в качестве примеров две схожие задачи, которые заключаются в оценке обеспеченности растений азотом.

Прогноз потребности растений в питательных веществах в период выращивания необходим для эффективного использования удобрений, выгодной урожайности и высокого качества продукции. Особое значение имеет экономическая сторона применения удобрений, т. к.

азотсодержащие удобрения по стоимости их приобретения, транспортировки и внесения в настоящее время занимают до 30–50 % в себестоимости продукции растениеводства. Азот наиболее часто применяется для сельскохозяйственных культур в качестве удобрения [7].

Построение калибровочных кривых. В первой задаче необходимо количественно оценить содержание азота в растениях на каждом участке поля по данным аэрофотосъемки. Решение этой задачи основано на анализе цветовых характеристик растений по аэрофотоснимкам. Для количественной оценки обеспеченности растений удобрением с помощью оптических методов следует разработать специальное программное обеспечение, которое позволит автоматизировать обработку информации и облегчит принятие решений о необходимости и дозе подкормки растений.

Применение кригинга и бинарной регрессии для анализа экологических данных. Не всегда требуется точная оценка потребности растений в питательных веществах как в первой задаче, в ряде задач достаточно оценить уровень содержания азота в выделенной зоне поля. Исходными данными второй задачи являются набор экологических параметров $Z(x_i)$, измеренных контактным способом, а также аэрофотоснимок обследуемого поля.

Необходимо оценить уровень обеспеченности растений азотом в каждой зоне поля.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Объектами исследования являются опытные сельскохозяйственные поля, расположенные на территории Меньковского филиала Агрофизического института (Ленинградская область, Гатчинский район, д. Меньково, координаты центра хозяйства 59°25' с. ш., 30°01' в. д.).

В настоящее время аэрофотосъемка полей осуществляется с помощью автоматизированного беспилотного летательного аппарата вертолетного типа Геоскан-401 (квадрокоптер), на котором закреплены две цифровые камеры (видимого и инфракрасного диапазонов). Квадрокоптер позволяет оперативно получать изображения сельскохозяйственных полей с хорошим разрешением.

Задача 1. Решение задачи количественной оценки обеспеченности растений азотом основано на анализе цветовых характеристик растений по аэрофотоснимкам. В процессе фотосинтеза растений под действием солнечного света образуется органическое вещество. Непосредственным участником этого процесса является хлорофилл, который определяет зеленый цвет листовой поверхности и стеблей растений. И хотя в процессе фотосинтеза растений принимают участие множество элементов минерального питания, в ряде работ установлено, что наибольшая корреляционная взаимосвязь наблюдается между обеспеченностью их азотом и содержанием хлорофилла. Таким образом, дефицит азотного питания сопровождается изменением цвета листьев растений и растительного покрова [7].

Для интерпретации цветовых параметров применяется модель цветового пространства CIE LAB. В системе *Lab* цветовой параметр L всегда положителен и обозначает светлоту; $a > 0$ обозначает параметр красной составляющей, $a < 0$ – зеленой, $b > 0$ – желтой, $b < 0$ – синей.

Полученные материалы аэрофотосъемки содержат растровые изображения сельскохозяйственных полей, а также координаты центров фотографирования и опорных точек. Таким образом, полученные изображения привязаны к глобальной системе позиционирования (геопривязка). По результатам аэрофотосъемки строится ортофотоплан с помощью программы Agisoft Photoscan. Изображение сельскохозяйственного поля содержит тестовые площадки (рис. 1) – небольшие участки поля, на которые была внесена определенная

доза азота (например, 0, 30, 50, 70, 90, 110 кг действующего вещества на 1 га). В результате средние значения цветовых характеристик растений на каждой из тестовых площадок являются эталонами, на основе которых можно оценить содержание азота на остальных участках поля (модель с обучением). После проведения количественной оценки содержания азота в растениях на аэрофотографии выделяются зоны посева, требующие подкормки, и в специальной программе генерируются технологические карты, необходимые для дифференцированного внесения азотных удобрений.

Оценку обеспеченности растений азотом можно провести двумя путями: напрямую сравнивать цветовые характеристики с эталонными либо построить калибровочную кривую также на основе характеристик эталонов. Для получения корректных результатов целесообразно построить калибровочную кривую, описывающую зависимость дозы азота на тестовых площадках от характеристики цвета растений. Следует отметить, что для каждого изображения строится своя калибровочная кривая. В связи с этим также целесообразно создание математического модуля, позволяющего автоматизировать построение калибровочных кривых.



Рис. 1. Аэрофотоснимок с тестовыми площадками (числами обозначены дозы внесенного азота на каждую из тестовых площадок, соответственно 0, 30, 50, 70, 90, 110 кг действующего вещества на 1 га)

Задача 2. В основе решения задачи прогноза пространственного распределения экологических данных лежат два метода статистического анализа: ординарный кригинг и логистическая регрессия.

Ординарный кригинг позволяет прогнозировать распределение экологического параметра на основе набора наблюдений [3]:

$$\hat{Z}(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i), \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i = 1, \quad (1)$$

где $Z(x_i)$ – наблюдаемое значение в местоположении x_i ; λ_i – неизвестный вес для него; $\hat{Z}(x_0)$ – прогнозируемое значение в местоположении x_0 ; n – количество наблюдений. Вес λ_i зависит от установленной модели вариограммы для установленных точек, от расстояния до местоположения прогноза и от пространственных отношений между значениями вблизи от местоположения прогноза.

Для осуществления прогноза методом кригинга необходимо провести вариограммный анализ (анализ и моделирование корреляционной структуры данных). Пространственные отношения между наблюдениями характеризует полувариограмма (будем называть просто вариограммой):

$$\begin{aligned}\gamma(h) &= \frac{1}{2} \text{Var}[Z(x) - Z(x+h)] = \\ &= \frac{1}{2} E[Z(x) - Z(x+h)]^2.\end{aligned}$$

Чем ближе величины данных (меньше разница между ними), тем больше величина вариограммы.

Вариограмма $\gamma(h)$ оценивается на основе экспериментальной вариограммы:

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i) - Z(x_i+h)]^2,$$

где $N(h)$ – число пар экспериментальных точек, разделенных вектором h . В дальнейшем на основе экспериментальной вариограммы строится ее теоретическая модель. Вариограммный анализ позволяет найти веса оценки ординарного кригинга (1).

На следующем этапе решения задачи осуществляется переход к логистической регрессии. Для этого устанавливается пороговое значение d для рассматриваемой зоны поля и вводится фиктивная переменная

$$y(x) = \begin{cases} 1, & Z(x) \geq d, \\ 0, & Z(x) < d. \end{cases}$$

В наблюдаемых точках экологический параметр известен, следовательно, известны величины $y(x_i)$ в этих точках. Кроме того, можно спрогнозировать величины экологического параметра в этих точках с помощью метода кригинга. Таким образом, получается основа для логистической регрессии, отражающей зависимость между вероятностью превышения порогового значения и объясняющими переменными [6]:

$$P(y(x_i) = 1 | \Phi_i) = p_i = \frac{1}{1 + \exp(-\Phi_i^T \beta)}. \quad (2)$$

Здесь Φ_i – факторы, объясняющие фиктивную переменную $y(x_i)$.

Как один из факторов логистической регрессии предлагается ввести набор значений, предсказанных методом кригинга [8]. Кроме того, в факторы могут входить цветные параметры со снимка, в случае, если величина экологического параметра коррелирует со значением цвета. Вектор β можно оценить методом максимального правдоподобия.

Проверку значимости построенного уравнения логистической регрессии (2) можно провести по критерию отношения правдоподобия, а также с помощью критерия Вальда [6].

В результате можно для каждой точки поля вычислять вероятность $P(y(x) = 1)$, в случае, если она окажется близка к 1, есть основания полагать, что в этой точке значение экологического параметра превышает пороговый уровень d , а если вероятность близка к 0, есть основания считать, что значение параметра ниже порогового уровня.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Построение калибровочных кривых.

Для точного определения потребности растений в азоте на каждом участке поля целесообразно создание математического модуля, позволяющего автоматизировать построение калибровочных кривых. Входными данными рассматриваемого модуля являются количество тестовых площадок, значения доз азота на каждой тестовой площадке и соответствующие им средние значения цветных параметров L, a, b . Однако для построения калибровочной кривой, отражающей зависимость дозы азота на тестовых площадках от цвета листьев, необходимо представить параметры цвета в виде единой величины. В связи с этим предложено свернуть вектор параметров цвета в одно значение с использованием выпуклой линейной комбинации. Данное значение условно названо обобщенной характеристикой цвета C_{Lab} , которая рассчитывается по формуле [4]:

$$C_{Lab} = \alpha L^* + \beta_1 a^* + \beta_2 b^*, \quad (3)$$

где $\alpha \geq 0$, $\beta_1 \geq 0$ и $\beta_2 \geq 0$ – эмпирически подбираемые коэффициенты для каждого аэрофотоснимка поля, причем

$$\alpha + \beta_1 + \beta_2 = 1.$$

При подборе коэффициентов α, β_1, β_2 необходимо обеспечить максимально выраженную линейную связь между дозой азота на тестовых площадках и обобщенной характеристикой цвета. Классическим методом решения подобных задач является линейное регрессионное моделирование [2]. При построении предполагается, что линейная модель наилучшим

образом характеризует зависимость между содержанием азота N и обобщенной характеристикой цвета C_{Lab} :

$$N = \beta_0^* + \beta_1^* C_{Lab} + \varepsilon,$$

где β_0^* и β_1^* – параметры модели, а ε – случайная величина (возмущение), характеризующая влияние неучтенных факторов. Уравнение регрессии при этом примет вид:

$$N^* = b_0 + b_1 C_{Lab}. \quad (4)$$

Коэффициенты b_0 и b_1 вычисляются методом наименьших квадратов:

$$b_1 = \frac{n \sum_{i=1}^n N_i C_{Lab}^i - \sum_{i=1}^n N_i \sum_{i=1}^n C_{Lab}^i}{n \sum_{i=1}^n (C_{Lab}^i)^2 - (\sum_{i=1}^n C_{Lab}^i)^2}, \quad (5)$$

$$b_0 = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n N_i - b_1 \sum_{i=1}^n C_{Lab}^i \right). \quad (6)$$

После этого проводится проверка адекватности модели. Соответственно рассчитываются полная сумма квадратов вариации отклика, а также две ее составляющие: сумма квадратов, объясненная регрессией, и остаточная сумма квадратов. Для оценки меры выраженности линейной связи используется коэффициент детерминации. Для того чтобы иметь общее суждение о качестве модели, по каждому наблюдению из относительных отклонений определяется средняя ошибка аппроксимации. Оценка значимости уравнения регрессии в целом проводится на основе F -критерия Фишера, строится F -статистика.

Получив оптимальный набор коэффициентов, строится калибровочная кривая, позволяющая определить содержание азота на каждом элементарном участке поля.

Для реализации рассматриваемого модуля разработан алгоритм построения калибровочных кривых, осуществлена его проверка на адекватность. Схематично алгоритм основной функции построения можно представить следующим образом:

// Входные данные:

Data: n – количество тестовых площадок;
 $N = (N_1, \dots, N_n)$ – значения содержания азота на площадках; $L^* = (L_1^*, \dots, L_n^*)$,
 $a^* = (a_1^*, \dots, a_n^*)$, $b^* = (b_1^*, \dots, b_n^*)$ – соответствующие им цветные параметры.

// Выходные данные:

Result: Эмпирически подобранные коэффициенты α , β_1 , β_2 ;
уравнение калибровочной кривой;
коэффициент детерминации R^2 ;
средняя ошибка аппроксимации $\bar{\varepsilon}$;
 F -статистика.

//

max $\leftarrow 0$;

for $\alpha \in [0; 1]$ do

{

for $\beta_1 \in [\alpha; 1]$ do

{

$\beta_2 \leftarrow 1 - \alpha - \beta_1$;

Вычисление значений $C_{Lab} =$

$= (C_{Lab}^1, \dots, C_{Lab}^n)$ по формуле (3);

if Значения C_{Lab} монотонны then

{

// Построение линейной регрессионной модели:

Вычисление коэффициентов уравнения линейной регрессии по формулам (5), (6);

Вычисление новых смоделированных значений содержания азота

$N^* = (N_1^*, \dots, N_n^*)$ по формуле (4);

Вычисление сумм квадратов отклонений;

Вычисление средней ошибки аппроксимации;

Вычисление коэффициента детерминации R^2 ;

if $R^2 > \max$ then

max $\leftarrow R^2$;

}

}

}

Вычисление F -статистики.

Таким образом, находим такой набор коэффициентов α , β_1 , β_2 , при котором коэффициент детерминации максимален и, соответственно, линейная зависимость параметров N и C_{Lab} наиболее выражена.

Модуль реализован в среде разработки Visual Studio 2012 Professional с использованием дополнительной библиотеки ZedGraph и языка программирования C#. На рисунке 2 представлен пример результатов расчета модуля.

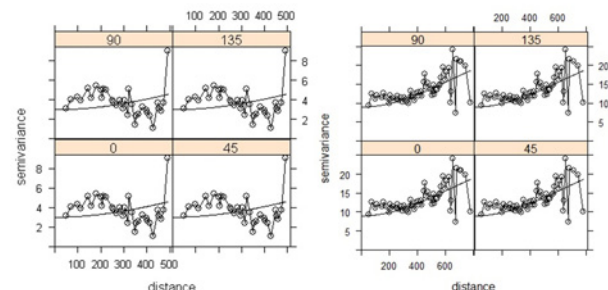


Рис. 2. Пример результатов расчета модуля построения калибровочных кривых

Пример построенной калибровочной кривой иллюстрирует рисунок 3.

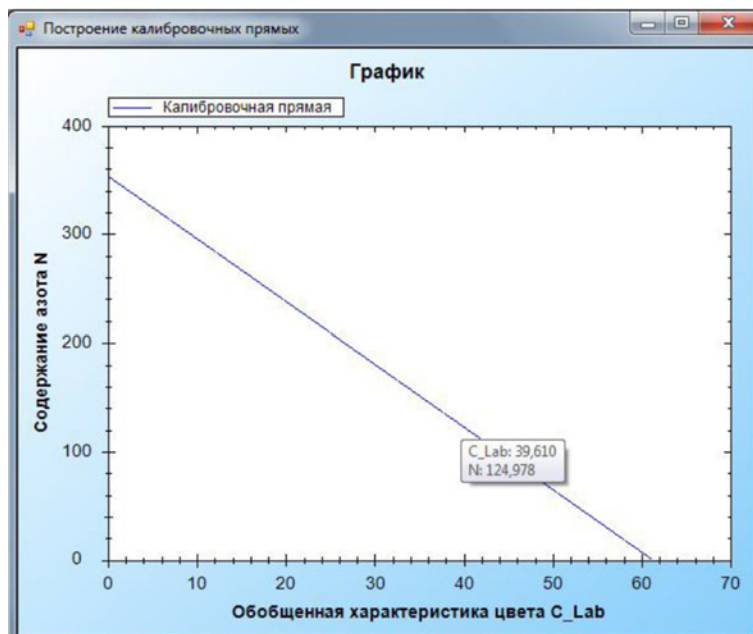


Рис. 3. Пример построенной калибровочной кривой

Применение кригинга и бинарной регрессии для анализа экологических данных. Покажем применение этих методов на двух смоделированных примерах с использованием языка программирования R. Смоделируем два набора величин (50 и 144 значения соответственно) некоторого экологического параметра Z_i^1 и Z_i^2 (например, показателя N -тестера интенсивности окраски листьев растений) по двум различным схемам распределения на участке поля. Смоделиру-

ем также две выборки объема 50 и 144 точек из нормального распределения с математическим ожиданием 0 и среднеквадратическим отклонением 1, которые будут соответствовать случайным величинам ε^1 и ε^2 («белый шум»), и добавим их к смоделированным наборам данных: $\hat{Z}_i^1 = Z_i^1 + \varepsilon_i^1$; $\hat{Z}_i^2 = Z_i^2 + \varepsilon_i^2$. Установим порог $d = 350$.

На рисунке 4 представлены карты-схемы распределения смоделированных данных на участке поля.

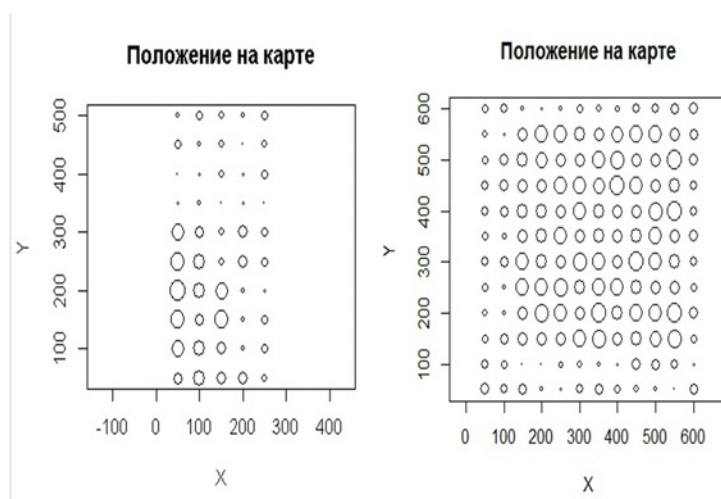


Рис. 4. Карты-схемы распределения смоделированных данных на участке поля (диаметры кругов пропорциональны величине данных)

Предварительно осуществляется проверка ограничений и предположений геостатистики (стационарность и мультинормальность). По-

сле предварительного анализа осуществляется вариограммный анализ, в результате которого строится экспериментальная вариограмма

и устанавливается теоретическая модель вариограммы. Экспериментальные вариограммы рассматриваемых примеров по четырем

направлениям (0, 45, 90 и 135°) с установленными моделями вариограмм иллюстрирует рисунок 5.

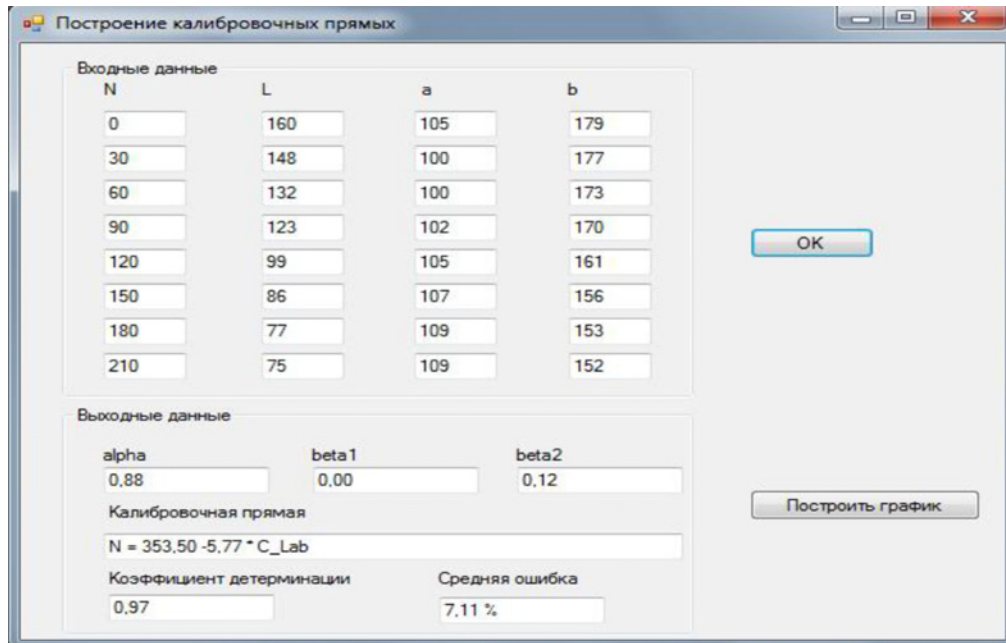


Рис. 5. Экспериментальные вариограммы по четырем направлениям с установленными моделями вариограмм

На основе результатов вариограммного анализа применяется ординарный кригинг. Поочередно из набора смоделированных наблюдений исключается одно значение, после чего оно оценивается методом кригинга с помощью функции krige(). Таким образом, получаем два набора значений экологического параметра, предсказанных методом ординарного кригинга в наблюдаемых точках.

С помощью выявленных данных строятся три логит-модели в каждом примере с помощью функции glm(). Оценка значимости моделей проводится по критерию отношения прав-

доподобия. Исходные данные для построения следующие: зависимая переменная $T = 1$, если показание N -тестера более или равно 350, иначе принимает значение 0; в качестве объясняющих переменных рассматриваются переменные X и Y – координаты наблюдений, а также N_{pred} – предсказанные методом кригинга величины параметра в наблюдаемых точках. В таблице 1 представлены результаты построения логит-моделей рассматриваемых смоделированных примеров, из которых видно, что все модели статистически значимы.

Таблица 1. Результаты построения логит-моделей рассматриваемых примеров

Результаты расчета	Пример 1	Пример 2
логит-модель 1: зависимая переменная T , объясняющие переменные X и Y		
Коэффициент хи-квадрат	37.36926	7.943813
Уровень значимости	3.840071e-09	0.009418745
логит-модель 2: зависимая переменная T , объясняющие переменные X , Y и N_{pred}		
Коэффициент хи-квадрат	51.0379	117.7156
Уровень значимости	2.355682e-11	1.18768e-25
логит-модель 3: зависимая переменная T , объясняющая переменная N_{pred}		
Коэффициент хи-квадрат	30.26213	82.66378
Уровень значимости	1.945903e-08	4.92086e-20
Примечание. Уровни значимости смоделированных коэффициентов во всех логит-моделях меньше 0.05		

На заключительном этапе сравниваются данные логит-модели. Так как все три модели в каждом примере вложенные, предварительное сравнение осуществляется с помощью функции $\text{anova}()$. В результате получаем, что полная логит-модель 2 работает лучше сокращенных. Кроме того, создана дополнительная тестовая база для каждого примера: поочередно из набора наблюдений исключается одна точка и осуществляется анализ, как

предскажут в этой точке значение вероятности $P(T = 1)$ все три логит-модели. В первом примере вторая модель показала себя лучше сокращенных моделей в 37 точках из 50, а во втором примере – в 107 точках из 144. Кроме того, процент неправильно предсказанных точек также меньше во второй логит-модели в обоих примерах. В таблице 2 представлена выборка из 10 точек построенной тестовой базы для первого примера.

Таблица 2. Выборка из тестовой базы логит-моделей для первого примера

№	X	Y	Z	T	N_{pred}	Модель 1	Модель 2	Модель 3
1	100	50	352	1	351.1794	0.99025	0.99993	0.96233
2	250	50	348	0	350.2188	0.60916	0.34788	0.82778
3	200	100	347	0	350.2588	0.71082	0.07791	0.84101
4	150	150	354	1	349.9958	0.73760	0.99664	0.67032
5	150	200	353	1	349.6525	0.51356	0.92354	0.49262
6	50	300	353	1	349.5278	0.77216	0.99804	0.42703
7	150	300	348	0	348.954	0.15470	0.04604	0.20274
8	50	400	345	0	349.0604	0.43531	0.00086	0.24526
9	100	450	347	0	348.1283	0.04580	0.00743	0.04201
10	150	500	348	0	347.3104	0.00361	0.00146	0.00755

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе продемонстрированы возможности применения статистических методов для анализа экологических данных на примере двух схожих задач. Рассмотренные задачи заключаются в прогнозе пространственного распределения экологических данных. Кроме того, представлены практические примеры реализации предложенных подходов. На основе проведенного исследования можно сформулировать следующие выводы:

- применение статистических методов в задачах, связанных с анализом экологических данных, является весьма актуальным и перспективным направлением;
- описанные методы – доступные, недорогие и достаточно точные приемы прогноза распределения экологических данных;
- метод построения калибровочных кривых, отражающих зависимость дозы азота от обобщенной характеристики цвета, наиболее точно позволяет оценить целесообразность внесения азотных удобрений;
- совместное применение кригинга и бинарной регрессии дает возможность решать ряд актуальных экологических проблем: мониторинг состояния растений,

прогноз урожайности, дифференцированное внесение азотных удобрений и др. На основе полученных в практической реализации результатов можно полагать, что целесообразно использовать полную логит-модель, однако этот подход требуется рассмотреть на ряде дополнительных примеров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Буре В. М. Методология статистического анализа опытных данных. СПб.: С-Петербург. гос. ун-т, 2007. 141 с.
2. Буре В. М., Париллина Е. М. Теория вероятностей и математическая статистика: учебное пособие. СПб.: Лань, 2013. 416 с.
3. Демьянов В. В., Савельева Е. А. Геоэстатистика: теория и практика. М.: Ин-т проблем безопасности развития атомной энергетики РАН; Наука, 2010. 327 с.
4. Митрофанова О. А., Буре В. М., Канаиш Е. В. Математический модуль для автоматизации колориметрического метода оценки обеспеченности растений азотом // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 10. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2016. Вып. 1. С. 85–91.
5. Якушев В. П., Буре В. М. Подходы к обналичению статистических зависимостей. СПб.: С.-Петербург. гос. ун-т, 2003. 64 с.

6. Якушев В. П., Буре В. М., Парилина Е. М. Бинарная регрессия и ее применение в агрофизике. СПб.: Агрофиз. ин-т, 2015. 36 с.

7. Якушев В. П., Канаш Е. В., Конев А. А., Ковтюх С. Н., Лекомцев П. В., Матвеев Д. А., Петрушин А. Ф., Якушев В. В., Буре В. М., Осипов Ю. А., Русаков Д. В. Теоретические и методические основы выделения однородных технологических зон для дифференцированного

применения средств химизации по оптическим характеристикам посева: практическое пособие. СПб.: Агрофиз. ин-т, 2010. 60 с.

8. Fernandes G. B., Artes R. Spatial dependence in credit risk and its improvement in credit scoring // European Journal of Operational Research. 2016. No. 249. P. 517–524.

Поступила в редакцию 11.03.2017

REFERENCES

1. Bure V. M. Metodologiya statisticheskogo analiza opytnykh dannykh [Statistical analysis methodology of the experimental data]. St. Petersburg: St. Petersburg St. Univ. Publ., 2007. 141 p.

2. Bure V. M., Parilina E. M. Teoriya veroyatnostei i matematicheskaya statistika: uchebnoe posobie [Probability theory and mathematical statistics: a study guide]. St. Petersburg: Lan's Publ., 2013. 416 p.

3. Dem'yanov V. V., Savel'eva E. A. Geostatistika: teoriya i praktika [Geostatistics: theory and practice]. Moscow: Nuclear Safety Inst. of the RAS, Nauka Publ., 2010. 327 p.

4. Mitrofanova O. A., Bure V. M., Kanash E. V. Matematicheskii modul' dlya avtomatizatsii kolorimetriceskogo metoda otsenki obespechennosti rastenii azotom [Mathematical module to automate the colorimetric method for estimating nitrogen status of plants]. *Vestnik of St. Petersburg Univ. Ser. 10. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes*. 2016. Iss. 1. P. 85–91.

5. Yakushev V. P., Bure V. M. Podkhody k obnaruzheniyu statisticheskikh zavisimostei [Approaches to detect statistical relationships].

St. Petersburg: St. Petersburg St. Univ. Publ., 2003. 64 p.

6. Yakushev V. P., Bure V. M., Parilina E. M. Binarnaya regressiya i ee primenenie v agrofizike [Binary regression and its application in agrophysics]. St. Petersburg: Agrophys. Institute, 2015. 36 p.

7. Yakushev V. P., Kanash E. V., Konev A. A., Kovtyukh S. N., Lekomtsev P. V., Matveenko D. A., Petrushin A. F., Yakushev V. V., Bure V. M., Osipov Yu. A., Rusakov D. V. Teoreticheskie i metodicheskie osnovy vydeleniya odnorodnykh tekhnologicheskikh zon dlya differentsirovannogo primeneniya sredstv khimizatsii po opticheskim kharakteristikam poseva: prakticheskoe posobie [Theoretical and methodological foundations of homogeneous areas selection for differentiated application of chemicals from the optical characteristics of crop: a practical guide]. St. Petersburg: Agrophys. Institute, 2010. 60 p.

8. Fernandes G. B., Artes R. Spatial dependence in credit risk and its improvement in credit scoring. *European Journal of Operational Research*. 2016. No. 249. P. 517–524.

Received March 11, 2017

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

Буре Владимир Мансурович

профессор, д. т. н.

Санкт-Петербургский государственный университет
Университетская наб., 7/9, Санкт-Петербург, Россия,
199034

Агрофизический научно-исследовательский институт
Гражданский пр., 14, Санкт-Петербург, Россия, 195220
эл. почта: vlb310154@gmail.com
тел.: (812) 4284286

Митрофанова Ольга Александровна

аспирант

Санкт-Петербургский государственный университет
Университетская наб., 7/9, Санкт-Петербург, Россия,
199034

Агрофизический научно-исследовательский институт
Гражданский пр., 14, Санкт-Петербург, Россия, 195220
эл. почта: omitrofa@gmail.com
тел.: (812) 5341511

CONTRIBUTORS:

Bure, Vladimir

St. Petersburg State University

7/9 Universitetskaya Emb., 199034 St. Petersburg, Russia
Agrophysical Research Institute

14 Grazhdanskiy Pr., 195220 St. Petersburg, Russia
e-mail: vlb310154@gmail.com
tel.: (812) 4284286

Mitrofanova, Olga

St. Petersburg State University

7/9 Universitetskaya Emb., 199034 St. Petersburg, Russia
Agrophysical Research Institute

14 Grazhdanskiy Pr., 195220 St. Petersburg, Russia
e-mail: omitrofa@gmail.com
tel.: (812) 5341511

УДК 551.465

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЗО- И СУБМЕЗОМАСШТАБНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПРИБРЕЖНЫХ ЗОНАХ ЧЕРНОГО МОРЯ

О. А. Дымова

Морской гидрофизический институт РАН, Севастополь

В работе представлен анализ результатов моделирования циркуляции в Черном море. Расчеты выполнены с горизонтальным разрешением 1,6 км и учетом реального атмосферного воздействия за 2006 и 2011 гг. В поле течений воспроизведены вихри, имеющие характерные мезомасштабные и субмезомасштабные пространственно-временные параметры. Показано, что реконструированные гидрофизические поля соответствуют данным наблюдений. Наиболее интенсивное образование вихрей с масштабами менее 10 км и орбитальными скоростями 20–30 см/с наблюдалось в окрестностях Крымского полуострова, в северо-восточной и юго-восточной частях моря. Вихревые структуры в шельфовых зонах формировались во все сезоны при слабых ветрах любого направления. Их размеры зависели от глубины и протяженности шельфа, а также величины береговых выступов. На основе анализа пространственно-временной изменчивости полей солёности и вдольбереговой компоненты скорости на вертикальных сечениях, проходящих через центры вихрей, получено, что в Черном море преобладают два основных механизма формирования прибрежных вихрей. Первый – это бароклинная неустойчивость, возникающая при увеличении горизонтального градиента плотности за счет подъема/опускания вод на периферии крупных вихрей или течений. Второй механизм – это обтекание неоднородностей берега набегающим прибрежным потоком, скорость которого превышает 40 см/с.

Ключевые слова: вихрь; прибрежные течения; плотность; бароклинная неустойчивость; орография берега.

O. A. Dymova. MODELING OF THE MESO- AND SUBMESOSCALE DYNAMIC PROCESSES IN THE BLACK SEA COASTAL ZONES

The article presents an analysis of simulation results for the Black Sea circulation. The calculations were carried out with a horizontal resolution of 1.6 km and taking into account the real atmospheric forcing for 2006 and 2011. Eddies with characteristic mesoscale and submesoscale spatio-temporal parameters were reconstructed in the velocity fields. It is shown that the simulated hydrophysical fields correspond to observed data. The most intensive generation of eddies with the scale of less than 10 km and orbital velocities of 20 – 30 cm/s was observed in the neighborhood of the Crimean Peninsula, in the north-eastern and south-eastern parts of the sea. Vortex structures in the shelf zones were formed in all seasons with weak winds of directions. Their size depended on the depth and length of the shelf, as well as on the dimensions of coastal capes. The analysis of spatial and temporal variability of salinity fields and the longshore velocity component in the vertical cross-section passing through eddy centers showed that two main mechanisms of coastal eddies formation dominated in the Black Sea. The first mechanism is baroclinic instability, which arises with increasing horizontal density gradient in the periphery of large eddies or currents due to water rising/lowering. The second mechanism is the streamlining of shore inhomogeneities by the coastal current with a velocity higher than 40 cm/s.

ВВЕДЕНИЕ

Многочисленные современные спутниковые и контактные (например, [16, 17]) наблюдения подтверждают существование в океанах и морях круговых динамических структур с характерными масштабами по пространству порядка нескольких километров и временем жизни от нескольких суток до недель. Относительно локального бароклинного радиуса деформации Россби R_d их разделяют на мезомасштабные квазигеострофические вихри, для которых число Россби Ro гораздо меньше единицы, а размер больше R_d , и субмезомасштабные агеострофические вихри, радиус которых меньше радиуса R_d , а Ro порядка единицы [21]. Бароклинный радиус деформации, рассчитанный по формуле (1), для прибрежной зоны Черного моря в среднем равен 8 км.

$$R_d = \frac{\sqrt{gH(\Delta\rho/\rho)}}{f}, \quad (1)$$

где g – ускорение свободного падения, H – толщина верхнего квазиоднородного слоя, $\Delta\rho$ – перепад плотности, $\rho = 1$ г/см³, f – параметр Кориолиса. Обладая большими запасами энергии, вихри играют доминирующую роль в процессах трансформации гидрофизических полей, особенно в прибрежной зоне, поэтому их изучение представляет большой интерес. Так как по объективным причинам спутниковые методы не могут предоставить непрерывные по времени и пространству данные об изменчивости вод, то одним из наиболее востребованных инструментов изучения динамики жидкости является компьютерное моделирование.

Для Черного моря построен/адаптирован целый ряд вихреразрешающих моделей, позволяющих воспроизводить пространственно-временную изменчивость на масштабах от сотен метров до нескольких километров, например [1, 13, 15, 22]. В рамках европейского проекта «МуОсеан» проведено сравнение результатов численных экспериментов по реконструкции циркуляции с разрешением от 5 до

8 км по горизонтали, выполненных с использованием моделей РОМ [5], NEMO [6] и МГИ [9] (МГИ – Морской гидрофизический институт). Авторы указывают, что горизонтальное разрешение существенно влияет на качество воспроизведения гидрофизических характеристик. К настоящему времени в соответствии с мировой тенденцией к увеличению разрешения моделей океана в целом ряде работ (например, [11, 18, 23]) сделан акцент на изучение мезо- и субмезомасштабной динамики в Черном море методами математического моделирования.

Целью представленной работы было реконструировать циркуляцию Черного моря с высоким пространственным разрешением и учетом реального атмосферного воздействия и на основе анализа полученных гидрофизических полей исследовать возможные физические механизмы формирования мезо- и субмезомасштабных вихрей. Версия модели МГИ с разрешением 5 км [9] успешно используется в системе прогноза гидрофизических полей Черного моря [8]. Актуальность работы обусловлена необходимостью увеличения разрешающей способности модели, что связано с задачами рационального природопользования и мониторинга состояния прибрежных акваторий Азово-Черноморского региона.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Численные эксперименты выполнены с помощью нелинейной вихреразрешающей модели МГИ [3]. Модель основана на полной системе уравнений гидротермодинамики океана в приближении Буссинеска, гидростатики и несжимаемости морской воды. Динамика поверхности моря определяется в рамках применения линеаризованного кинематического условия, вследствие чего мы можем исследовать быстрые нестационарные процессы. Уравнения модели записаны в декартовой системе координат. Ниже представлены уравнения для горизонтальных компонентов скорости течений:

$$\frac{du}{dt} - fv = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \nu_v \frac{\partial u}{\partial z} + \nu_h \nabla^4 u, \quad (2)$$

$$\frac{dv}{dt} + fu = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \nu_v \frac{\partial v}{\partial z} + \nu_h \nabla^4 v. \quad (3)$$

В уравнениях (2)–(3) обозначения общепринятые. Коэффициент горизонтальной турбулентной вязкости ν_h – константа, коэффициент вертикальной турбулентной вязкости ν_v рассчитывается с применением теории Меллора – Ямады 2,5 [19]. Турбулентные слагаемые описываются бигармоническим оператором $\nabla^4 u, v$, что сделано в целях обеспечения стабильности численного решения. В качестве граничных условий на поверхности задаются касательные напряжения трения ветра:

$$\nu_v \frac{\partial u}{\partial z} = -\tau^x, \nu_v \frac{\partial v}{\partial z} = -\tau^y. \quad (4)$$

На дне задаются условия непротекания:

$$u = 0, v = 0. \quad (5)$$

На твердых участках границы области ставятся условия непротекания для нормальной составляющей скорости и скольжения – для касательной. Для меридиональных участков:

$$u = 0, \nabla^2 u = 0, \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \nabla^2 \frac{\partial v}{\partial x} = 0. \quad (6)$$

Для зональных участков границы:

$$v = 0, \nabla^2 v = 0, \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \nabla^2 \frac{\partial u}{\partial y} = 0. \quad (7)$$

В устьях рек и проливах задаются нормальные компоненты скорости (условия Дирихле II рода). Конечно-разностный аналог системы дифференциальных уравнений модели построен на сетке С. Дискретные уравнения являются точным следствием конечно-разностной формулировки модели, что обеспечивает выполнение основных интегральных соотношений и законов сохранения. В [10] представлены подробная постановка задачи, описание полной системы уравнений модели, начальных и граничных условий.

Гидрофизические поля рассчитывались на равномерной сетке с шагом по горизонтальным координатам 1,6 км, что позволило воспроизвести динамические структуры с масштабами меньше радиуса деформации Россби. По вертикали использовалось 27 z-горизонтов с глубинами 2,5; 5; 10; 15; 20; 25; 30; 40; 50; 62,5; 75; 87,5; 100; 112,5; 150; 200; далее через каждые 100 м до 500 м, затем через 200 м до 1700, 2100 м. Шаг по времени равнялся 96 сек. Атмосферное воздействие задавалось по данным реанализа ALADIN (1/4 °) за 2006 г. [14] и реанализа SKIRON (1/10 °) за 2011 г. [20]. Также на верхнем расчетном горизонте каждые сутки усваивалась температура поверхности моря, которая была получена по данным спутника NOAA [7]. Граничные поля были линейно проинтерполированы на модельную сетку.

Для задания температуры, солёности и скорости в устьях рек и проливах использовались климатические данные, в верхнебосфорском течении температура и солёность та же, что и в море. В нижнебосфорском потоке солёность принималась равной 25 ‰ и температура – 12 °С, что соответствует среднегодовым показателям вод Мраморного моря. Принималось, что верхнее течение в Босфоре распространяется до глубины 27,5 м, нижнее – до 68,75 м. Коэффициенты при бигармонических операторах в слагаемых, описывающих горизонтальную турбулентную вязкость в уравнениях движения и горизонтальную турбулентную диффузию в уравнениях переноса тепла и соли, равны соответственно 10^{16} см⁴/с, $5 \cdot 10^{14}$ см⁴/с.

В начальный момент времени задавались поля уровня, температуры, солёности и скоростей течений. В модели использована процедура квазигеострофического приспособления.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

По итогам двух численных экспериментов были реконструированы трехмерные поля течений, температуры и солёности, а также поле уровня в 2006 и 2011 гг. Для верификации результатов расчетов было проведено сопоставление со спутниковыми и контактными данными наблюдений. Сравнение с измеренными профилями температуры и солёности, а также сопоставление со снимками концентрации хлорофилла показало хорошее соответствие модельных и натурных данных для 2006 г. [4]. В качестве примера приведем результаты верификации модельных скоростей течений в январе 2011 г. с доступными данными. На рисунке 1, а представлены скорости течений на глубине 3,2 м для января 2011 г. по данным ADCP-измерений и расчета по модели DHI MIKE [11] и на рисунке 1, б – аналогичные данные в той же точке, рассчитанные по модели МГИ. Видно, что наблюдается качественное соответствие временной изменчивости натурных и расчетных данных. Отличие пиковых значений модуля скорости можно объяснить влиянием задаваемого в модели ветра, который определяет скорости течений на верхнем расчетном горизонте. При сопоставлении карт поверхностных течений со снимками концентрации хлорофилла и яркости восходящего излучения по данным спутника MODIS [7] в весенне-летний сезон 2011 г. также выявлено удовлетворительное совпадение с реальными данными.

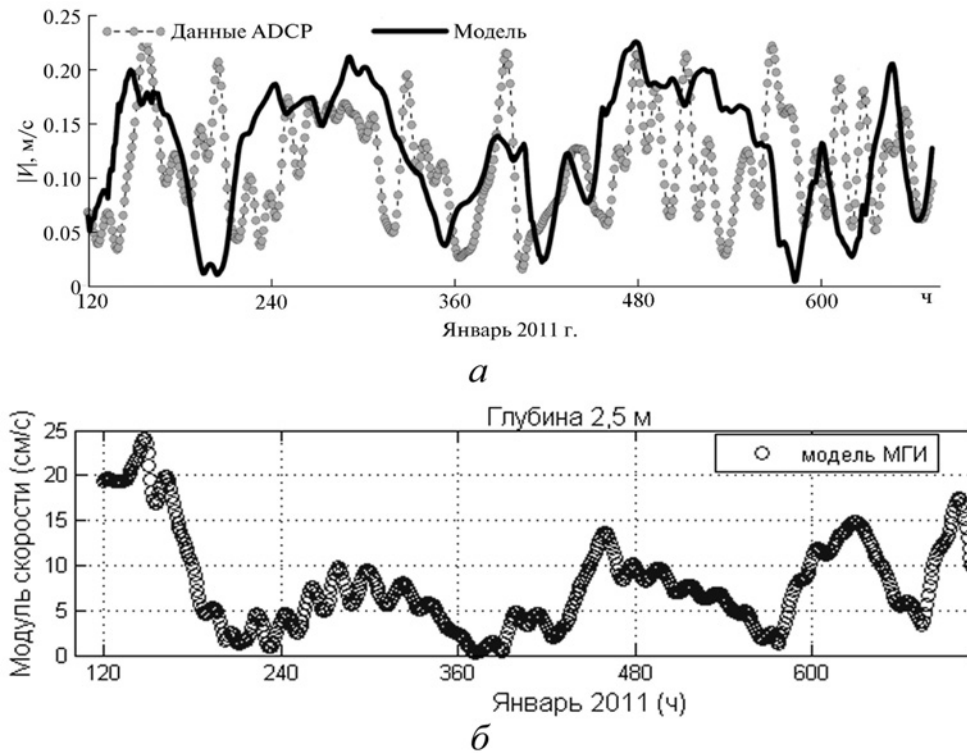


Рис. 1. Модуль скорости поверхностных течений в январе 2011 г.: а – по результатам работы [11] (рис. 3), м²/с; б – по данным модели МГИ, см²/с

В настоящей работе рассмотрены динамические характеристики вихрей и течений, полученные по результатам расчетов. Анализ полей скорости показал, что в целом для Черного моря воспроизводятся известные из литературы и данных наблюдений особенности циркуляции. Глубоководную часть охватывает крупномасштабный циклонический круговорот – Основное черноморское течение (ОЧТ), которое интенсифицируется в холодный период года и ослабевает в летний. По периферии ОЧТ квазипериодически формируются мезомасштабные вихри, воспроизводятся Севастопольский и Батумский антициклоны. Наиболее интенсивное образование мезо- и субмезомасштабных вихрей происходит на северо-западном шельфе (СЗШ), в окрестностях Крымского полуострова, около Кавказского и Анатолийского побережий. Преимущественно круговороты, формирующиеся в этих районах, имеют антициклонический знак завихренности, они возникают квазипериодически и переносятся ОЧТ по направлению движения. Время жизни таких вихрей составляет от десятков часов до нескольких суток, орбитальные скорости в среднем равны 10–15 см²/с. Сравнение карт течений с картами полей ветра показало, что мезо- и субмезомасштабные вихревые структуры над кромкой

шельфа формировались во все сезоны при слабых ветрах любого направления, когда величина вектора касательного напряжения трения не превышала 0,6 дин/см². При усилении ветра струя ОЧТ была прижата к берегу, и вихри с размерами меньше радиуса деформации Россби в представленных экспериментах не развивались.

Рассмотрим детально субмезомасштабную изменчивость в прибрежных областях на примере вихрей, реконструированных у юго-восточного побережья Крыма в июне 2006 г. На 30.05.06 юго-восточнее мыса Меганом в поле скорости было обнаружено возмущение линий тока на периферии мезомасштабного антициклонического круговорота, принесенного с востока ОЧТ. Через сутки в поле скорости уже наблюдалось циклоническое вихревое образование, просуществовавшее три дня. Динамические характеристики этого вихря представлены в таблице. Из нее видно, что в первые двое суток вихрь являлся субмезомасштабным и агеострофическим: его размер был меньше R_d , а число Россби порядка единицы. Ко 2 июня за счет взаимодействия с более крупным мезомасштабным вихрем рассматриваемый круговорот увеличился в размерах, а 3 июня в поле скорости он уже не наблюдался, по-видимому, диссипировав на шельфе.

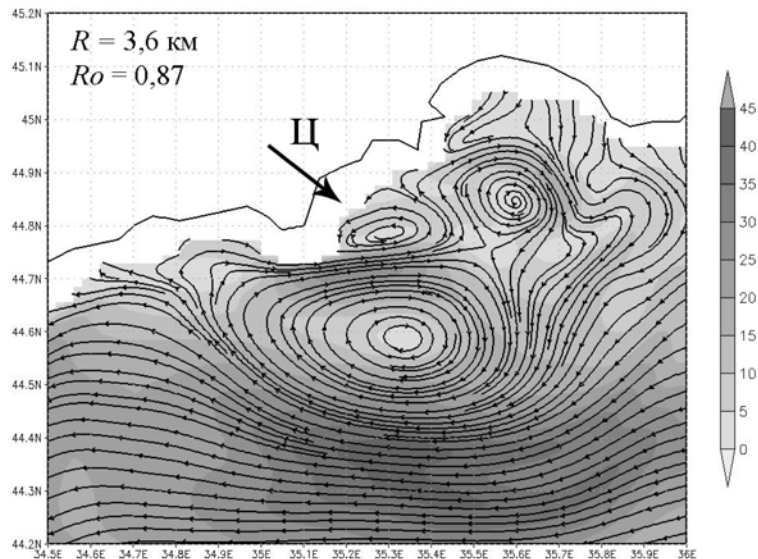
Динамические характеристики вихрей

Дата	Радиус вихря R , км	Орбитальная скорость V_{orb} , см ² /с	Ro
31.05.06	2,3	16	0,72
01.06.06	3,6	22	0,87
02.06.06	5	28	0,56
06.04.11	4,5	40	0,88
07.04.11	5	41	0,81
08.04.11	7,7	35	0,45

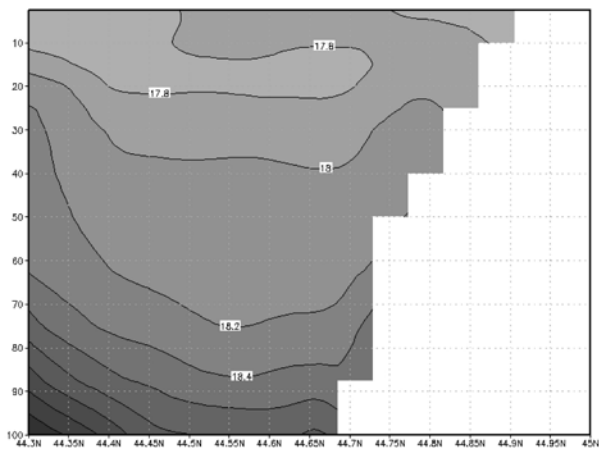
Обзор литературы, посвященной исследованию причин возникновения мелкомасштабной изменчивости в прибрежных районах Мирового океана, говорит о том, что авторы выделяют четыре основных механизма генерации вихрей: неоднородность ветрового воздействия, неустойчивость струйных течений и течений на периферии крупных вихрей, неоднородность поля плотности, топографические и орографические эффекты. Для выявления механизмов формирования мезо- и субмезомасштабных вихрей, реконструированных в наших экспериментах, были проанализированы меридиональные сечения в полях плотности и скорости, проходящие через центры вихрей. На рисунке 2 представлено поле течений 01.06.06 и соответствующие ему поля вдольбереговой компоненты скорости и солёности на разрезе вдоль 35,3° в.д. Вихрь, описанный выше, обозначен буквой «Ц» и стрелкой (рис. 2, а). Видно, что структура поля скорости однородна по глубине (рис. 2, б), по горизонтали четко прослеживается смена знака вдольбереговой компоненты скорости: у берега вектор скорости направлен на запад и модуль скорости равен 10 см²/с, в мористой части поток имеет скорость более 20 см²/с и направлен на восток. Вихрь прослеживается до глубины 40 м. При этом в поле солёности наблюдается увеличение изгиба изохалин над материковым склоном (рис. 2, в). Можно предположить, что механизм формирования рассмотренного вихря следующий. В центре относительно мощного мезомасштабного антициклона происходит опускание вод, что вызывает перепад плотности между периферией и центром вихря. На рисунке 2, в такой перепад ярко выражен у берега для изохалины 18 ‰. При этом увеличиваются отклонения изопикнических поверхностей и, следовательно, растёт запас доступной потенциальной

энергии. Над кромкой шельфа происходит переход энергии из потенциальной в кинетическую, и в поле скорости возникает вихрь. Анализ временного ряда синхронных разрезов в полях солёности и скорости показал, что первичной являлась аномалия плотности. Таким образом, субмезомасштабный вихрь у мыса Меганом в начале июня 2006 г. сформировался вследствие развития процессов бароклинной неустойчивости. Данный вывод согласуется с предыдущими работами автора [2], где проведен анализ работы силы плавучести, характеризующей изменение запаса доступной потенциальной энергии.

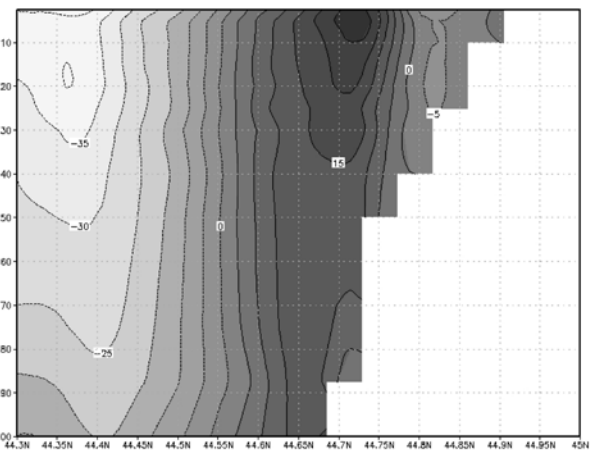
Другой процесс, приводящий к возникновению вихрей и проявления которого обнаружены в результатах наших экспериментов, – взаимодействие прибрежных течений с неоднородностями берега. Анализ поля скорости для обоих расчетов показал, что при набегании вдольберегового потока со скоростями более 40 см²/с на выступы берега (мысы) за ними образуются вихри. Области, где наиболее часто наблюдаются подобные вихри, – это акватории Керченского и Гераклеийского п-ова Крыма, побережье Северного Кавказа, Анатolianское побережье восточнее 34° в.д. Причем в южной части моря преимущественно возникают мезомасштабные вихри, что связано с пространственными размерами неоднородностей берега и топографией дна. В качестве примера рассмотрим динамику течений у мыса Боз-тепе (Турция) в апреле 2011 г. В результате набегания на мыс потока ОЧТ со скоростью более 50 см²/с в поле скорости 05.04.11 возникло возмущение линий тока. На следующие сутки за мысом сформировался вихрь (рис. 3, а), который под воздействием ОЧТ интенсифицировался, оторвался от препятствия и начал перемещаться в восточном направлении.



a



б



в

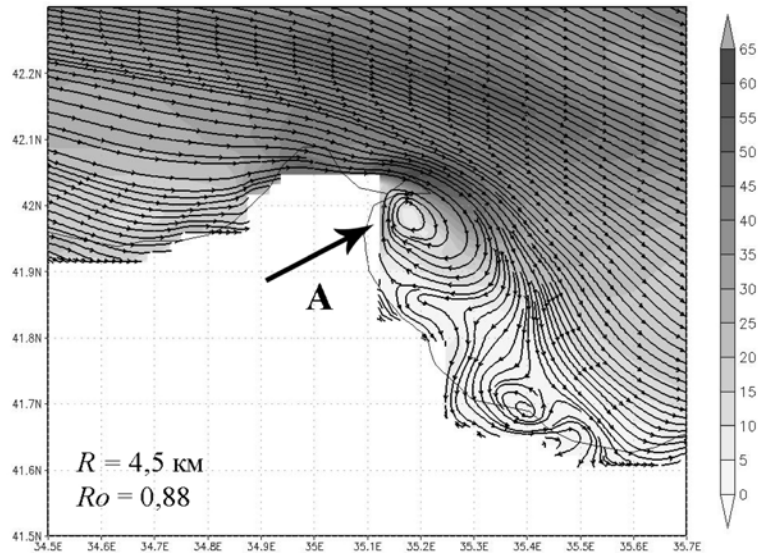
Рис. 2. Поля скорости (cm^2/c) и солёности (‰) 01.06.06: *a* – линии тока на горизонте 2,5 м; *б* – вдоль-береговая компонента скорости на разрезе $35,3^\circ$ в.д.; *в* – солёность на разрезе $35,3^\circ$ в.д.

В таблице представлены характеристики вихря с 6 по 8 апреля 2011 г. Видно, что к моменту формирования вихря число Россби было близко единице, а диаметр соизмерим с радиусом деформации, т. е. вихрь можно считать субмезомасштабным. С течением времени вихрь увеличился в размере, орбитальные скорости уменьшились и круговорот приобрел признаки уже мезомасштабного вихря. По глубине вихрь прослеживался до горизонта 30 м. Анализ изменения со временем полей солёности и вдольбереговой компоненты скорости на меридиональном разрезе вдоль $35,25^\circ$ в.д. показал, что причиной генерации вихря послужило торможение набегающего потока на расширяющемся за мысом шельфе в слое 0–60 м (рис. 3, б), в то время как в поле солёно-

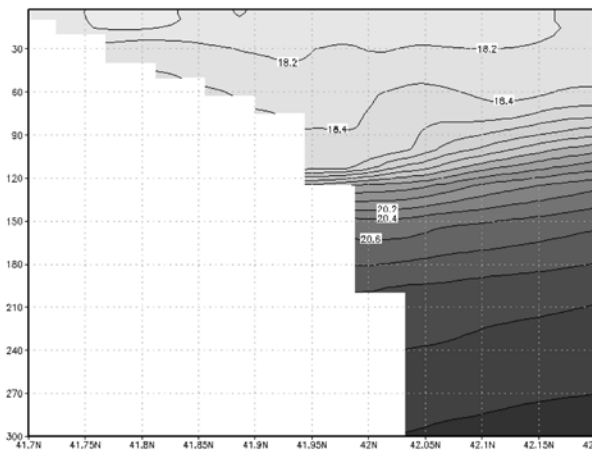
сти значительных изменений наклона изопоки не наблюдалось (рис. 3, в). Они проявились несколько позже, когда вихрь был уже сформирован. Таким образом, антициклонической вихрь за мысом Боз-тепе (Турция) в апреле 2011 г. сформировался вследствие обтекания препятствия тормозящим потоком. Анализ результатов наших расчетов подтвердил, что подобная картина наблюдалась для обоих экспериментов в различных частях моря. Данный вывод хорошо согласуется с работами [12, 24].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

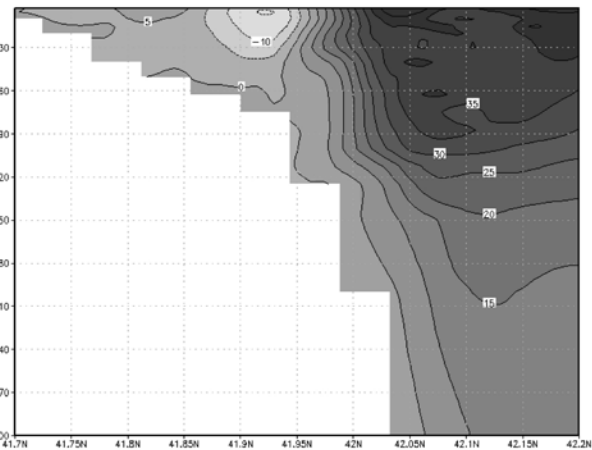
В результате работы были рассчитаны гидрофизические поля Черного моря в 2006 и 2011 гг. с высоким пространственным разрешением. Анализ полей скорости течений по-



a



б



в

Рис. 3. Поля скорости (cm^2/c) и солёности (‰) 06.04.11: *a* – линии тока на горизонте 2,5 м; *б* – вдольбереговая компонента скорости на разрезе $35,25^\circ$ в.д.; *в* – солёность на разрезе $35,25^\circ$ в.д.

казал, что модель МГИ с достаточной степенью точности воспроизводит мезомасштабные и субмезомасштабные особенности динамики с размерами менее 10 км. Результаты моделирования подтверждаются данными спутниковых и контактных наблюдений. Наиболее интенсивное образование мезомасштабных и субмезомасштабных вихрей наблюдается в прибрежных зонах между берегом и Основным черноморским течением в окрестностях Крымского полуострова, в северо-восточной и юго-восточной частях моря при слабых ветрах любого направления.

Анализ пространственно-временной изменчивости полей солёности и вдольбереговой компоненты скорости на вертикальных сечениях, проходящих через центры вихрей, показал, что в Черном море преобладают два

основных механизма формирования прибрежных круговоротов. Первый – это бароклинная неустойчивость, возникающая при увеличении горизонтального градиента плотности за счет подъема/опускания вод на периферии крупных вихрей или течений. В результате этого процесса увеличиваются наклоны изопикнических поверхностей, запас доступной потенциальной энергии растёт и ее часть преобразуется в вихревую энергию. Вторым механизмом – это обтекание неоднородностей берега набегающим тормозящим потоком. Анализ данных эксперимента показал, что необходимым условием формирования подобных вихрей является резкое уменьшение глубины за препятствием (мысом), при этом скорость прибрежного течения должна быть более $40 \text{ cm}^2/\text{c}$.

Работа выполнена по теме госзадания № 0827-2014-0010 «Комплексные междисциплинарные исследования океанологических процессов, определяющих функционирование и эволюцию экосистем Черного и Азовского морей на основе современных методов контроля состояния морской среды и гриттехнологий».

ЛИТЕРАТУРА

1. Архипкин В. С., Косарев А. Н., Гиппиус Ф. Н., Мигали Д. И. Сезонная изменчивость климатических полей температуры, солености и циркуляции вод Черного и Каспийского морей // Вестник Московского университета. Серия 5. География. 2013. № 5. С. 33–44.
2. Демьяшев С. Г., Дымова О. А. Исследование механизмов формирования субмезомасштабной и мезомасштабной динамики вод у побережья Крыма // Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа. 2014. Вып. 28. С. 442–447.
3. Демьяшев С. Г., Кортаев Г. К. Численная энергосбалансированная модель бароклинных течений океана с неровным дном на сетке С // Численные модели и результаты калибровочных расчетов течений в Атлантическом океане. М.: ИВМ РАН, 1992. С. 163–231.
4. Дымова О. А. Численный анализ динамики и энергетики мезомасштабных особенностей циркуляции Черного моря: дис. ... канд. физ.-мат. наук. Севастополь, 2014. 151 с.
5. Кубряков А. И. Применение технологии вложенных сеток при создании системы мониторинга гидрофизических полей в прибрежных районах Черного моря // Экологическая безопасность прибрежной и шельфовой зон и комплексное использование ресурсов шельфа. 2004. Вып. 11. С. 31–50.
6. Мизюк А. И., Кортаев Г. К., Ратнер Ю. Б. Адаптация модели NEMO для выполнения прогнозов в Черном море // Современное состояние и перспективы наращивания морского ресурсного потенциала юга России: тезисы докл. междунауч. конф. (Казивели, 15–18 сент. 2014 г.). Севастополь, 2014. С. 181–184.
7. Морской портал МГИ [Электронный ресурс]. URL: http://dvs.net.ru/mp/data/main_ru.shtml (дата обращения: 26.10.2015).
8. Экспериментальный Центр Морских прогнозов [Электронный ресурс]. URL: <http://www.innovation.org.ru/index.php> (дата обращения: 13.01.2017).
9. Demyshev S. G. A numerical model for online forecasting the Black Sea currents // *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2012. Vol. 48, no. 1. P. 120–132. doi: 10.1134/S0001433812010021
10. Demyshev S. G., Dymova O. A. Numerical analysis of the mesoscale features of circulation in the Black Sea coastal zone // *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2013. Vol. 49, no. 6. P. 603–610. doi: 10.1134/S0001433813060030
11. Divinsky B. V., Kuklev S. B., Zatsepin A. G., Chubarenko B. V. Simulation of submesoscale variability of currents in the Black Sea coastal zone // *Oceanology*. 2015. Vol. 55, no. 6. P. 814–819. doi: 10.1134/S000143701506003X
12. Elkin D. N., Zatsepin A. G. Laboratory study of the mechanism of the periodic eddy formation behind capes in a coastal sea // *Oceanology*. 2013. Vol. 53, no. 1. P. 24–35. doi: 10.1134/S0001437012050062
13. Enriquez C., Shapiro G., Souza A., Zatsepin A. Hydrodynamic modelling of mesoscale eddies in the Black Sea // *Ocean Dynamics*. 2005. 55(5-6): 476–489. doi: 10.1007/s10236-005-0031-4
14. Farda A., Deue M., Somot S., Horónyi A., Spiridonov V., Tóth H. Model ALADIN as a regional climate model for Central and Eastern Europe // *Studia Geophysica et Geodaeica*. 2010. 54(2): 313–332. doi: 10.1007/s11200-010-0017-7
15. Grayek S., Stanev E., Kandilarov R. On the response of the Black Sea level to external forcing: altimeter data and numerical modelling // *Ocean Dynamics*. 2010. Vol. 60, no. 1. P. 123–140. doi: 10.1007/s10236-009-0249-7
16. Karimova S. Spiral eddies in the Baltic, Black and Caspian seas as seen by satellite radar data // *Advances in Space Research*. 2012. Vol. 50, no. 8. P. 1107–1124. doi: 10.1016/j.asr.2011.10.027
17. Klein P., Morrow R., Samelson R., Chelton D. et al. Mesoscale/sub-mesoscale dynamics in the upper ocean // *NASA Surface Water and Ocean Topography (SWOT)* [Электронный ресурс]. URL: <http://www.avisio.altimetry.fr/fileadmin/documents/missions/Swot/WhitePaperSWOTSubmesoscale.pdf> (дата обращения: 14.09.2016).
18. Korotenko K. Modelling mesoscale circulation of the Black Sea // *Oceanology*. 2015. Vol. 55, no. 6. P. 820–826. doi: 10.1134/S0001437015060077
19. Mellor G. L., Yamada T. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems // *Rev. Geophys. Space Phys.* 1982. 20(4): 851–875. doi: 10.1029/RG020i004p00851
20. NonHydrostatic SKIRON/Eta Modelling System [Электронный ресурс]. URL: <http://forecast.uoa.gr/forecastnew.php> (дата обращения: 18.11.2015).
21. Thomas L. N., Tandon A., Mahadevan A. Submesoscale processes and dynamics // *Ocean Modelling in an Eddy Regime*. Geophys. Monogr. Ser. 2008. Vol. 177. P. 17–38. doi: 10.1029/177GM04
22. Zalesnyi V. B., Gusev A. V., Moshonkin S. N. The numerical model of the hydrodynamics of the

Black Sea and the Sea of Azov with variational initialization of temperature and salinity // *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2013. Vol. 49, no. 6. P. 642–658. doi: 10.1134/S0001433813060133

23. Zalesnyi V. B., Gusev A. V., Agoshkov V. I. Modelling the Black Sea circulation with high resolution in the coastal zone // *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2016. Vol. 52, no. 3. P. 277–293. doi: 10.1134/S0001433816030142

REFERENCES

1. Arkhipkin V. S., Kosarev A. N., Gippius F. N., Migali D. I. Sezonnaya izmenchivost' klimaticheskikh polei temperatury, solenosti i tsirkulyatsii vod Chernogo i Kaspiiskogo morei [Seasonal variations of climatic fields of temperature, salinity, and water circulation in the Black and Caspian Seas]. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 5. Geografiya. [Moscow Univ. Herald. Ser. 5. Geography]*. 2013. No. 5. P. 33–44.

2. Demyshev S. G., Dymova O. A. Issledovanie mekhanizmov formirovaniya submezomasshtabnoi i mezomasshtabnoi dinamiki vod u poberezh'ya Kryma [Study of formation mechanisms of submesoscale and mesoscale water dynamics near the Crimean Coast]. *Ekologicheskaya bezopasnost' pribrezhnoi i shel'fovoi zon i kompleksnoe ispol'zovanie resursov shel'fa [Ecological Safety of Coastal and Shelf Zones and Comprehensive Use of Shelf Resources]*. 2014. Vol. 28. P. 442–447.

3. Demyshev S. G., Korotaev G. K. Chislennaya energosbalansirovannaya model' baroklinnykh techenii okeana s nerovnym dnom na setke C [The numerical energy-balanced model of baroclinic currents of the ocean with a rough bottom grid C]. Chislennye modeli i rezul'taty kalibrovochnykh raschetov techenii v Atlanticheskom okeane [Numerical Models and the Results of Metering Calculations of the Currents in the Atlantic Ocean]. Moscow: IBM RAS, 1992. P. 163–231.

4. Dymova O. A. Chislennyi analiz dinamiki i energetiki mezomasshtabnykh osobennostei tsirkulyatsii Chernogo morya [Numerical analysis of the dynamics and energetics of the Black Sea mesoscale variability]: PhD (Cand. of Phys.-Math.) thesis. Sevastopol, 2014. 151 p.

5. Kubryakov A. I. Primenenie tekhnologii vlozhennykh setok pri sozdaniy sistemy monitoringa gidrofizicheskikh polei v pribrezhnykh raionakh Chernogo morya [The use of nesting technology to create monitoring system of the hydrophysical fields in the Black Sea coastal zones]. *Ekologicheskaya bezopasnost' pribrezhnoi i shel'fovoi zon i kompleksnoe ispol'zovanie resursov shel'fa [Ecological Safety of Coastal and Shelf Zones and Comprehensive Use of Shelf Resources]*. 2004. Vol. 11. P. 31–50.

24. Zatsepin A. G., Baranov V. I., Kondrashov A. A., Korzh A. O., Kremenetskii V. V., Ostrovskii A. G., Soloviev D. M. Submesoscale eddies at the Caucasus Black Sea shelf and the mechanisms of their generation // *Oceanology*. 2011. Vol. 51, no. 4. P. 554–567. doi: 10.1134/S0001437011040205

Поступила в редакцию 07.02.2017

6. Mizyuk A. I., Korotaev G. K., Ratner Ju. B. Adaptatsiya modeli NEMO dlya vypolneniya prognozov v Chernom more [NEMO model adaptation for forecasting in the Black Sea]. *Sovremennoe sostoyanie i perspektivy narashchivaniya morskogo resursnogo potentsiala yuga Rossii: tezisy dokl. mezhd. nauch. konf. (Katsiveli, 15-18 sent. 2014 g.) [Modern Status and Prospects of Increasing Marine Resource Potential in Southern Russia: Abstracts of the Int. Sci. Conf. (Katsiveli, Sept. 15–18, 2014)]*. Sevastopol, 2014. P. 181–184.

7. Morskoi portal MGI [Marine Portal of the MHI]. URL: http://dvs.net.ru/mp/data/main_ru.shtml (accessed: 26.10.2015).

8. *Ekspperimental'nyi tsentr morskikh prognozov [Experimental centre of marine forecasting]*. URL: <http://www.innovation.org.ru/index.php> (accessed: 13.01.2017).

9. Demyshev S. G. A numerical model for online forecasting the Black Sea currents. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2012. Vol. 48, no. 1. P. 120–132. doi: 10.1134/S0001433812010021

10. Demyshev S. G., Dymova O. A. Numerical analysis of the mesoscale features of circulation in the Black Sea coastal zone. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2013. Vol. 49, no. 6. P. 603–610. doi: 10.1134/S0001433813060030

11. Divinsky B. V., Kuklev S. B., Zatsepin A. G., Chubarenko B. V. Simulation of submesoscale variability of currents in the Black Sea coastal zone. *Oceanology*. 2015. Vol. 55, no. 6. P. 814–819. doi: 10.1134/S000143701506003X

12. Elkin D. N., Zatsepin A. G. Laboratory study of the mechanism of the periodic eddy formation behind capes in a coastal sea. *Oceanology*. 2013. Vol. 53, no. 1. doi: 10.1134/S0001437012050062

13. Enriquez C., Shapiro G., Souza A., Zatsepin A. Hydrodynamic modelling of mesoscale eddies in the Black Sea. *Ocean Dynamics*. 2005. 55(5-6): 476–489. doi: 10.1007/s10236-005-0031-4

14. Farda A., Deue M., Somot S., Horányi A., Spiridonov V., Tóth H. Model ALADIN as a regional climate model for Central and Eastern Europe. *Studia Geophysica et Geodaetica*. 2010. 54(2): 313–332. doi: 10.1007/s11200-010-0017-7

15. Grayek S., Stanev E., Kandilarov R. On the response of the Black Sea level to external forcing: altimeter data and numerical modelling. *Ocean Dynamics*. 2010. Vol. 60, no. 1. P. 123–140. doi: 10.1007/s10236-009-0249-7
16. Karimova S. Spiral eddies in the Baltic, Black and Caspian seas as seen by satellite radar data. *Advances in Space Research*. 2012. Vol. 50, no. 8. P. 1107–1124. doi: 10.1016/j.asr.2011.10.027
17. Klein P., Morrow R., Samelson R., Chelton D. et al. Mesoscale/sub-mesoscale dynamics in the upper ocean. NASA Surface Water and Ocean Topography (SWOT). URL: <http://www.aviso.altimetry.fr/fileadmin/documents/missions/Swot/WhitePaperSWOTSubmesoscale.pdf> (accessed: 14.09.2016).
18. Korotenko K. Modelling mesoscale circulation of the Black Sea. *Oceanology*. 2015. Vol. 55, no. 6. P. 820–826. doi: 10.1134/S0001437015060077
19. Mellor G. L., Yamada T. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Rev. Geophys. Space Phys.* 1982. 20(4): 851–875. doi: 10.1029/RG020i004p00851
20. *NonHydrostatic* SKIRON/Eta Modelling System. URL: <http://forecast.uoa.gr/forecastnew.php> (accessed: 18.11.2015).
21. Thomas L. N., Tandon A., Mahadevan A. Submesoscale processes and dynamics. *Ocean Modelling in an Eddy Regime. Geophys. Monogr. Ser.* 2008. Vol. 177. P. 17–38. doi: 10.1029/177GM04
22. Zalesnyi V. B., Gusev A. V., Moshonkin S. N. The numerical model of the hydrodynamics of the Black Sea and the Sea of Azov with variational initialization of temperature and salinity. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2013. Vol. 49, no. 6. P. 642–658. doi: 10.1134/S0001433813060133
23. Zalesnyi V. B., Gusev A. V., Agoshkov V. I. Modelling the Black Sea circulation with high resolution in the coastal zone. *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2016. Vol. 52, no. 3. P. 277–293. doi: 10.1134/S0001433816030142
24. Zatsepin A. G., Baranov V. I., Kondrashov A. A., Korzh A. O., Kremenetskii V. V., Ostrovskii A. G., Soloviev D. M. Submesoscale eddies at the Caucasus Black Sea shelf and the mechanisms of their generation. *Oceanology*. 2011. Vol. 51, no. 4. P. 554–567. doi: 10.1134/S0001437011040205

Received February 7, 2017

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

Дымова Ольга Алексеевна
научный сотрудник, к. ф.-м. н.
Морской гидрофизический институт РАН
ул. Капитанская, 2, Севастополь, Россия, 299011
эл. почта: olgadym@yahoo.com
тел.: +79788890293

CONTRIBUTOR:

Dymova, Olga
Marine Hydrophysical Institute,
Russian Academy of Sciences
2 Kapitanskaya St., 299011 Sevastopol, Russia
e-mail: olgadym@yahoo.com
tel.: +79788890293

УДК 519.6:539.2

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ИДЕНТИФИКАЦИИ СПЕКТРОВ ТЕРМОДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА

Ю. В. Заика, Е. К. Костикова

*Институт прикладных математических исследований
Карельского научного центра РАН, Петрозаводск*

В рамках технологических задач водородного материаловедения (включая проект ITER) ведется интенсивный поиск различных по назначению конструкционных материалов с заданными пределами водородопроницаемости. Одним из экспериментальных методов является термодесорбционная спектрометрия (ТДС). Образец, насыщенный водородом, дегазируется в условиях вакуумирования и монотонного нагрева. С помощью масс-спектрометра регистрируется десорбционный поток, позволяющий судить о характере взаимодействия изотопов водорода с твердым телом. В статье представлены распределенная краевая задача термодесорбции с динамическими граничными условиями и численный метод моделирования ТДС-спектра, требующий лишь интегрирования нелинейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) невысокого порядка (по сравнению, например, с методом прямых). Предложен метод оценки коэффициентов растворения и десорбции в условиях реального динамического взаимодействия поверхностных и диффузионных процессов, без искусственного разделения исследований на режимы лимитирования диффузией (DLR) и поверхностных реакций (SLR).

Ключевые слова: водородопроницаемость; поверхностные процессы; термодесорбция; динамические граничные условия; параметрическая идентификация; численное моделирование.

Yu. V. Zaika, E. K. Kostikova. INVERSE PROBLEM OF IDENTIFICATION OF HYDROGEN THERMODESORPTION SPECTRA

One of the technological challenges for hydrogen materials science (including the ITER project) is the currently active search for structural materials with various potential applications that will have predetermined limits of hydrogen permeability. One of the experimental methods is thermal desorption spectrometry (TDS). A hydrogen-saturated sample is degassed under vacuum and monotone heating. The desorption flux is measured by mass spectrometer to determine the character of interactions of hydrogen isotopes with the solid. The paper presents a distributed boundary-value problem of thermal desorption with dynamical boundary conditions and a numerical method for TDS spectrum simulation, where only integration of a nonlinear system of low order (compared with, e. g., the method of lines) ordinary differential equations (ODE) is required. A method for estimating dissolution and desorption coefficients in a real dynamic interaction of surface and diffusion processes without the artificial division of studies into diffusion limited regime (DLR) and surface limited regime (SLR) is suggested. This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project № 15-01-00744).

Keywords: hydrogen permeability; surface processes; thermal desorption; dynamical boundary conditions; parameter identification; numerical simulation.

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к взаимодействию изотопов водорода с различными материалами носит многоплановый характер [1–4, 11, 12, 15–17, 23, 24]. Достаточно упомянуть перспективы развития энергетики, проблему защиты конструктивных материалов от водородной коррозии, задачи проектирования химических реакторов, ракетостроения. Некоторые аспекты водородного материаловедения, связанные с тематикой данной статьи, исследованы в [6–9, 13, 21, 26, 30]. Работа является непосредственным продолжением [19, 27–29].

Экспериментальный опыт показывает, что лимитирующими являются не только диффузия, но и физико-химические процессы на поверхности [1, 2]. Параметры переноса зависят и от технологических особенностей получения партии материала, поэтому вряд ли следует ориентироваться на получение «табличных значений», нужны эффективные алгоритмы обработки экспериментальных данных. В статье остановимся на моделировании термодесорбции, учитывая лишь основные лимитирующие факторы и информативность рассматриваемого варианта ТДС-эксперимента.

Работы [6, 13, 21, 27] посвящены проблеме интерпретации ТДС-пиков. Анализ причин различных всплесков термодесорбции принципиально важен при выборе реакторных конструктивных материалов, контактирующих с изотопами водорода. В [6, 13] представлен достаточно подробный обзор. При численном моделировании без учета динамики поверхностных процессов ТДС-пики вынужденно интерпретируются как следствие захвата диффундирующего атомарного водорода дефектами структуры материала (ловушками) с различными энергиями связи и(или) как проявление многоканальной диффузии [5]. Разнообразие причин этим не исчерпывается. В [27] показано, что к появлению пика десорбции могут приводить и определенные сочетания скоростей поверхностных и диффузионных процессов. Таким образом, проблема интерпретации ТДС-спектра усложняется.

Данная работа, являясь продолжением [27], использует ту же математическую модель. Поэтому авторы будут стремиться к более сжато изложению вопросов, подробнее освещенных в [27]. Основным результатом настоящей статьи является метод параметрической идентификации по экспериментальным данным. Трудности решения обратных задач математической физики хорошо известны, име-

ется обширная математическая литература и ряд специализированных журналов (inverse problems, ill-posed problems...). В экспериментальной практике, чтобы избежать вычислительной некорректности многопараметрических обратных задач, стараются свести оценку параметров к отдельному исследованию DLR (diffusion limited regime) и SLR (surface limited regime). Но реальный материал эксплуатируется в условиях динамического взаимодействия «поверхность–объем». Для оценки коэффициента диффузии имеются подробно разработанные методики. Значительно сложнее определить параметры десорбции и растворения (если искусственно не занижать температуру, чтобы «отключить» объемные процессы). В статье представлен алгоритм, который позволяет оценить коэффициенты десорбции и растворения, когда диффузия активно взаимодействует с поверхностными процессами. Авторы стремились к использованию минимального математического аппарата, чтобы алгоритм был доступен для реализации на уровне использования свободно распространяемых математических пакетов (без необходимости разработки специализированного программного обеспечения).

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА

Уравнение диффузии

Рассмотрим диффузию водорода в образце тестируемого материала (пластине толщиной ℓ). Для определенности подразумеваем металл, сплав. Материал однороден, чтобы пренебречь взаимодействием атомов H с ловушками. Нагрев достаточно медленный. Для диффузии примем стандартное уравнение:

$$c_t(t, x) = D(T)c_{xx}(t, x), \quad (t, x) \in Q_{t_*}, \quad (1)$$

где $Q_{t_*} = (0, t_*) \times (0, \ell)$; $c(t, x)$ — концентрация диффундирующего H . Зависимость коэффициента диффузии D от температуры $T = T(t)$ соответствует закону Аррениуса: $D(T) = D_0 \exp\{-E_D/[RT]\}$.

Можно учесть несколько каналов диффузии (транскристаллическую, по границам зерен, вдоль дефектов) с взаимообменом между ними. Однако значительное увеличение числа неизвестных априори параметров делает задачу их оценки труднообозримой. Информативность ТДС-эксперимента ограничена, так что можно считать D в уравнении (1) некоторым интегральным эффективным показателем.

«В погоне» за описанием множества пиков термодесорбции удобна модель

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \\ &- \sum_{\nu=1}^m \left[a_{\nu}^{-} [1 - Z_{\nu}] c(t, x) - a_{\nu}^{+} z_{\nu}(t, x) \right], \\ \frac{\partial z_{\nu}}{\partial t} &= a_{\nu}^{-}(T) [1 - Z_{\nu}] c(t, x) - a_{\nu}^{+}(T) z_{\nu}(t, x), \end{aligned} \quad (2)$$

где $z_{\nu}(t, x)$ — концентрации атомов водорода, захваченного дефектами различных типов; a_{ν}^{\mp} — коэффициенты поглощения и выделения H ловушками; $Z_{\nu} \equiv z_{\nu}(t, x)/z_{\nu}^{\max}$ — степень насыщения ($z_{\nu}^{\max} = \max z_{\nu}$). Для практических целей захват учтен в простейшей «интегральной» форме, уточнение геометрии дефектов и их распределения существенно усложнило бы модель. Если дефект, например, не микрополости, а включения гидридной фазы, то на этапе ТДС-дегазации коэффициент $a_{\nu}^{-}(T)$ тождественно равен нулю, а значение $a_{\nu}^{+}(T)$ положительно лишь после достижения критической температуры: $T(t) \geq T_{\text{crit}}$.

За счет различных энергий связи (соответствующих коэффициентов E_a) можно добиться заданного количества ТДС-пиков. При этом такая модель требует специализированного программного обеспечения. Алгоритмы на основе разностных схем и результаты численного моделирования представлены в работах [19, 28]. В данной статье ограничимся уравнением (1) ($D = D_{\text{eff}}$).

Динамические граничные условия

Особенность модели связана с динамическими нелинейными граничными условиями. Пусть пластина контактирует с газообразным H_2 и поверхность является существенным потенциальным барьером (см. [1, с. 177–206; Габис, Компаниец, Курдюмов]). Тогда с учетом (де)сорбционных процессов краевые условия моделируются следующим образом:

$$c(0, x) = \bar{c}(x), \quad x \in [0, \ell], \quad t \in [0, t_*], \quad (3)$$

$$c_0(t) = g(T)q_0(t), \quad c_{\ell}(t) = g(T)q_{\ell}(t), \quad (4)$$

$$\dot{q}_0(t) = \mu(T)s(T)p_0(t) - b(T)q_0^2(t) + Dc_x(t, 0), \quad (5)$$

$$\dot{q}_{\ell}(t) = \mu(T)s(T)p_{\ell}(t) - b(T)q_{\ell}^2(t) - Dc_x(t, \ell), \quad (6)$$

$$b(T) = b_0 \exp\{-E_b[RT]^{-1}\},$$

$$s(T) = s_0 \exp\{-E_s[RT]^{-1}\}.$$

Здесь: $c_0(t) \equiv c(t, 0)$, $c_{\ell}(t) \equiv c(t, \ell)$ — граничные объемные концентрации H (знак

тождества часто используем в смысле равенства по определению); $q_{0,\ell}(t)$ — концентрации на поверхностях ($x = 0, \ell$, $\dot{q} \equiv dq/dt$); $g(T)$ — параметр локального равновесия между концентрациями на поверхности и в приповерхностном объеме (коэффициент быстрого растворения); μ — газокинетический коэффициент; $p_{0,\ell}(t)$ — давления молекулярного газа (H_2); $b(T)$ — коэффициент десорбции. Математическая корректность таких динамических граничных условий доказана в [31].

В модели фигурирует как молекулярный, так и атомарный водород. Для единообразия подсчет будем вести в атомах: $[c] = 1/\text{см}^3$, $[q] = 1/\text{см}^2$, $[Dc_x] = [bq^2] = 1/\text{см}^2\text{с}$. В кинетической теории газов величина μp определяет число частиц (в данном случае H_2), соударяющихся с единичной площадкой поверхности в единицу времени. Но за счет множителя s удобно воспринимать слагаемое $\mu s p$ как плотность потока атомов, оседающих на поверхности (без разделения процесса на стадии). Вместо s можно написать $2s$ и интерпретировать s как долю адсорбируемых атомов H .

В масштабе рассматриваемого далее ТДС-эксперимента удобно выбрать $[p] = \text{торр}$. Тогда получаем выражение $\mu(T) = (2\pi mkT)^{-1/2} \approx 2.474 \times 10^{22}/\sqrt{T}$. Здесь $[\mu] = 1_{H_2}/(\text{торр см}^2\text{с})$, $[T] = \text{К}$ (под корнем численное значение температуры), k — постоянная Больцмана, m — масса молекулы водорода. Зависимостью кинетической константы от температуры ($\mu \propto 1/\sqrt{T}$) часто пренебрегают на фоне экспоненты в зависимости $s(T)$.

Баланс потоков «поверхность–объем»

Модель (4) быстрого растворения (локального равновесия) на поверхности получается из более общих соотношений

$$\begin{aligned} k^{-}(T) [1 - c_{0,\ell}(t)c_{\text{max}}^{-1}] q_{0,\ell}(t) - \\ - k^{+}(T) [1 - q_{0,\ell}(t)q_{\text{max}}^{-1}] c_{0,\ell}(t) = \mp D(T)c_x|_{0,\ell}. \end{aligned} \quad (7)$$

Коэффициенты k^{-} , k^{+} характеризуют интенсивность растворения в объеме и выхода на поверхность. Если эти процессы в рассматриваемом диапазоне температур существенно быстрее диффузии и концентрации далеки от максимальных, то, полагая в относительном масштабе $Dc_x \approx 0$, получаем соотношение (4) с $g = k^{-}/k^{+}$. Если поверхность изотропна (в смысле $E_{k^{-}} \approx E_{k^{+}}$), то $g(T)$ слабо зависит от температуры. Формально можно записать $g(T) = g_0 \exp\{-E_g/[RT]\}$, $E_g = E_{k^{-}} - E_{k^{+}}$, но «энергия активации» E_g не обязательно положительна. Наличие «порогового» множителя $[1 - c/c_{\text{max}}]$ приводит к замедлению рас-

творения при $c_{0,\ell} \rightarrow c_{\max}$. Аналогично интерпретируется другой множитель, где величина $\theta(t) = q(t)/q_{\max}$ означает степень заполнения поверхности. В балансовых уравнениях (5), (6) можно моделировать плотность потока адсорбции атомов H выражением $\mu sp[1 - \theta]^2$. Но при ТДС-дегазации в диапазоне достаточно высоких «рабочих» температур $\theta \ll 1$.

Эти упрощения согласуются с ограниченной информативностью ТДС-эксперимента. При большом количестве параметров легче аппроксимировать экспериментальные данные. Но теряется единственность оценок. Это может привести к существенным ошибкам при экстраполяции результатов «с тонкой пластины на стенку», что неявно предполагается.

ТДС-эксперимент

Уточним рассматриваемый вариант ТДС-эксперимента. В камеру с пластиной из исследуемого металла или сплава подается водород в газовой фазе при сравнительно большом давлении. Образец нагрет с целью увеличения скорости сорбции. После равновесного насыщения он быстро охлаждается (отключается ток нагрева). В режиме последующего постоянного вакуумирования камеры образец медленно нагревается. Нагрев обычно линейный: $T(t) = T_0 + vt$. Скорость нагрева v невелика. По достижении максимальной температуры (если дегазация еще не завершилась) нагрев прекращается: $T(t) = T_{\max}$. С помощью масс-спектрометра измеряется давление $p(t)$ молекулярного водорода в вакуумной камере, обусловленное десорбцией $J(t) \equiv J_{\text{des}}(t) = b(t)q^2(t)$. Здесь и далее для упрощения обозначений примем сокращенную запись

$$b(t) \equiv b(T(t)), \quad D(t) \equiv D(T(t)), \quad s(t) \equiv s(T(t)).$$

Обобщенный коэффициент g быстрого растворения (локального равновесия «поверхность–объем») считаем константой ($E_{k^-} = E_{k^+}$) в пределах диапазона нагрева. Для метода ТДС выполнена симметрия:

$$p(t) = p_{0,\ell}(t), \quad q(t) = q_{0,\ell}(t), \quad c_0(t) = c_\ell(t), \quad (8)$$

$$D(t)c_x(t, 0) = -D(t)c_x(t, \ell), \quad \bar{c}(x) = \bar{c} = \text{const.}$$

Время t_* окончания эксперимента определим дегазией: $p(t) \approx 0$, $t \geq t_*$, $c(t_*, x) \approx 0$, $x \in [0, \ell]$. Информативность начальной и конечной стадии эксперимента невелика, так что достаточно ограничиться t_* , когда поток из образца упадет на порядок по сравнению с максимумом. Экспериментальными данными считаются графики плотности десорбции $J(t)$

или ТДС-спектры $J(T)$ ($T(t) \leftrightarrow t$) при различных условиях насыщения и скоростях нагрева. «Пересчет» $p(\cdot) \mapsto J(\cdot)$ конкретизируется характеристиками экспериментальной установки. Современное оборудование позволяет достигать достаточно глубокого вакуума ($10^{-9} - 10^{-7}$ торр). Поэтому на этапе насыщения слагаемое $P \equiv \mu sp$ ($P \gg 1$) является определяющим, а на этапе дегазации ресорбцией можно пренебречь ($P \ll 1$).

Подчеркнем, что описан один из вариантов насыщения. Используются также криогенные технологии и электрохимический способ. Целесообразно процесс насыщения согласовывать с условиями эксплуатации конструкционного материала. Соответствующие технические корректировки далее непринципиальны.

Анализ равновесия

Кратко проанализируем равновесные соотношения в рамках принятого уровня детализации моделирования. Пусть давление и температура постоянны. Формально равновесие характеризуется равенством нулю всех производных. Ориентируясь на широко применяемый закон Сивертса, будем интересоваться пропорциональностью величине \sqrt{p} .

1. На поверхности выполнено соотношение

$$\mu sp[1 - \theta_1]^2 - bq^2 = 0, \quad \theta_1 \equiv \frac{q}{q_{\max}}.$$

Здесь θ_1 — степень заполнения поверхности (далее у θ_i аналогичный смысл). Параметр s можно заменить (переобозначить) на $2s$, если интерпретировать s как долю адсорбируемых атомов из газовой фазы. Выразим θ_1 :

$$\begin{aligned} \nu^2 &\equiv \frac{\mu s}{bq_{\max}^2} \Rightarrow p\nu^2[1 - \theta_1]^2 = \theta_1^2 \Rightarrow \\ \Rightarrow \theta_1 &= \frac{\nu\sqrt{p}}{1 + \nu\sqrt{p}} < 1, \quad \nu\sqrt{p} \ll 1 \Rightarrow \theta_1 \propto \sqrt{p}. \end{aligned}$$

2. В равновесии «поверхность–объем» ($\theta_2 \equiv c/c_{\max}$, $k_1 \equiv k^-q_{\max}$, $k_2 \equiv k^+c_{\max}$, $\gamma \equiv k_1/k_2$) из соотношений (7) получаем

$$k_1\theta_1[1 - \theta_2] = k_2\theta_2[1 - \theta_1] \Rightarrow \theta_2 = \frac{\gamma\theta_1}{1 + [\gamma - 1]\theta_1}.$$

3. Учтем емкость ловушек (ограничимся одним типом, $m = 1$). Воспользуемся уравнением (2), добавив для симметрии множитель насыщения $[1 - \theta_2]$ при $z = z_\nu$. Тогда ($\theta_3 \equiv z/z_{\max}$, $a \equiv a^+z_{\max}/[a^-c_{\max}]$) получим

$$\theta_2[1 - \theta_3] = \theta_3[1 - \theta_2]a \Rightarrow \theta_3 = \frac{\theta_2}{a + [1 - a]\theta_2}.$$

Эксперимент «насыщение-дегазация» дает информацию о некоторой средней концентрации \tilde{c} в объеме $V = Sl$ (торцами пренебрегаем):

$$V\tilde{c} = 2\theta_1 q_{\max} S + \theta_2 c_{\max} V + \theta_3 z_{\max} V.$$

Нормируем \tilde{c} на c_{\max} и рассмотрим функцию

$$\Theta(p) \equiv \frac{\tilde{c}}{c_{\max}} = \frac{2q_{\max}}{\ell c_{\max}} \theta_1 + \theta_2 + \theta_3 \frac{z_{\max}}{c_{\max}}. \quad (9)$$

Нас интересуют графики в осях (\sqrt{p}, Θ) . Численные результаты показаны на рисунках 1, 2 ($\bar{a} = a^+/a^-$, $c_{\max} = 10^{18}$ Н/см³, $\ell = 0.1$ см). Параметров влияния достаточно много, но обычно можно оценить порядки величин и понять, каково «расстояние до прямолинейности» (до области адекватности закона Сивертса).

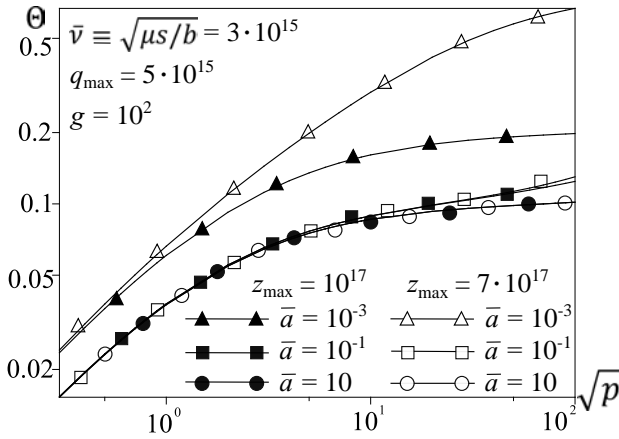


Рис. 1. Степень насыщения. Влияние дефектов

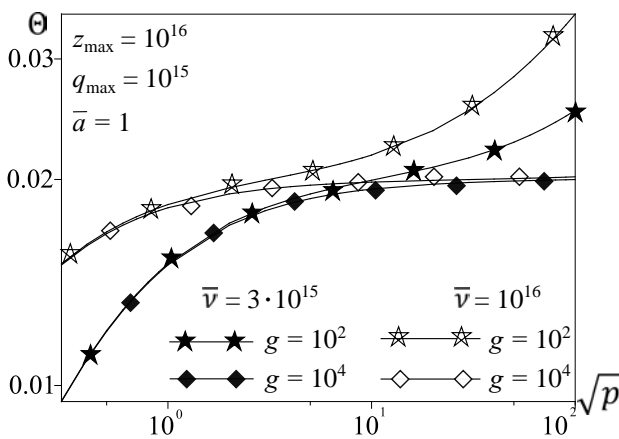


Рис. 2. Насыщение Θ . Влияние поверхности

Кривые $\Theta = f(\sqrt{p})$ имеют характерный вид «нарастающей волны». Это заметно лишь в широком диапазоне давлений. Для указанных параметров наиболее ярко точка перегиба

видна на кривых, маркированных звездочками. Анализ слагаемых в формуле (9) для общей концентрации показывает, что точка перегиба определяется выходом первого и третьего слагаемого на режим насыщения с дальнейшим преобладанием роста θ_2 . Подчеркнем, что в более узких диапазонах давлений графики практически прямолинейны, что соответствует участкам классического закона Сивертса.

Выскажем некоторое предостережение. В экспериментальной практике при оценке водородопроницаемости материалов часто для плотности проникающего потока H используется приближение Ричардсона

$$J_R(t) = \Phi [\sqrt{p_{\text{in}}(t)} - \sqrt{p_{\text{out}}(t)}] \ell^{-1}, \quad p_{\text{out}} < p_{\text{in}}. \quad (10)$$

Мембраны обычно очень тонкие, с относительно высокой проницаемостью. Для градиента концентрации можно принять равенство $c_x = [c_{\text{out}} - c_{\text{in}}]/\ell$. Тогда в рамках закона Фика «точной» является формула $J = -D[c_{\text{out}} - c_{\text{in}}]/\ell$. Здесь $J(t)$ — плотность проникающего потока атомарного водорода. Но непосредственно граничные объемные концентрации не измеряются, и приходится пользоваться квазиравновесным приближением, подставляя вместо c равновесную концентрацию $\bar{c} = \Gamma\sqrt{p}$ в соответствии с законом Сивертса (Γ — коэффициент растворимости, кратко — растворимость). В силу неравенств $\bar{c}_{\text{in}} > c_{\text{in}}$, $\bar{c}_{\text{out}} < c_{\text{out}}$ такая подстановка завышает второй множитель в выражении $J = D[c_{\text{in}} - c_{\text{out}}]/\ell$: $\bar{c}_{\text{in}} - \bar{c}_{\text{out}} > c_{\text{in}} - c_{\text{out}}$. Чтобы сохранить равенство, нужно формально понизить значение D .

Итак, если по экспериментальным данным $\{p(t), J(t)\}$ найдено подгонкой значение Φ (проницаемость) в соответствии с формулой (10), то $\Phi < D\Gamma$. По заданным числам Φ и Γ из формулы $\Phi = D\Gamma$ (которую обычно используют) получаем нижнюю оценку коэффициента диффузии D . Но это еще не все. В режиме стационарной (квазистационарной) проницаемости участвует в основном растворенный диффузионно подвижный атомарный водород. В рамках принятой модели (4)–(6) имеем $\bar{c} = \Gamma\sqrt{p}$, $\Gamma = g\sqrt{\mu s/b}$. Эксперимент «насыщение-дегазация» дает значение общей концентрации $\tilde{c} > \bar{c}$ и завышенное (для задачи проницаемости) значение Γ_{\max} : $\tilde{c} = \Gamma_{\max}\sqrt{p}$.

Таким образом, можно подгонкой оценить число Φ (проницаемость) по формуле (10). Эта информация ценна на практике как удобный коэффициент пересчета давлений в поток. Если же взять значение D из одного эксперимента (статьи), Γ — из другого источника (Γ_{\max}), то получаем иерархию, строго говоря, трех разных чисел: $\Phi < D\Gamma < D\Gamma_{\max}$. Для

материала с высоким уровнем захвата в ловушки можно на порядок завязать *вычисленную* проницаемость по сравнению с реальной. Проницаемость Φ (как параметр в соотношении (10)) имеет S -образную (аррениусовскую) форму кривой насыщения по порядку давлений. Лишь при относительно высоких давлениях (когда граничные концентрации приближаются к сивертсовским) имеем $\Phi \approx DG$. Необходимо контролировать, что подразумевается под одними и теми же терминами в разных публикациях и по какой модели каким методом тот или иной коэффициент вычислялся (коэффициенты не измеряются).

ФУНКЦИОНАЛЬНО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ ТДС-УРАВНЕНИЕ

Идентификация ТДС-спектров необходима не только для выявления причин пиков термодесорбции, но и для численной экстраполяции и обобщения результатов, полученных на лабораторных образцах (обычно ℓ — доли мм).

В модели (2) за счет ловушек с параметрами a_v^\pm можно получить любое количество пиков. Могут ли различные пики возникать при дегазации практически однородного материала? Для выяснения этого вопроса ограничимся простейшим уравнением диффузии (1), но с динамическими симметричными граничными условиями (4)–(6), (8). Поверхность считаем изотропной в смысле $g = \text{const}$ в рамках диапазона нагрева. Ресорбцией при вакуумировании пренебрегаем. Итак, мы ограничились минимальным числом параметров для модели, которая учитывает динамическое взаимодействие поверхностных процессов с диффузией. Далее работаем в этом приближении.

Чтобы сравнивать модельные и экспериментальные ТДС-спектры с целью оценки параметров, нужна только поверхностная концентрация (далее $J \equiv J_{\text{des}} = bq^2$). Естественно попытаться избежать итерационного решения краевой задачи при текущих приближениях $D_0, E_D, b_0, E_b, s_0, E_s, g$. Проведем преобразования, придя в итоге к интегрированию лишь системы ОДУ невысокого порядка.

Вывод уравнения типа Риккати

Принятая модель ТДС-дегазации:

$$c_t = D(t)c_{xx}, \quad c(0, x) = \bar{c}, \quad c_{0,\ell}(t) = gq(t), \\ \dot{q}(t) = -b(t)q^2(t) + D(t)c_x(t, 0), \quad J(t) \equiv b(t)q^2(t).$$

Сделаем замену времени $t' = \int_0^t D d\tau$:

$$c_t(t, x) = c_{xx}(t, x), \quad c(0, x) = \bar{c}, \quad c_{0,\ell} = gq(t), \quad (11)$$

$$c_x|_0 = -c_x|_\ell = \dot{q}(t) + J(t)D^{-1}(t) \quad (12)$$

(оставляем прежнее обозначение t). Считаем $q(t)$ функциональным параметром, а (12) — дополнительным соотношением к линейной задаче (11). Сделаем замену, приводящую краевые условия в (11) к однородным:

$$\hat{c} = c(t, x) - gq(t), \quad \hat{c}_t(t, x) = \hat{c}_{xx}(t, x) + f(t), \\ f(t) = -g\dot{q}(t), \quad \hat{c}(0, x) = \hat{c}_0(x) = 0, \quad \hat{c}|_{0,\ell} = 0.$$

Запишем решение линейной краевой задачи с помощью функции мгновенного источника (функции Грина):

$$\hat{c}(t, x) = \int_0^t \int_0^\ell G_1(x, \xi, t - \tau) f(\tau) d\xi d\tau, \\ G_1(x, \xi, t) \equiv \frac{2}{\ell} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2\pi^2}{\ell^2}t\right\} \sin\frac{n\pi x}{\ell} \sin\frac{n\pi\xi}{\ell}.$$

В граничные условия входит $\hat{c}_x(t, 0)$:

$$\hat{c}_x|_0 = -\frac{4g}{\ell} \int_0^t \dot{q}(\tau) \sum' \exp\left\{-\frac{n^2\pi^2}{\ell^2}(\tau - t)\right\} d\tau,$$

$\sum' \equiv \sum_{n=1,3,5,\dots}$. При $\tau = t$ ряд расходится, так что подразумевается почленное интегрирование. В исходном времени t имеем $c_x(t, 0) = \hat{c}_x(t, 0) = c_x(t, \ell) = \hat{c}_x(t, \ell)$,

$$c_x(t, 0) = -\frac{4g}{\ell} \sum' \int_0^t \dot{q}(\tau) \exp\left\{-\frac{n^2\pi^2}{\ell^2} \int_\tau^t D(s) ds\right\} d\tau.$$

Динамическое граничное условие запишется в интегро-дифференциальной форме

$$\dot{q}(t) = -b(t)q^2(t) - \frac{4gD}{\ell} \sum' \int_0^t \dot{q}(\tau) \exp\left\{-\frac{n^2\pi^2}{\ell^2} \int_\tau^t D(s) ds\right\} d\tau. \quad (13)$$

Полученное уравнение (13) с квадратичной нелинейностью будем классифицировать как функциональное уравнение Риккати нейтрального типа. Уравнение эквивалентно исходной краевой задаче в том смысле, что решение $q(t)$ однозначно определяет решение $c(t, x)$. Аналогия с ФДУ вида $\dot{x}(t) = \mathcal{F}[t, x(t), \dot{x}(t), x_{[0,t]}, \dot{x}_{[0,t]}]$ нейтрального типа [10] связана с тем, что избавиться от производной \dot{q} в правой части интегрированием по частям нельзя, так как появится расходящийся ряд. Нас интересует отрезок времени $[t_1, t_2] \subset (0, t_*)$, соответствующий пику термодесорбции (измерения при $t \approx 0, t_*$ малоинформативны). Уравнениям типа Риккати (включая матричные в теории оптимального управления) посвящена обширная литература.

Безразмерная форма задачи

Для моделирования удобно перейти к безразмерным переменным, выполнив замены: $t' = \int_0^t D(\tau) d\tau / \ell^2$, $x' = x / \ell$, $v = q / \bar{q}$ ($\bar{c} = g\bar{q}$). Не меняя обозначения t , имеем:

$$\dot{v}(t) = -\tilde{b}(t)v^2(t) - 4g\ell \sum' \int_0^t \dot{v}(\tau) \exp\{-n^2\pi^2[t - \tau]\} d\tau, \quad (14)$$

где $v(0) = 1$, $\tilde{b}(t) \equiv \bar{q}b(t)\ell^2/D(t)$ — безразмерный параметр квадратичной «десорбции».

Этап начального насыщения

Остановимся на выбранном варианте (для определенности) начального насыщения пластины растворенным водородом и соответствующем уточнении коэффициента при квадратичной нелинейности $\tilde{b}(t)$. Насыщение проводится при относительно высоких температуре $\bar{T} = \text{const}$ и давлении напуска $\bar{p} = \text{const}$ (для интенсификации сорбции). После установления равновесной концентрации имеем:

$$\mu(\bar{T})s(\bar{T})\bar{p} = b(\bar{T})\bar{q}^2, \quad \bar{c} = g\bar{q} \quad (g = \text{const}),$$

$$\Rightarrow \bar{c} = gb_0^{-1/2} \sqrt{\mu s \bar{p}} \Big|_{\bar{T}} \exp\{E_b[2R\bar{T}]^{-1}\},$$

$$\tilde{b}(t) \equiv \bar{q}b(t)\ell^2 D^{-1} = \bar{c}b(t)\ell^2 [gD(t)]^{-1},$$

$$\Rightarrow \tilde{b}(t) = \tilde{b}_0 \exp\{-E_{\tilde{b}}[RT(t)]^{-1}\},$$

$$E_{\tilde{b}} \equiv E_b - E_D,$$

$$\tilde{b}_0 \equiv \ell^2 D_0^{-1} \sqrt{b_0 \mu s \bar{p}} \Big|_{\bar{T}} \exp\{E_b[2R\bar{T}]^{-1}\}.$$

Формально $\tilde{b}(t) \equiv \tilde{b}(T(t))$ — аррениусовский параметр с энергией активации $E_b - E_D$. Как правило, $E_b > E_D$ и поверхностные процессы быстрее интенсифицируются с нагревом ($\dot{b} = \dots E_b \dot{T}$, $\dot{D} = \dots E_D \dot{T}$), так что $E_{\tilde{b}} > 0$. Предэкспонента \tilde{b}_0 зависит от всех параметров D_0 , b_0 , E_b , s_0 , E_s (кроме E_D). Тем самым коэффициент \tilde{b} в ТДС-эксперименте меняется строго монотонно и находится в ограниченном диапазоне $0 < \tilde{b}^- \leq \tilde{b}(t) \leq \tilde{b}^+$.

В дальнейшем будем ориентироваться на предел поверхностной концентрации порядка $q_{\max} \sim 10^{15} - 10^{16}$ (монослой в рамках геометрической статистики). Если на этапе насыщения для выбранных параметров $\bar{q} > 10^{15}$, то при численном моделировании учитываем степень заполнения поверхности и вместо $\mu s \bar{p} = b\bar{q}^2$ используем соотношение $\mu s \bar{p} [1 - \bar{q}q_{\max}^{-1}]^2 = b\bar{q}^2$ для вычисления начального значения \bar{q} .

Вместе с тем такое априорное ограничение (из соображений геометрического расположения неподвижных «шариков» на плоской поверхности) представляется дискуссионным. В

модели динамики порог концентрации q_{\max} , по-видимому, может быть и выше, если уточнить, что понимать под «кипящим» поверхностным слоем (при достаточно высокой температуре). Фактическое значение \bar{q} несколько условно, поскольку на него сильное влияние оказывает предварительная подготовка эксперимента (вакуумирование перед началом нагрева). Но основная часть водорода находится в объеме, уравнение диффузии (как и сам процесс) обладает сглаживающим эффектом, и нас интересуют выраженные пики термодесорбции (начальный и конечный отрезки времени эксперимента малоинформативны). По этим причинам в начальных вычислениях достаточно правильно оценить порядок «эффективной» концентрации \bar{q} , требования к высокой точности здесь не критичны (и их практически не реализовать).

Подчеркнем, что обсуждался один из возможных способов начального равномерного насыщения. Можно придерживаться независимой методики. По окончании эксперимента (по зарегистрированной динамике десорбционного потока) подсчитывается общее содержание водорода в образце. В модели (по S , ℓ и текущей оценке g) определяется начальное (равномерное) насыщение и соответствующее значение \bar{q} . Наконец, можно использовать данные по растворимости ($\bar{c} = \bar{c}(\bar{p}, T)$), поскольку обычно материал исследуется комплексно.

ВЫДЕЛЕНИЕ ИНТЕГРИРУЕМОЙ ОСОБЕННОСТИ

Функциональное уравнение термодесорбции (14) имеет особенность, которая затрудняет его численное решение. Функция

$$\Theta(s) = 4 \sum' \exp\{-n^2\pi^2 s\}, \quad \sum' \equiv \sum_{n=1,3,5,\dots}$$

имеет конечные значения при $s > 0$. Ряд быстро сходится при больших s , а при формальной подстановке $s = 0$ (когда переменная интегрирования τ достигает верхнего предела t) получаем расходящийся ряд. «Спасает» почленное интегрирование. При этом слагаемые ряда имеют порядок $O(n^{-2})$ ($n = 2i - 1$, $i \geq 1$), что приводит к медленной сходимости. Поставим следующую задачу: аппроксимировать уравнение системой ОДУ невысокого порядка, чтобы можно было эффективно использовать стандартные пакеты прикладных программ (например, свободно распространяемый Scilab). Для явного выделения интегрируемой особенности проведем преобразования, используя аппарат тэта-функций Якоби. Точ-

нее, нас интересует функция

$$\theta_3(t, x) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\{-n^2 \pi^2 t\} \cos(2n\pi x), \quad t > 0.$$

При $x = 0$ имеем другое представление [25]:

$$\begin{aligned} \theta_3(t, 0) &= 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\{-n^2 \pi^2 t\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \sum_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2}{t}\right\}. \end{aligned}$$

Ряд слева быстро сходится при больших значениях t , а ряд справа — при малых t (которые нас сейчас и интересуют). Если определить $\theta(t) = \sum \exp\{-\pi n^2 t\}$ ($n \in \mathbb{Z}, t > 0$), то получим соотношение $\theta(1/t) = \sqrt{t}\theta(t)$, или $\sqrt{t} \sum \exp\{-\pi n^2 t\} = \sum \exp\{-\pi n^2/t\}$ ($n \in \mathbb{Z}$), известное как функциональное уравнение для тэта-функции [14].

Проведем вспомогательные преобразования, разбивая промежуточную сумму на нечетные и четные слагаемые:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \sum_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2}{t}\right\} &= 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\{-n^2 \pi^2 t\} = \\ &= 1 + 2 \sum' + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \exp\{-k^2 \pi^2 4t\} = \\ &= 2 \sum' + \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \sum_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2}{4t}\right\}. \end{aligned}$$

Отсюда (после вычитания из первого ряда последнего и удвоения) получаем искомое разложение при $s > 0$:

$$\Theta(s) \equiv 4 \sum' \exp\{-n^2 \pi^2 s\} = \frac{1-Q}{\sqrt{\pi s}}, \quad Q(s) \equiv -2 \sum_{n=1}^{\infty} q^{n^2},$$

$q \equiv -\exp\{-1/(4s)\}$. Ряд Q быстро сходится при малых значениях s . При $s \rightarrow +0$ имеем $Q \rightarrow 0$ и интегрируемую особенность $\Theta \approx 1/\sqrt{\pi s}$. График функции $Q(s)$ имеет S -образный («аррениусовский») вид кривой насыщения и уже $Q(1) \approx 0.9996$. Функция $Q(s)/\sqrt{\pi s}$ монотонно возрастает до максимума (≈ 0.828 при $s \approx 0.334$) с последующим монотонным затуханием. В представлении $Q(s)$ с помощью ряда достаточно ограничиться небольшим числом слагаемых (5–8). В получении вместо (14) с помощью описанного представления $\Theta(s)$ уравнении

$$\dot{v}(t) = -\tilde{b}(t)v^2(t) - \varkappa \int_0^t \frac{1-Q(t-\tau)}{\sqrt{\pi[t-\tau]}} \dot{v}(\tau) d\tau \quad (15)$$

дробь (слабая особенность под интегралом) быстро убывает от бесконечности ($\tau = t$) до практически нуля ($\tau = t - 1$). При $t > 1$ нижний предел интегрирования можно заменить на $t - 1$. Таким образом, предысторию, которую можно не учитывать, нетрудно установить в исходном физическом времени по связи $1 = t'_2 - t'_1 = \int_{t_1}^{t_2} D(T(\tau))d\tau/\ell^2$. Компактное функционально дифференциальное ($\dot{v} \equiv dv/dt$) ТДС-уравнение (15) с начальными данными $v(0) = 1$ заменяет нелинейную краевую задачу с динамическими граничными условиями в том смысле, что для построения ТДС-спектра нужна формально только динамика поверхностной концентрации (десорбции).

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД И РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для определенности ориентируемся на опубликованные данные для никеля и стали (марки 12Cr18Ni10Ti) [3], вольфрама [4] и бериллия [20, 22]. Оценки существенно зависят от условий эксперимента и подготовки образцов, так что значения воспринимаем как модельные для численных иллюстраций.

Общие величины: $\ell = 0.1$ см, $T_0 = 300$ К. Принятые значения параметров модели для стали: $b_0 = 1.3 \times 10^{-9}$ см²/с, $E_b = 80 \times 10^3$ Дж/моль, $D_0 = 3.1 \times 10^{-4}$ см²/с, $E_D = 31 \times 10^3$, $g = 50$ см⁻¹, $\bar{c} = 5 \times 10^{17}$ 1/см³ (1 = ат. Н), $\dot{T} = 1$ К/с; для никеля: $b_0 = 1.53 \times 10^{-14}$, $E_b = 43.2 \times 10^3$, $D_0 = 7.5 \times 10^{-3}$, $E_D = 40 \times 10^3$, $g = 10^2$, $s_0 = 1.8 \times 10^{-2}$, $E_s = 61.4 \times 10^3$, $\bar{c} = 9.9 \times 10^{17}$ 1/см³, $\bar{p} = 37.4$ морр, $\bar{T} = 770$, $\dot{T} = 0.5$; для вольфрама: $b_0 = 6 \times 10^{-4}$, $E_b = 69.56 \times 10^3$, $D_0 = 4.1 \times 10^{-3}$, $E_D = 37.63 \times 10^3$, $g = 10^4$, $s_0 = 9 \times 10^{-3}$, $E_s = 15 \times 10^3$, $\bar{c} = 7.8 \times 10^{14}$, $\bar{p} = 670$ морр, $\bar{T} = 1300$, $\dot{T} = 5$; для бериллия: $b_0 = 3.1 \times 10^{-9}$, $E_b = 57.43 \times 10^3$, $D_0 = 3 \times 10^{-3}$, $E_D = 28 \times 10^3$, $g = 2 \times 10^2$, $s_0 = 1.44 \times 10^{-4}$, $E_s = 1.82 \times 10^3$, $\bar{c} = 5.2 \times 10^{17}$, $\bar{p} = 760$ морр, $\bar{T} = 1150$, $\dot{T} = 5$.

Основную роль в динамике дегазации играет квадратичная десорбция. Поэтому аппроксимировать будем интегральное слагаемое в уравнении (15). При этом горизонт последствия равен $h < 1$ ($\tau \in [t, t-h]$ в безразмерном времени, $Q(1) \approx 0.999$). Ориентируясь на формулу трапеций численного интегрирования и график гладкой функции $Q(s)/\sqrt{\pi s}$ (рис. 3), фиксируем $h \sim 0.3-0.4$. Замена $t' = \int_0^t D d\tau/\ell^2$ ориентирована на характерное время диффузии ℓ^2/D , так что такое h соответствует существенному отрезку физического времени в эксперименте. Будем последовательно на отрез-

как безразмерного времени длины h аппроксимировать ТДС-уравнение (15) системой ОДУ.

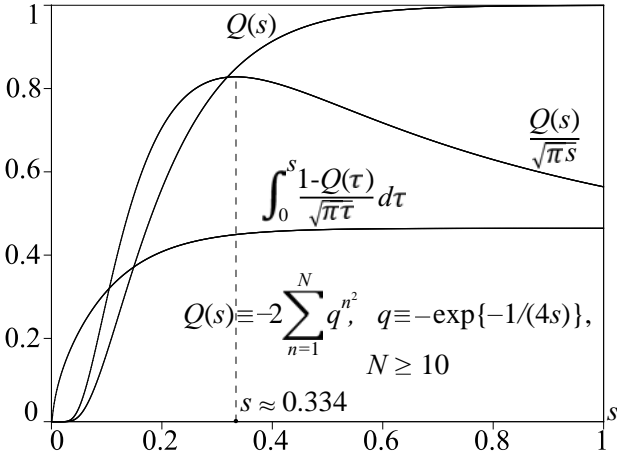


Рис. 3. Функции $Q(s)$ и $Q(s)/\sqrt{\pi s}$

Из-за неограниченной (но интегрируемой) особенности основной вклад в интеграл вносят значения $\dot{v}(\tau)$, $\tau \approx t$. Поэтому с учетом вогнутости функции \dot{v} используем квадратичное приближение $\dot{v}(\tau) \approx \dot{v}(t) + A[t - \tau] + B[t - \tau]^2$. Рассмотрим текущий отрезок $t \in [kh, (k+1)h]$, $k \geq 0$. Условия

$$\dot{v}(\tau)|_{kh} = \dot{v}(kh), \quad \int_{kh}^t \dot{v}(\tau) d\tau = v(t) - v(kh)$$

(полагаем $v(t) \approx v(kh) + \dot{v}(t)[t - kh]$) определяют искомые значения $A(t), B(t)$ (const по τ):

$$\begin{aligned} \dot{v}(\tau) \approx \dot{v}(t) + 2 \frac{\dot{v}(t) - \dot{v}(kh)}{t - kh} [t - \tau] - \\ - 3 \frac{\dot{v}(t) - \dot{v}(kh)}{[t - kh]^2} [t - \tau]^2, \end{aligned} \quad (16)$$

$\tau \in [kh, t]$ ($t \in [kh, (k+1)h]$). Представляем интеграл в (15) суммой: $\tau \in [0, kh]$, $\tau \in [kh, t]$. Во втором слагаемом интегрируем в аналитическом виде особенность $\dot{v}(\tau)/\sqrt{t - \tau}$ с подстановкой (16), а для интеграла без особенности ($Q(+0)/\sqrt{+0} = 0$) применяем теорему о среднем и формулу трапеций:

$$\begin{aligned} \int_{kh}^t \frac{Q(t-\tau)}{\sqrt{\pi[t-\tau]}} \dot{v}(\tau) d\tau = \dot{v}(\xi) \int_{kh}^t \frac{Q(t-\tau)}{\sqrt{\pi[t-\tau]}} d\tau \approx \\ \approx \frac{\dot{v}(kh) + \dot{v}(t)}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \cdot Q(t - kh) \sqrt{t - kh}. \end{aligned}$$

Для аппроксимации первого интеграла

$$\int_0^{kh} \frac{1-Q(t-\tau)}{\sqrt{\pi[t-\tau]}} \dot{v}(\tau) d\tau = 4 \sum' \int_0^{kh} \dot{v}(\tau) e^{-n^2 \pi^2 [t-\tau]} d\tau$$

оставим справа несколько слагаемых с учетом показателя n^2 (для определенности $n = 1, 3$). При этом отбросили отрицательные слагаемые ($\dot{v} < 0$). Компенсируем это заменой kh на t и введем дополнительно переменные $w_{1,2}(t)$:

$$\begin{aligned} w_i(t) &\equiv \int_0^t \exp\{-(2i-1)^2 \pi^2 [t-\tau]\} \dot{v}(\tau) d\tau, \\ \dot{w}_i(t) &= -(2i-1)^2 \pi^2 w_i(t) + \dot{v}(t), \quad w_{1,2}(0) = 0. \end{aligned}$$

В итоге вместо (15) получаем систему ОДУ:

$$\begin{aligned} \dot{v}(t) = -\hat{b}(t)v^2(t) + \frac{\hat{z}}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{2}{15} + \frac{Q(t_k)}{4} \right] \sqrt{t_k} \dot{v}(kh) - \\ - 4\hat{z}[w_1(t) + w_2(t)], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\dot{w}_1(t) = \dots - [4\hat{z} + \pi^2]w_1(t) - 4\hat{z}w_2(t),$$

$$\dot{w}_2(t) = \dots - 4\hat{z}w_1(t) - [4\hat{z} + 9\pi^2]w_2(t),$$

$$\begin{aligned} \hat{b} &\equiv \frac{\tilde{b}}{1 + \frac{z}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{32}{15} - \frac{Q(t_k)}{4} \right] \sqrt{t_k}}, \quad v(0) = 1, \quad w_{1,2}(0) = 0, \\ \hat{z} &\equiv \frac{z}{1 + \frac{z}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{32}{15} - \frac{Q(t_k)}{4} \right] \sqrt{t_k}}, \quad t_k \equiv t - kh. \end{aligned}$$

Троеточие обозначает первую строку первого уравнения ($-\hat{b} \dots \dot{v}(kh)$). Ряд для $Q(s)$ сходится очень быстро, в программной реализации достаточно 5–8 членов.

Для вычисления искомой функции $v(t) = q(t)/\bar{q}$ на текущем отрезке безразмерного времени (в системе (17) $t = t'$, $t' \in [kh, (k+1)h]$, $k \geq 0$) используем стандартный метод Рунге – Кутты 4-го порядка для интегрирования ОДУ (авторы пользовались пакетом Scilab). В случае двухпиковой структуры ТДС-спектра для повышения точности моделирования целесообразно использовать дополнительно переменные $w_{3,4}$. После возвращения к физическому времени получаем модельный ТДС-спектр $J(T) = b(T)q^2(t)$ ($t' \leftrightarrow t \leftrightarrow T(t)$).

Качественный вид ТДС-спектра металлических конструкционных материалов типичен. На рисунках 4–7 представлены численно смоделированные ТДС-спектры для указанных выше значений параметров водородопроницаемости конструкционных материалов при варьировании скоростей нагрева. Принятая модель и без учета дефектов (ловушек) позволяет получать различный вид двухпиковых графиков (когда интенсивнее низкотемпературный всплеск либо же пики сравнимы). В верхней части графиков для сравнения отмечено изменение так называемого транспортного параметра $W = lb_{\text{vol}}\bar{c}/D = lb\bar{c}/(Dg^2)$, который является определяющим при исследовании водородопроницаемости мембран [4]. Ори-

ентировочно Surface Limited Regime (SLR) соответствует $W < 10^{-2}$, а лимитирование диффузией (DLR) соответствует $W > 10^4$. Для бериллия и стали низкотемпературный ТДС-пик происходит в диапазоне, когда сопоставимую роль играют диффузия и процессы на поверхности. Высокотемпературный пик наблюдается уже в зоне DLR. Для никеля поверхностные процессы и диффузия оказывают сравнимое воздействие во всем диапазоне температур, а на графике при низких температурах видим лишь ступень, напоминающую пик.

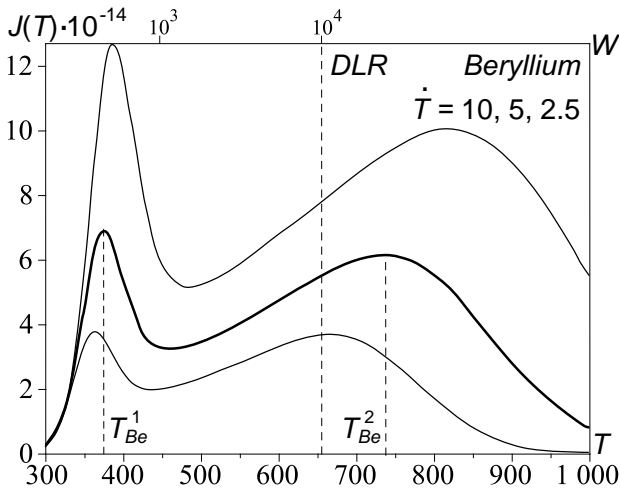


Рис. 4. ТДС-спектры, бериллий

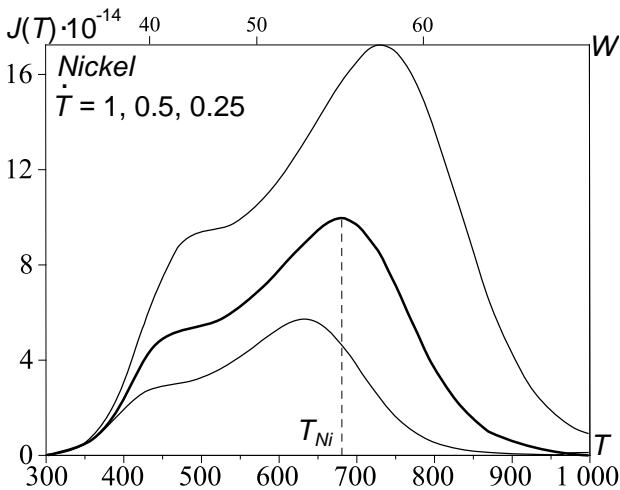


Рис. 5. ТДС-спектры, никель

Подробнее остановимся на рисунке 7, поскольку такой ТДС-спектр качественно отличается от предыдущих. Разумеется, приведенные выше значения параметров для вольфрама являются условными. Помимо микропримесей существенное влияние имеют особенности обработки поверхности образца. Тем более что в экспериментальной практике пластины тонкие, объем мал и ярче влияние поверхност-

ных процессов. Это одна из причин разброса количественных оценок параметров водородопроницаемости. Другая причина (и не последняя): при обработке экспериментальных данных используются разные модели (хотя формально коэффициенты носят одно и то же название). На принятых модельных данных обнаружен узкий всплеск с последующим затяжным выходом на второй пик, менее выраженный. Модель такова, что в образце нет достаточно емких ловушек (стандартное уравнение диффузии), но более детальное внимание уделяется поверхности (см.(4)–(6), пластина тонкая). Сначала активно десорбируется приповерхностный водород. По мере нагрева медленно активируется диффузия (градиент концентрации значителен, подкачка к поверхности растет). Но обычно такие явления объясняют наличием ловушек, а не динамикой взаимодействия «поверхность–объем».

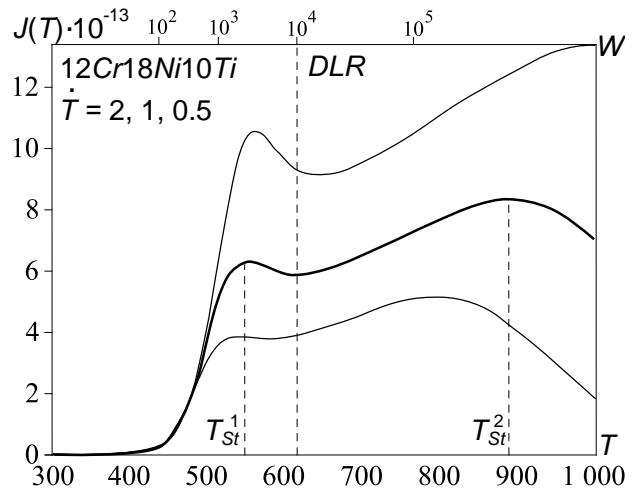


Рис. 6. ТДС-спектры, сталь

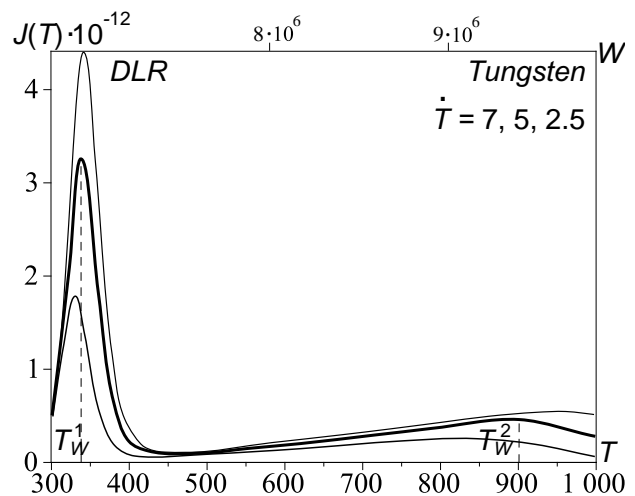


Рис. 7. ТДС-спектры, вольфрам

В работе [18] на рисунке 1 имеется удивительно похожий экспериментальный график (помеченный черными кружками). Хотя там речь идет о примесях в вольфраме и дейтерии. Смысл нашего модельного результата в том, что помимо стандартного упоминания ловушек следует иметь в виду и другие возможные причины различных ТДС-пиков.

На рисунках 8–11 отслеживается отдельно динамика поверхностных процессов и диффузии. Высокотемпературным пикам способствует существенно возросший с нагревом коэффициент десорбции и активизация диффузионного притока из объема. Пики при относительно низких температурах происходят при сравнительно небольшом диффузионном притоке к поверхности, но больших концентрациях в приповерхностном объеме.

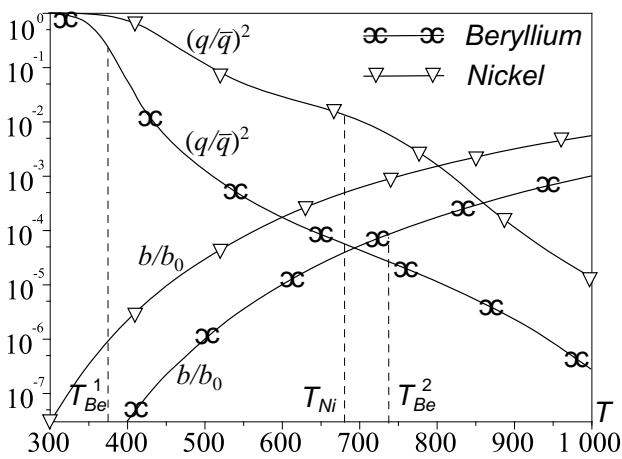


Рис. 8. Поверхностные параметры (Be, Ni)

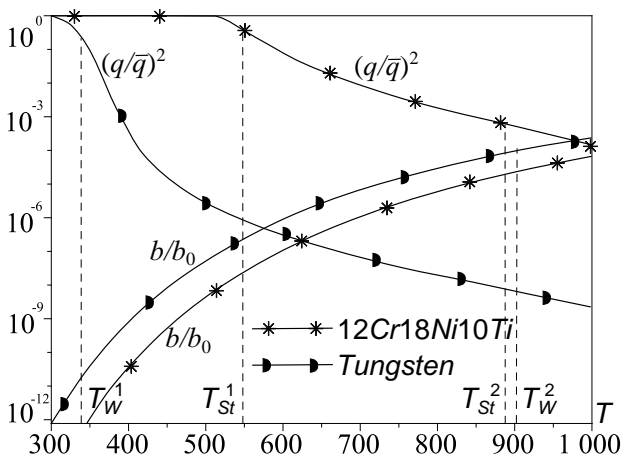


Рис. 9. Поверхностные параметры (W, сталь)

Рисунок 12 иллюстрирует динамику концентрации (недоступную для измерений) внутри исследуемого материала. Прогиб профиля концентрации (от середины к краю пла-

стины) наименее выражен для никеля – достаточно быстро устанавливается концентрация, близкая к равномерной. В бериллии и вольфраме, напротив, уже в начале эксперимента происходит значительное снижение концентрации у поверхности и прогиб профиля концентрации в дальнейшем при нагреве сохраняется. Для стали заметим, что лишь после достижения достаточно высокой температуры начинается активная дегазация образца.

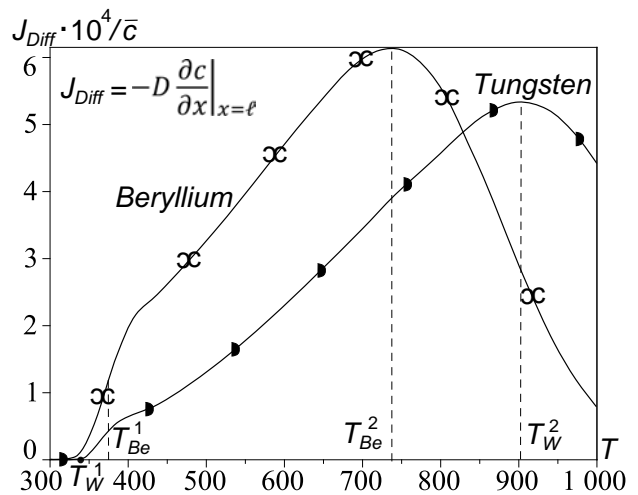


Рис. 10. Диффузионный приток к поверхности

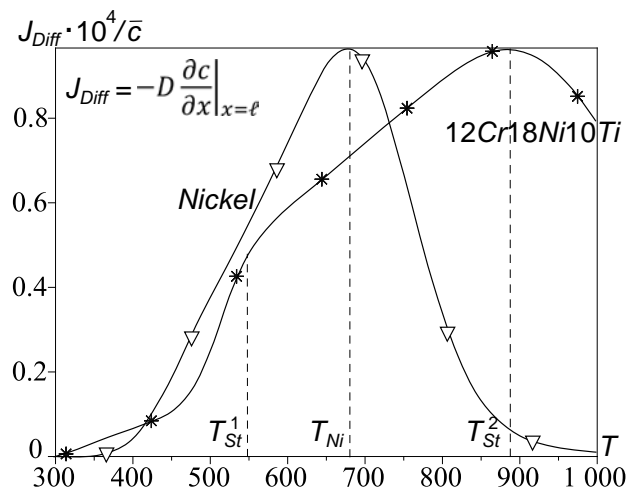


Рис. 11. Диффузионный приток к поверхности

Представим в компактной форме алгоритм численного моделирования ТДС-спектра.

- Задаем значения параметров модели s_0 , E_s , b_0 , E_b , D_0 , E_D , g . При условиях насыщения \bar{p} , \bar{T} определяем величины \bar{c} , $\tilde{b}(t')$, $\varkappa = g\ell$ согласно изложенному на стр. 37. На задании значения $s(\bar{T})$ можно «экономить», если известна равновесная

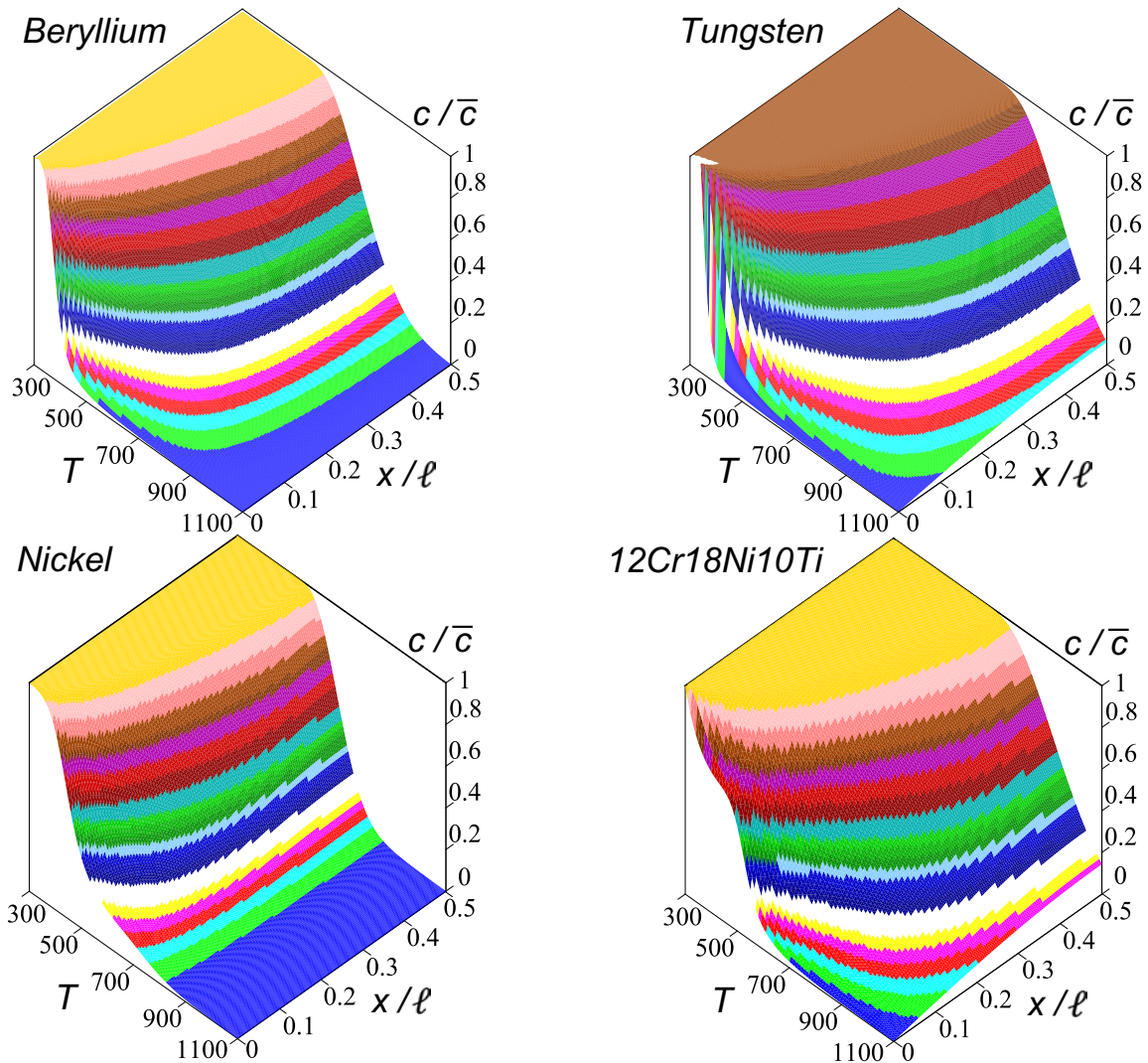


Рис. 12. Динамика распределения объемной концентрации внутри исследуемого материала

объемная концентрация \bar{c} растворенного диффузионно подвижного водорода. Возможны другие сценарии начального насыщения (см. стр. 37). Соответствующая корректировка начальных данных определяется особенностями реализации конкретного ТДС-эксперимента.

- В безразмерном времени поэтапно (на отрезках длины h) численно интегрируем ODE-систему невысокого порядка вида (17). В [27] представлены и другие ODE-аппроксимации. Это стандартная операция для любого современного математического пакета (включая freeware).
- По функции $v(t') = q(t')/\bar{q}$ в исходном физическом времени строим график плотности термодесорбции $J(t) = b(T(t))q^2(t)$ или ТДС-спектр $J(T)$.

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ

Представленный алгоритм численного моделирования позволяет быстро сканировать различные сценарии и условия эксплуатации материала (включая закон нагрева и экстраполирование результатов с ростом ℓ). Это полезная статистическая информация при выработке стратегии экспериментальных исследований. Для относительно новых материалов (различных сплавов) сначала нужно оценить параметры водородопроницаемости. Здесь мы сталкиваемся с обратными задачами математической физики, трудности решения которых хорошо известны. Будем считать, что коэффициент диффузии $D(T)$ известен (обычно используется метод Дайнеса – Бэррера в DLR-режиме проницаемости). Поставим задачу: по информации $J(t)$ (поток десорбции) оценить

поверхностные параметры b_0 , E_b , g . При этом мы находимся в реальных условиях, когда динамика десорбции тесно связана с диффузией в объеме. Задача оценки коэффициента объемной десорбции ($b_{vol} = b/g^2$), когда накоплением на поверхности можно пренебречь ($\dot{q} \approx 0$), рассмотрена в работе [29].

Поскольку функция $D(t) \equiv D(T(t))$ известна, то целесообразно сразу перейти к безразмерному времени t' , ориентированному на характеристическое время диффузионного переноса ℓ^2/D . Чтобы не усложнять выкладки, оставим прежние обозначения t . Представим нелинейное слагаемое в системе (17) в следующем виде: $\hat{b}(t)v^2(t) = \alpha(\kappa)\ell J(t)/[D(t)\bar{c}]$, $J(t) \equiv b(t)q^2(t)$. Здесь α — функция параметра κ , получаемая преобразованиями в силу обозначений в (14) и (17). Элементарные, но несколько громоздкие формулы опускаем. Функция $J(t)$ ($t = t'$) известна по измерениям. После подстановки в (17) получаем систему трех линейных ODE. Для повышения точности вычислений целесообразно добавить переменные $w_{3,4}$. Измерения обычно зашумлены, но функция $J(t)$ входит в правую часть ODE и при интегрировании происходит сглаживание.

Обратим внимание на то, что правые части уравнений теперь зависят только от одного оцениваемого коэффициента растворения $\kappa = g\ell$. Это позволяет провести декомпозицию алгоритма параметрической идентификации.

Задание значения g позволяет в итоге рассчитать зависимость $q(t) = q(t; g)$ в исходном физическом времени t . Теперь вспомним, что

$$J = bq^2 \Rightarrow b = Jq^{-2} \Rightarrow \ln b_0 - \frac{E_b}{R \cdot 10^3} \cdot \frac{10^3}{T} = \ln \psi, \quad (18)$$

где $\psi(t) \equiv J/q^2$, $T = T(t)$. В силу монотонности нагрева $t \leftrightarrow T(t)$, что позволяет ввести координаты $X \equiv 10^3/T$, $Y \equiv \ln \psi$. На плоскости (X, Y) получаем параметрически заданную кривую $X(t)$, $Y(t)$. Судя по соотношению (18), это должна быть прямая линия с отрицательным угловым коэффициентом. Отсюда следует критерий выбора «правильного» значения g : кривая $X(t)$, $Y(t) = \ln\{J(t)/q^2(t; g)\}$ должна оказаться отрезком прямой на плоскости (X, Y) . Эта подзадача скалярная, варьируется только g .

Формально продолжаем отрезок прямой до пересечения с осями координат. Пересечение с осью Y ($X = 0$) дает значение $\ln b_0$. Точка пересечения с осью абсцисс $\bar{x} = 10^3 \times R \ln b_0 / E_b$ определяет энергию активации E_b .

Трудоёмкость алгоритма определяется итерационным обращением к подпрограмме численного решения начальной задачи для систе-

мы ODE. Это требует определенных усилий и навыков работы с математическими пакетами, но использование стандартной встроенной операции несравнимо проще и быстрее итерационного решения исходной нелинейной краевой задачи с тремя варьируемыми параметрами (требующей специализированного программного обеспечения).

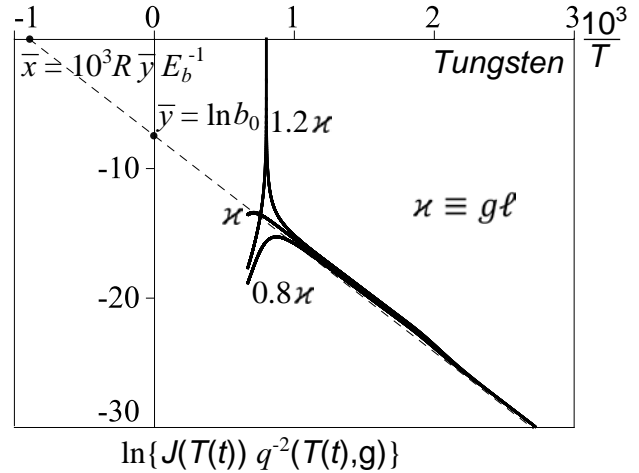


Рис. 13. Оценка параметров десорбции, вольфрам

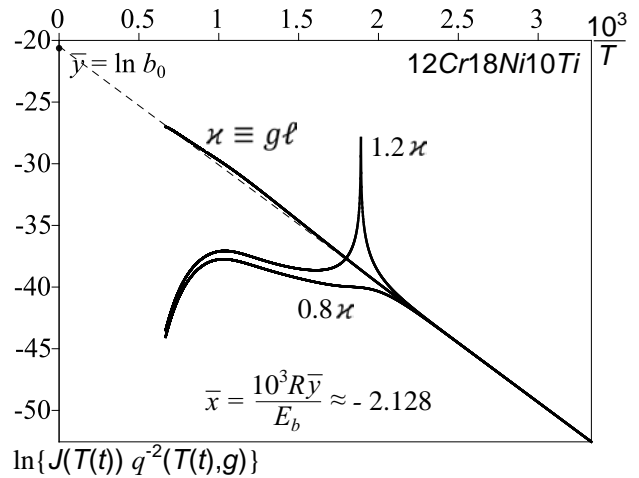


Рис. 14. Оценка параметров десорбции, сталь

Предложенный метод выпрямления проиллюстрирован на рисунках 13–16. Для тестирования алгоритма были построены модельные спектры (при $g = \text{const}$). Для получения более точных оценок на двухпиковых спектрах численно решалась система из пяти уравнений вида (17) для переменных $v(t)$, $w_{1-4}(t)$. Дополнительно проводилась серия экспериментов на спектрах, в которые добавлена случайная погрешность до 20% (использовалась стандартная функция Scilab генерирования случайных чисел, распределенных по равномерному зако-

ну). Алгоритм идентификации на основе интегрирования системы ОДУ (с подстановкой $J(t)$ в правые части) показал помехоустойчивость обработки входных данных.

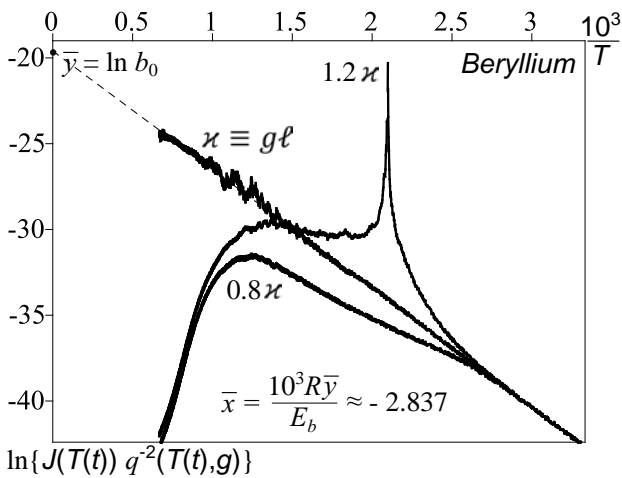


Рис. 15. Оценка b, g (Be, зашумленный спектр)

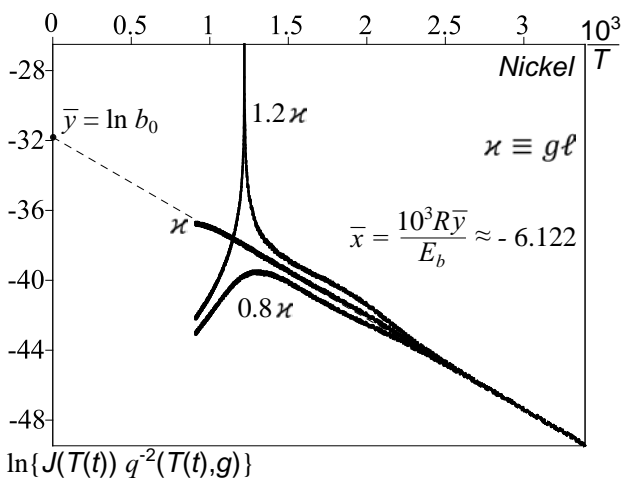


Рис. 16. Оценка b, g (Ni, зашумленный спектр)

Начальное значение g дает баланс

$$\bar{c}l + 2\bar{q} = \bar{c}[l + 2g^{-2}] = 2 \int_0^{t_*} J(\tau) d\tau.$$

Эксперименты показали, что точность такой оценки снижается при $g \gg 1$. На графиках представлены кривые с использованием «правильного» численного значения κ , при котором полученная кривая близка к отрезку прямой, и кривые, получаемые при отклонении от κ на 20%. Относительная погрешность тестирования алгоритма идентификации не превышает нескольких процентов (сказываются вычислительные погрешности решения как прямой, так и обратной задачи). Заметна высокая чувствительность (особенность типа «вер-

тикальный клюв») при превышении «истинного» значения κ . Математическая особенность возникает из-за того, что формально функция $v(t)$ меняет знак, принимая и отрицательные значения. Авторы не заботились о том, чтобы избежать такого «нефизического» перехода, поскольку это ярко свидетельствует о неправильном выборе значения κ . Такие же численные эксперименты проведены для зашумленных графиков. С более высокой точностью восстанавливаются энергии активации, поскольку энергетические характеристики активнее влияют на десорбцию по мере нагрева. С математической точки зрения совпадения модельных и экспериментальных кривых добиваться не обязательно (с учетом экспериментальных погрешностей в десятки процентов). ОДУ-аппроксимация вполне адекватна.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье анализируется проблема идентификации спектров термодесорбции водорода из конструкционных материалов, применяемых в ядерной энергетике. На качественном уровне идентификация состоит в выявлении причин всплеска десорбции. Обычно ТДС-пики связывают с высвобождением водорода из ловушек с различными энергиями связи. Как показано на простейшей модели диффузии (однородный материал), учет динамики поверхностных процессов может дать двухпиковую структуру даже на очень тонких экспериментальных образцах. Тенденция списывать все на «теорию различных ловушек» понятна, но объем образца практически нулевой для проявления емкости захвата.

Другая часть проблемы — параметрическая идентификация. Имеется большое разнообразие моделей водородопроницаемости, включая различные граничные условия (что влечет вариативность оценок коэффициента диффузии даже по порядку). ТДС-эксперимент имеет естественные ограничения информативности. Результаты должны корректно (единственным образом) численно экстраполироваться, например, с ростом толщины материала (экспериментальные образцы очень тонкие из-за ограничений времени измерений). В статье нелинейная краевая задача (стандартное уравнение диффузии, но с динамическими граничными условиями) сведена к функционально дифференциальному уравнению для поверхностной концентрации, поскольку для построения ТДС-спектра требуется лишь динамика десорбции. Предложен эффективный вычислительный алгоритм, ориентированный на использование математи-

ческих пакетов (в том числе freeware). Основной итоговый результат статьи — геометрически прозрачный метод решения обратной задачи идентификации поверхностных параметров, когда десорбция динамически взаимосвязана с диффузией в объеме.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №15-01-00744).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Взаимодействие водорода с металлами* / Ред. А. П. Захаров. М.: Наука, 1987. 296 с.
2. *Водород в металлах* / Ред. Г. Алефельд и И. Фёлькль. М.: Мир, 1981. Т. 1, 506 с.; т. 2, 430 с.
3. *Изотопы водорода. Фундаментальные и прикладные исследования* / Ред. А. А. Юхимчук. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. 697 с.
4. *Писарев А. А., Цветков И. В., Маренков Е. Д., Ярмо С. С.* Проницаемость водорода через металлы. М.: МИФИ, 2008. 144 с.
5. *Andronov D. Yu., Arseniev D. G., Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Yakovlev Yu. A.* Application of multichannel diffusion model to analysis of hydrogen measurements in solid // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42. P. 699–710. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.126
6. *Belyaev A. K., Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Sommitsch Ch., Yakovlev Yu. A.* Multichannel diffusion vs TDS model on example of energy spectra of bound hydrogen in 34CrNiMo6 steel after a typical heat treatment // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2016. Vol. 41. P. 8627–8634. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.03.198
7. *Castro F. J., Meyer G.* Thermal desorption spectroscopy (TDS) method for hydrogen desorption characterization (I): theoretical aspects // *J. Alloys and Compd.* 2002. Vol. 330–332. P. 59–63.
8. *Denisov E. A., Kompaniets M. V., Kompaniets T. N., Bobkova I. S.* Peculiarities of hydrogen permeation through Zr-1%Nb alloy and evaluation of terminal solid solubility // *J. Nucl. Mater.* 2016. Vol. 472. P. 13–19. doi: 10.1016/j.jnucmat.2016.01.022
9. *Evard E. A., Gabis I. E., Yartys V. A.* Kinetics of hydrogen evolution from MgH₂: experimental studies, mechanism and modelling // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2010. Vol. 35. P. 9060–9069. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.05.092
10. *Hale J.* Theory of Functional Differential Equations. Springer-Verlag, 1977. 366 p.
11. *Handbook of hydrogen storage: new materials for future energy storage* / Ed. M. Hirscher. Wiley-VCH, 2010. 353 p.
12. *Indeitsev D. A., Semenov B. N.* About a model of structure-phase transformations under hydrogen influence // *Acta Mechanica*. 2008. Vol. 195. P. 295–304. doi: 10.1007/s00707-007-0568-z
13. *Legrand E., Oudriss A., Savall C., Bouhattate J., Feaugas X.* Towards a better understanding of hydrogen measurements obtained by thermal desorption spectroscopy using FEM modeling // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2015. Vol. 40. P. 2871–2881. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.12.069.
14. *Lang S.* Elliptic functions. Addison-Wesley publishing. 1973. 326 p.
15. *Lototskiy M. V., Yartys V. A., Pollet B. G., Bowman Jr. R. C.* Metal hydride hydrogen compressors: a review // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2014. Vol. 39. P. 5818–5851. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.01.158
16. *McRae G. A., Coleman C. E., Leitch B. W.* The first step for delayed hydride cracking in zirconium alloys // *J. Nucl. Mater.* 2010. Vol. 396. P. 130–133. doi: 10.1016/j.jnucmat.2009.08.019
17. *Mieza J. I., Vigna G. L., Domizzi G.* Evaluation of variables affecting crack propagation by delayed hydride cracking in Zr-2.5Nb with different heat treatments // *J. Nucl. Mater.* 2011. Vol. 411. P. 150–159. doi: 10.1016/j.jnucmat.2011.01.101
18. *Oya Y., Inagaki Y., Suzuki S. et al.* Behavior of hydrogen isotope retention in carbon implanted tungsten // *J. Nucl. Mater.* 2009. Vol. 390–391. P. 622–625. doi: 10.1016/j.jnucmat.2009.01.175
19. *Rodchenkova N. I., Zaika Yu. V.* Numerical modelling of hydrogen desorption from cylindrical surface // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2011. Vol. 36. P. 1239–1247. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.06.121
20. *Samsonov A. V., Korenkov A. Yu., Gabis I. E., Kurdyumov A. A.* Limiting role of desorption in hydrogen transport across a deposited beryllium film // *Tech Phys. The Russian J. Appl. Phys.* 1998. Vol. 43, no. 1. P. 114–116.
21. *Schmid K., Rieger V., Manhard A.* Comparison of hydrogen retention in W and W/Ta alloys // *J. Nucl. Mater.* 2012. Vol. 426. P. 247–253. doi: 10.1016/j.jnucmat.2012.04.003
22. *Tazhibaeva I. L., Shestakov V. P., Klepikov A. Kh., Romanenko O. G., Chikhray Y. V., Kenzhin E. A., Zverev V. V.* Modeling of Hydrogen release from irradiated beryllium // *National Nucl. Center of the Republic of Kazakhstan Bull.* 2000. Vol. 1. P. 37–41.
23. *The hydrogen economy.* Eds. M. Ball, M. Wietschel. Cambridge Univ. Press, 2009. 646 p.
24. *Varin R. A., Czujko T., Wronski Z. S.* Nanomaterials for solid state hydrogen storage. NY: Springer, 2009. 338 p.
25. *Whittaker E. T., Watson G. N.* A Course of Modern Analysis. Cambridge University Press, 1996. 612 p.

26. *Zaika Yu. V., Bormatova E. P.* Parametric identification of hydrogen permeability model by delay times and conjugate equations // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2011. Vol. 36. P. 1295–1305. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.07.099
27. *Zaika Yu. V., Kostikova E. K.* Computer simulation of hydrogen thermal desorption by ODE-approximation // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42. P. 405–415. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.104
28. *Zaika Yu. V., Kostikova E. K.* Computer simulation of hydrogen thermodesorption // *Adv. in Mater. Sci. and Appl.* 2014. Vol. 3, iss. 3. P. 120–129. doi: 10.5963/AMSA0303003
29. *Zaika Yu. V., Kostikova E. K.* Determination of effective recombination coefficient by

thermodesorption method // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2014. Vol. 39. P. 15818–15826. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.07.117

30. *Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I.* Boundary-value problem with moving bounds and dynamic boundary conditions: diffusion peak of TDS-spectrum of dehydriding // *Appl. Math. Model.* 2009. Vol. 33, iss. 10. P. 3776–3791. doi: 10.1016/j.apm.2008.12.018
31. *Zaika Yu. V.* The solvability of the equations for a model of gas transfer through membranes with dynamic boundary conditions // *Comp. Maths. Math. Phys.* 1996. Vol. 36, iss. 12. P. 1731–1741.

Поступила в редакцию 23.05.2017

REFERENCES

1. *Vzaimodeistvie vodoroda s metallami* [Interaction of hydrogen with metals]. Ed. A. P. Zakharov. Moscow: Nauka, 1987. 296 p.
2. *Hydrogen in metals*. Eds. G. Alefeld, J. Völkl. Berlin: Springer-Verlag, 1978.
3. *Izotopy vodoroda. Fundamental'nye i prikladnye issledovaniya* [Hydrogen isotopes. Fundamental and applied studies]. Ed. A. A. Yukhimchuk. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2009. 697 p.
4. *Pisarev A. A., Tsvetkov I. V., Marenkov E. D., Yarko S. S.* Pronitsaemost' vodoroda cherez metally [Hydrogen permeability through metals]. Moscow: MIFI, 2008. 144 p.
5. *Andronov D. Yu., Arseniev D. G., Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Yakovlev Yu. A.* Application of multichannel diffusion model to analysis of hydrogen measurements in solid. *Int. J. Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42. P. 699–710. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.126
6. *Belyaev A. K., Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Sommitsch Ch., Yakovlev Yu. A.* Multichannel diffusion vs TDS model on example of energy spectra of bound hydrogen in 34CrNiMo6 steel after a typical heat treatment. *Int. J. Hydrogen Energy*. 2016. Vol. 41. P. 8627–8634. doi:10.1016/j.ijhydene.2016.03.198
7. *Castro F. J., Meyer G.* Thermal desorption spectroscopy (TDS) method for hydrogen desorption characterization (I): theoretical aspects. *J. Alloys and Compd.* 2002. Vol. 330–332. P. 59–63.
8. *Denisov E. A., Kompaniets M. V., Kompaniets T. N., Bobkova I. S.* Peculiarities of hydrogen permeation through Zr–1%Nb alloy and evaluation of terminal solid solubility. *J. Nucl. Mater.* 2016. Vol. 472. P. 13–19. doi: 10.1016/j.jnucmat.2016.01.022

9. *Evard E. A., Gabis I. E., Yartys V. A.* Kinetics of hydrogen evolution from MgH₂: experimental studies, mechanism and modeling. *Int. J. Hydrogen Energy*. 2010. Vol. 35. P. 9060–9069. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.05.092

10. *Hale J.* Theory of Functional Differential Equations. Springer-Verlag, 1977. 366 p.

11. *Handbook of hydrogen storage: new materials for future energy storage*. Ed. M. Hirscher. Wiley-VCH, 2010. 353 p.

12. *Indeitsev D. A., Semenov B. N.* About a model of structure-phase transformations under hydrogen influence. *Acta Mechanica*. 2008. Vol. 195. P. 295–304. doi: 10.1007/s00707-007-0568-z

13. *Legrand E., Oudriss A., Savall C., Bouhattate J., Feaugas X.* Towards a better understanding of hydrogen measurements obtained by thermal desorption spectroscopy using FEM modeling. *Int. J. Hydrogen Energy*. 2015. Vol. 40. P. 2871–2881. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.12.069

14. *Lang S.* Elliptic functions. Addison-Wesley publishing, 1973. 326 p.

15. *Lototskiy M. V., Yartys V. A., Pollet B. G., Bowman Jr. R. C.* Metal hydride hydrogen compressors: a review. *Int. J. Hydrogen Energy*. 2014. Vol. 39. P. 5818–5851. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.01.158

16. *McRae G. A., Coleman C. E., Leitch B. W.* The first step for delayed hydride cracking in zirconium alloys. *J. Nucl. Mater.* 2010. Vol. 396. P. 130–133. doi: 10.1016/j.jnucmat.2009.08.019

17. *Miezza J. I., Vigna G. L., Domizzi G.* Evaluation of variables affecting crack propagation by delayed hydride cracking in Zr–2.5Nb with different heat treatments. *J. Nucl. Mater.* 2011. Vol. 411. P. 150–159. doi: 10.1016/j.jnucmat.2011.01.101

18. Oya Y., Inagaki Y., Suzuki S. et al. Behavior of hydrogen isotope retention in carbon implanted tungsten. *J. Nucl. Mater.* 2009. Vol. 390–391. P. 622–625. doi: 10.1016/j.jnucmat.2009.01.175
19. Rodchenkova N. I., Zaika Yu. V. Numerical modelling of hydrogen desorption from cylindrical surface. *Int. J. Hydrogen Energy.* 2011. Vol. 36. P. 1239–1247. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.06.121
20. Samsonov A. V., Korenkov A. Yu., Gabis I. E., Kurdyumov A. A. Limiting role of desorption in hydrogen transport across a deposited beryllium film. *Tech Phys. The Russian J. Appl. Phys.* 1998. Vol. 43, no. 1. P. 114–116.
21. Schmid K., Rieger V., Manhard A. Comparison of hydrogen retention in W and W/Ta alloys. *J. Nucl. Mater.* 2012. Vol. 426. P. 247–253. doi: 10.1016/j.jnucmat.2012.04.003
22. Tazhibaeva I. L., Shestakov V. P., Klepikov A. Kh., Romanenko O. G., Chikhray Y. V., Kenzhin E. A., Zverev V. V. Modeling of Hydrogen release from irradiated beryllium. *National Nucl. Center of the Republic of Kazakhstan Bull.* 2000. Vol. 1. P. 37–41.
23. *The hydrogen economy.* Eds. M. Ball, M. Wietschel. Cambridge Univ. Press, 2009. 646 p.
24. Varin R. A., Czujko T., Wronski Z. S. Nanomaterials for solid state hydrogen storage. NY: Springer, 2009. 338 p.
25. Whittaker E. T., Watson G. N. A Course of Modern Analysis. Cambridge Univ. Press, 1996. 612 p.
26. Zaika Yu. V., Bormatova E. P. Parametric identification of hydrogen permeability model by delay times and conjugate equations. *Int. J. Hydrogen Energy.* 2011. Vol. 36. P. 1295–1305. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.07.099
27. Zaika Yu. V., Kostikova E. K. Computer simulation of hydrogen thermal desorption by ODE-approximation. *Int. J. Hydrogen Energy.* 2017. Vol. 42. P. 405–415. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.104
28. Zaika Yu. V., Kostikova E. K. Computer simulation of hydrogen thermodesorption. *Adv. in Mater. Sci. and Appl.* 2014. Vol. 3, iss. 3. P. 120–129. doi: 10.5963/AMSA0303003
29. Zaika Yu. V., Kostikova E. K. Determination of effective recombination coefficient by thermodesorption method. *Int. J. Hydrogen Energy.* 2014. Vol. 39. P. 15818–15826. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.07.117
30. Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I. Boundary-value problem with moving bounds and dynamic boundary conditions: diffusion peak of TDS-spectrum of dehydrating. *Appl. Math. Model.* 2009. Vol. 33, iss. 10. P. 3776–3791. doi: 10.1016/j.apm.2008.12.018
31. Zaika Yu. V. The solvability of the equations for a model of gas transfer through membranes with dynamic boundary conditions. *Comp. Maths. Math. Phys.* 1996. Vol. 36, iss. 12. P. 1731–1741.

Received May 23, 2017

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

Заика Юрий Васильевич

рук. лаб. моделирования природно-технических систем, д. ф.-м. н.
Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: zaika@krc.karelia.ru
тел.: (8142) 780059

Костикова Екатерина Константиновна

научный сотрудник, к. ф.-м. н.
Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: kostikova@krc.karelia.ru
тел.: (8142) 766312

CONTRIBUTORS:

Zaika, Yury

Institute of Applied Mathematical Research,
Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Russia
e-mail: zaika@krc.karelia.ru
tel.: (8142) 780059

Kostikova, Ekaterina

Institute of Applied Mathematical Research,
Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Russia
e-mail: kostikova@krc.karelia.ru
tel.: (8142) 766312

УДК 519.6:539.2

АЛГОРИТМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ МОДЕЛИ БЫСТРОЙ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ

Ю. В. Заика, Н. И. Родченкова

*Институт прикладных математических исследований
Карельского научного центра РАН, Петрозаводск*

Производство высокочистого водорода необходимо для экологически чистой энергетики и различных химико-технологических процессов. Методом измерения удельной водородопроницаемости исследуются различные сплавы, перспективные для использования в газоразделительных установках. Требуется оценить параметры диффузии и сорбции с тем, чтобы иметь возможность численно моделировать различные сценарии и условия эксплуатации материала (включая экстремальные), выделять лимитирующие факторы. В статье представлены нелинейная модель быстрой водородопроницаемости в соответствии со спецификой эксперимента и алгоритм ее параметрической идентификации.

Ключевые слова: водородопроницаемость; нелинейные краевые задачи; разностные схемы; численное моделирование.

Yu. V. Zaika, N. I. Rodchenkova. PARAMETRIC IDENTIFICATION ALGORITHM FOR A FAST HYDROGEN PERMEABILITY MODEL

High-purity hydrogen is required for clean energy and a variety of chemical technology processes. Various alloys, which may be well-suited for use in gas-separation plants, were investigated by measuring specific hydrogen permeability. One had to estimate the parameters of diffusion and sorption to numerically model the different scenarios and operational conditions of the material usage (including extreme ones), and identify the limiting factors. This paper presents a nonlinear model of fast hydrogen permeability in accordance with the specifics of the experiment and the parametric identification algorithm. This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Project No. 15-01-00744).

Key words: hydrogen permeability; nonlinear boundary-value problems; difference schemes; numerical simulation.

ВВЕДЕНИЕ

Исследования взаимодействия изотопов водорода с конструкционными материалами инициированы прежде всего задачами энергетики, защиты металлов от водородной коррозии, проектирования химических реакторов [2, 3, 6, 8, 10, 13, 14, 17, 20, 21]. Методом измерения удельной водородопроницаемости исследуются различные сплавы, перспективные для использования в газоразделительных установках. Требуется оценить парамет-

ры диффузии и сорбции с тем, чтобы иметь возможность численно моделировать различные сценарии и условия эксплуатации материала (включая экстремальные), выделять лимитирующие факторы. Некоторые частные задачи водородного материаловедения, созвучные теме данной работы, представлены и исследованы в [12, 15, 23, 27, 28].

Лимитирующими являются не только диффузионные процессы, но и физико-химические явления на поверхности [2, 3]. Параметры пе-

переноса зависят и от технологических особенностей получения материала, поэтому вряд ли следует ориентироваться на «табличные значения», нужны эффективные алгоритмы решения обратных задач параметрической идентификации адекватных математических моделей по экспериментальным данным. В статье остановимся на методе проницаемости, учитывая лишь основные факторы для прикладной задачи мембранной фильтрации и информационные возможности рассматриваемого эксперимента. Основой для проведенных математических исследований послужили работа [16] и данные по водородопроницаемости некоторых перспективных сплавов [11].

МОДЕЛЬ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ

Распределенная модель переноса

Вначале кратко опишем эксперимент. Образец конструкционного материала, нагретого до фиксированной температуры, является перегородкой вакуумной камеры. Предварительно проведена дегазация. В начальный момент времени на входной стороне скачкообразно создается давление молекулярного водорода. Измеряется падающее давление на входе и растущее давление в выходной емкости.

Рассмотрим перенос водорода сквозь образец материала (пластину толщиной ℓ и площадью S). Температура T постоянна в течение одного эксперимента. Концентрация растворенного водорода (в атомарном состоянии) относительно мала и диффузионный поток можно считать пропорциональным градиенту концентрации. Часть атомов Н взаимодействует с ловушками (микродефекты различной природы, включая микрополости), которые могут удерживать водород. Ограничимся представлением об «ограниченном стоке» без дополнительной детализации. В качестве модели диффузии с ограниченным захватом в объеме примем нелинейную систему уравнений

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(T) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - f(T, z, c), \quad (1)$$

$$\frac{\partial z}{\partial t} = f \equiv a(T) \left[1 - \frac{z(t, x)}{z_{\max}} \right] c - a_{\text{out}}(T) z, \quad (2)$$

где $c(t, x)$ — концентрация диффундирующего водорода (атомарного); $z(t, x)$ — концентрация захваченного диффузанта; D — коэффициент диффузии; $a \equiv a_{\text{in}}$ и a_{out} — коэффициенты поглощения и высвобождения атомов Н ловушками. Знак тождества часто используем в смысле равенства по определению. Величину z_{\max} считаем малой, захват носит характер

поправки и не требует более детального моделирования. Для конструкционных материалов (рассматривается металлический сплав) в рабочем диапазоне температур $T \in [500, 800]$ K, как правило, $a_{\text{out}} \ll a_{\text{in}}$ и в процессе насыщения (проницаемости) нет необходимости усложнять модель (далее полагаем $a_{\text{out}} = 0$). Величины D , a зависят от температуры T образца по закону Аррениуса с предэкспоненциальными множителями D_0 , a_0 и энергиями активации E_D , E_a (R — универсальная газовая постоянная): $D = D_0 \exp\{-E_D/[RT(t)]\}$, $a = a_0 \exp\{-E_a/[RT(t)]\}$. Начальные данные: в силу предварительной дегазации

$$c(0, x) = 0, \quad z(0, x) = 0, \quad x \in [0, \ell]. \quad (3)$$

Из баланса потоков получаем следующие нелинейные граничные условия:

$$-\frac{dQ_{\text{in}}}{dt} = [2s(T)\mu(T)p_0(t) - b(T)c_0^2(t)]S = -SD \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad (4)$$

$$-\frac{dQ_{\text{out}}}{dt} = [2s(T)\mu(T)p_\ell(t) - b(T)c_\ell^2(t)]S = SD \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=\ell}. \quad (5)$$

Здесь $Q_{\text{in}}(t)$, $Q_{\text{out}}(t)$ — количество атомов водорода во входной емкости объема V_{in} и выходной емкости объема V_{out} ; $c_0(t) \equiv c(t, 0)$, $c_\ell(t) \equiv c(t, \ell)$. Газообразный водород в рассматриваемом «рабочем» диапазоне температур находится в молекулярной форме, но для единообразия, поскольку сквозь металлическую мембрану диффундирует атомарный водород, подсчет будем вести в атомах. Согласно кинетической теории газов плотность J_p падающего на поверхность потока частиц связана с давлением p по формуле Герца–Кнудсена: $J_p = p/\sqrt{2\pi mkT}$ (k — постоянная Больцмана, m — масса молекулы водорода). В контексте рассматриваемой методики эксперимента удобно в качестве единиц измерений выбрать $[\ell] = \text{см}$, $[p] = \text{торр}$. Тогда численно получаем зависимость $J_p = \mu p$, $\mu(T) \approx 2.474 \cdot 10^{22}/\sqrt{T}$ ($[\mu] = 1_{\text{H}_2}/(\text{торр см}^2 \text{ с})$, $[T] = \text{К}$). На поверхности происходят процессы физической адсорбции, хемосорбции, диссоциации молекул на атомы, растворения. Лишь малая часть «налетающих» атомов Н окажется в абсорбированном состоянии в объеме. Это отражается множителем $2s$. Можно вместо $2s$ написать s (как параметр модели), но далее удобно в записи $2s$ безразмерный вероятностный множитель s интерпретировать как долю абсорбируемых атомов Н. Итак, $2s\mu p$ — результирующий

поток атомов в объем сквозь поверхность без разделения на более элементарные стадии. По контексту слово «плотность» опускаем.

Далее, $J_{0,\ell} = bc_{0,\ell}^2$ — это плотности потоков десорбции из образца (отклонение от квадратичности существенно лишь при экстремальных температурах), b — коэффициент десорбции. Для s и b также предполагаем аррениусовскую зависимость от температуры. По крайней мере формально: в экспоненте «энергия активации» E_s может оказаться и отрицательной величиной как линейная комбинация энергий активаций и теплот поверхностных процессов на пути «из газа в раствор». Если с обеих сторон мембраны поддерживать постоянное давление насыщения $p_s = \text{const}$ (s — *saturation*) молекулярного водорода при постоянной температуре T , то в итоге установится равновесная концентрация \bar{c} растворенного атомарного диффузионно подвижного водорода. Из модели (4), (5), приравнявая производные к нулю, получаем $\bar{c} \propto \sqrt{p_s}$: $\bar{c} = \Gamma\sqrt{p_s}$, $\Gamma \equiv \sqrt{2s\mu/b}$.

Уточним экспериментальные условия. Объемы $V_{\text{in,out}}$ — несколько литров, толщина мембраны ℓ меньше мм, площадь S — около см^2 , давление напуска $p_0(0)$ — несколько десятков торр. Диапазон $[p_{\text{min}}, p_{\text{max}}]$ невелик, ограничимся $z_{\text{max}} = \sigma\bar{c}$, $\sigma \leq 0.1$. Это не приведет к нарушению закона Сивертса ($\bar{c} + z_{\text{max}} \propto \sqrt{p_s}$), причем $\bar{c} + z_{\text{max}} \approx \bar{c} = \Gamma\sqrt{p_s}$ в пределах экспериментальной точности.

Остается определить величины Q_{in} , Q_{out} . В масштабе времени переноса сквозь мембрану газ находится в термодинамическом квазиравновесии, поэтому воспользуемся формулой $N = pV/(kT)$. Здесь N — количество частиц газа, занимающего объем V при температуре T и давлении p (в системе СИ $[p] = \text{Па}$, $[V] = \text{м}^3$, $[k] = \text{Дж/К}$). С учетом соотношений торр = 133.322 Па, Па = Дж/м³ (формально), получаем для соответствующих давлений и объемов в граничных условиях (4), (5) $Q = 2N = \alpha pV/T$, $\alpha \approx 1.931 \cdot 10^{19}$. Здесь p, V, T означают численные значения в выбранных единицах (торр, см³, К).

Замечание. Конструктивно мембрана находится в трубке (которая нагрета до заданной температуры) между входной и выходной емкостями. Диаметр трубки достаточно велик, чтобы критерием термодинамического квазиравновесия газа в трубке и емкостях считать равенство давлений. В кинетической константе $\mu(T)$ следует брать температуру мембраны. В объемах $V_{\text{in,out}}$ (массивные оболочки которых находятся при комнатной температуре) газ может нагреваться. Целесообраз-

но в предварительном эксперименте напустить в емкости «комнатный» газ при практически непроницаемой металлической мембране. Затем нагреть трубку и зафиксировать повышения давлений. В рамках приближения (уравнения состояния) идеального газа это позволяет оценивать приращения температуры газа в емкостях. Соответствующие температуры газа и нужно использовать в приведенной для Q формуле (и последующих, за исключением значения μ). Необходимость такого уточнения определяется особенностями конкретной экспериментальной установки. Соответствующая корректировка значений T в дальнейших выкладках не должна вызывать затруднений. К тому же эта процедура относительно слабо влияет на итоговый расчет модельных давлений с учетом погрешностей измерений и при относительно больших объемах V .

Модель быстрой проницаемости

Из физических соображений ясно, что, когда мембрана тонкая и материал обладает высокой водородопроницаемостью, быстро установится квазистационарный режим: ловушки насыщены и распределение диффузанта практически линейное по толщине. В этом смысле расчеты в рамках приведенной выше «общей» модели подтверждают ее адекватность. При отсутствии возможности измерять приповерхностные концентрации на практике часто используется приближение Ричардсона для проникающего потока:

$$J(t) = -D\partial_x c = D\ell^{-1}[c_0(t) - c_\ell(t)] \approx \approx J_R(t) = D\Gamma\ell^{-1}[\sqrt{p_0(t)} - \sqrt{p_\ell(t)}].$$

Поставим задачу моделирования концентраций $c_{0,\ell}$ по давлениям $p_{0,\ell}$ (что представляет и самостоятельный интерес) без квазиравновесного упрощения $c(t) = \Gamma\sqrt{p(t)}$.

Спустя малое в масштабе эксперимента время t_0 наступает квазистационарный режим (ловушки насыщены и $\partial_x c = -[c_0(t) - c_\ell(t)]/\ell$), что существенно упрощает исходную модель (1)–(5) (с учетом формулы $Q = \alpha pV/T$):

$$\dot{p}_{0,\ell}(t) = \mp\beta_{0,\ell}[c_0(t) - c_\ell(t)], \quad (6)$$

$$t \geq t_0 > 0, \quad \beta_{0,\ell} \equiv SD[\alpha V_{\text{in,out}}\ell]^{-1}T,$$

$$2s\mu p_{0,\ell}(t) - bc_{0,\ell}^2(t) = \pm D\ell^{-1}[c_0(t) - c_\ell(t)]. \quad (7)$$

Поскольку в силу баланса «вход–выход» выполняются равенства $\dot{p}_\ell(t) = -V_{\text{in}}V_{\text{out}}^{-1}\dot{p}_0(t) \Rightarrow p_\ell(t) = p_\ell(t_0) + V_{\text{in}}V_{\text{out}}^{-1}[p_0(t_0) - p_0(t)]$, то достаточно из граничных условий (7) выразить концентрации $c_{0,\ell}(t) = c_{0,\ell}(p_0(t))$ и подставить

в первое уравнение (6) (выбор знаков соответствует порядку индексов $0, \ell$).

Для численного моделирования удобны безразмерные нормированные переменные

$$\begin{aligned} X_{0,\ell}(t) &= 1 + 2\ell c_{0,\ell}(t) b D^{-1}, \\ a_{0,\ell}(t) &= 4\ell^2 \Gamma^2 p_{0,\ell}(t) b^2 D^{-2} - 1. \end{aligned} \quad (8)$$

При этом система уравнений (7) компактно записывается в симметричном виде $a_0 + 2X_\ell = X_0^2$, $a_\ell + 2X_0 = X_\ell^2$. Для переменной $X \equiv X_\ell$ получаем неполное уравнение четвертой степени $[X^2 - a_\ell]^2 = 4[2X + a_0]$, которое решается в радикалах (нас интересует положительный корень из физических соображений). Правда, явное выражение несколько громоздко и все равно придется численно интегрировать первое уравнение (6) вида $\dot{p}_0 = f(p_0)$. Поэтому нацелимся на вывод дифференциальных уравнений для $X_{0,\ell}$, поскольку информация о динамике граничных концентраций $c_{0,\ell}$ представляет и самостоятельный интерес.

Продифференцируем по времени уравнения (7) и подставим производные давлений из (6). В переменных $X_{0,\ell}$ получим систему

$$\dot{X}_0(t) = -2sM_0[X_0 - X_\ell] \cdot \frac{X_\ell - V_{\text{in}}V_{\text{out}}^{-1}}{X_0X_\ell - 1}, \quad (9)$$

$$\dot{X}_\ell(t) = 2sM_\ell[X_0 - X_\ell] \cdot \frac{X_0 - V_{\text{in}}^{-1}V_{\text{out}}}{X_0X_\ell - 1}, \quad (10)$$

$$M_0 \equiv \frac{\mu ST}{\alpha V_{\text{in}}}, \quad M_\ell \equiv \frac{\mu ST}{\alpha V_{\text{out}}}, \quad t \geq t_0.$$

Замена переменных (8) определяет концентрации $c_{0,\ell}(t)$, по которым из уравнений (7) вычисляются модельные давления $p_{0,\ell}(t)$.

Сформулируем поэтапно алгоритм численного моделирования давлений $p_{0,\ell}(t)$ ($t \geq t_0$) при текущих значениях коэффициентов D , b , s (авторы пользовались свободно распространяемым пакетом Scilab). Ориентируемся на «обычные» условия эксперимента [11, 16, 18, 19, 30], включая значения p , T , ℓ , V , S .

1. Фиксируем $t = t_0$: пропускаем быстрые переходные процессы (десятки секунд в масштабе часов эксперимента). Для переменной $X \equiv X_\ell$ выбираем корень полинома четвертой степени $[X^2 - a_\ell(t_0)]^2 - 4[2X + a_0(t_0)]$. Из физических соображений $c_\ell(t_0) > \bar{c}_\ell(t_0)$ и, следовательно, $X > 1 + \sqrt{1 + a_\ell} = 1 + 2\ell\Gamma\sqrt{p_\ell(t_0)}bD^{-1}$.

2. Из системы уравнений $a_0 + 2X_\ell = X_0^2$, $a_\ell + 2X_0 = X_\ell^2$ ($t = t_0$) находим недостающее значение $X_0(t_0)$. Достаточно и одного уравнения, но учитываем усредняющие процедуры, включая определение значений $p_{0,\ell}(t_0)$.

3. С полученными начальными данными численно интегрируем систему ОДУ (9), (10). Замена переменных (8) определяет концентрации $c_{0,\ell}(t)$, по которым из уравнений (7) вычисляются модельные давления $p_{0,\ell}(t)$, $t \geq t_0$.

Вычислительные эксперименты показывают, что модельные кривые уже практически неотличимы (при $t \geq t_0$) от тех, которые генерируются исходной принятой моделью — нелинейной распределенной краевой задачей.

Отметим принципиальное отличие от квазиравновесной модели (приближения Ричардсона), где единственным параметром для аппроксимации экспериментальных давлений является комплекс $\Phi = DG$. При реализации описанного выше алгоритма существенными являются все варьируемые параметры исходной модели, влияющие на проницаемость: D , b , s . Тем самым модель быстрой водородопроницаемости не теряет информативность о рассматриваемых параметрах переноса.

МОДЕЛИРОВАНИЕ Н-ПРОНИЦАЕМОСТИ

Комплексирование экспериментов

В экспериментальной практике широко применяются различные модификации методов прорыва и термодесорбционной спектроскопии (ТДС). Результаты измерений зависят не только от особенностей установок, но и от тщательности подготовки образцов новых перспективных материалов, подлежащих тестированию на водородопроницаемость. Нередко последовательная смена методик приводит, например, к появлению дополнительных примесей на поверхности образца, что существенно влияет на воспроизводимость результатов. Эти данные являются входными при решении обратных задач параметрической идентификации, чувствительных к уровню различного рода погрешностей. В этой связи целесообразно комплексирование экспериментов с целью повышения точности и информативности измерений. Предлагается следующий вариант «каскадного» эксперимента.

Мембрана, нагретая до фиксированной температуры, является перегородкой вакуумной камеры. Предварительно проведена дегазация образца. С входной стороны скачкообразно создается достаточно высокое давление газообразного водорода. С выходной стороны производится непрерывная вакуумная откачка и с помощью масс-спектрометра определяется проникающий поток. Это эксперимент прорыва. Его достоинством является надежное определение коэффициента диффузии методом Дайнеса – Бэррера (по так называемому

времени запаздывания). Это позволяет «отделить» в модели объемные процессы от поверхностных, параметры которых значительно труднее оценить. По достижении стационарного уровня проникающего потока повышаем входное давление и дожидаемся установления нового стационарного значения. По трем (как минимум) скачкам на входе фиксируем стационары на выходе, что позволяет оценить «степень прямолинейности» изотермы. Затем прекращаем откачку, и эксперимент переходит в стадию «сообщающихся сосудов», как описано выше. После выравнивания давлений (образец практически равномерно насыщен водородом) можно отключить нагрев, затем произвести откачку с обеих сторон мембраны и начать медленный нагрев образца (ТДС-эксперимент). При этом не происходит разгерметизации диффузионной ячейки и поверхность образца не загрязняется дополнительными примесями. Детали первых двух стадий далее будут уточняться по мере изложения метода решения обратной задачи параметрической идентификации.

Численное моделирование прорыва

Ориентируемся для определенности на достаточно подробные описания условий экспериментов и данные по сплавам с высокой водородопроницаемостью на основе металлов 5-й группы, в частности ванадия, представленные в публикациях [1, 5, 11, 16, 18, 19, 22, 30]. Фиксируем $T = 673$ К, $\ell = 0.05$ см, $\mu(T) = 2.474 \times 10^{22} / \sqrt{T}$ $1_{\text{H}_2} / (\text{торр см}^2 \text{ с})$, $D = 2 \times 10^{-5}$ $\text{см}^2 / \text{с}$, $\Gamma = 2 \times 10^{20}$ $1_{\text{H}} / (\text{см}^3 \sqrt{\text{торр}})$, $\Phi = D\Gamma = 4 \times 10^{15}$ $1_{\text{H}} / (\text{см с} \sqrt{\text{торр}})$. Задаем значение $s = 1.2 \times 10^{-4}$ и вычисляем соответствующий коэффициент десорбции $b = 2\mu s / \Gamma^2 = 5.7 \times 10^{-24}$ $\text{см}^4 / \text{с}$. Задаем тройку входных давлений $\bar{p}_{1,2,3} = \{30, 50, 70\}$ торр, которые скачкообразно устанавливаются и поддерживаются до достижения стационарных потоков на выходе. Предварительно мембрана дегазирована, с выходной стороны ведется постоянная вакуумная откачка. Температуру газа во входной и выходной емкостях (достаточно большого объема) считаем равной 300 К. Эта незначительная поправка к комнатной температуре обусловлена нагревом диффузионной ячейки с образцом (уточняется характеристиками конкретной экспериментальной установки).

Условия эксперимента таковы, что на выходе мембраны концентрация практически нулевая, а на входе относительно быстро устанавливается стационарная концентрация (но она ниже равновесной): $\tilde{c} < \bar{c}$. В рамках модели

определяем \bar{c}_i и \tilde{c}_i по формулам

$$\begin{aligned} \bar{c}_i &= \sqrt{2\mu s \bar{p}_i b^{-1}}, \\ 2\mu s \bar{p} - b\bar{c}^2 &= \bar{J} = D\tilde{c}\ell^{-1} \Rightarrow \\ \Rightarrow \tilde{c}_i &= -a + \sqrt{a^2 + \Gamma^2 \bar{p}_i}, \quad a \equiv D[2b\ell]^{-1}. \end{aligned}$$

Для фиксированных выше модельных значений параметров

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 &= 1.06 \times 10^{21} < \bar{c}_1 = 1.09 \times 10^{21}, \\ \tilde{c}_2 &= 1.38 \times 10^{21} < \bar{c}_2 = 1.41 \times 10^{21}, \\ \tilde{c}_3 &= 1.64 \times 10^{21} < \bar{c}_3 = 1.67 \times 10^{21}. \end{aligned}$$

Далее приведем решения стандартных краевых задач с граничными условиями I рода, соответствующих скачкам входного давления.

I этап. Краевая задача метода прорыва:

$$\begin{aligned} c_t &= Dc_{xx}, \quad 0 < x < \ell, \quad t > 0, \\ c(t, 0) &= \tilde{c}_1, \quad c(t, \ell) = 0, \quad t \geq 0, \\ c(0, x) &= 0, \quad x \in [0, \ell]. \end{aligned}$$

Решение в форме ряда Фурье:

$$\begin{aligned} c(t, x) &= \tilde{c}_1 (\ell - x)\ell^{-1} - \\ &- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\tilde{c}_1}{n\pi} \exp\left\{-\frac{n^2\pi^2 Dt}{\ell^2}\right\} \sin \frac{n\pi x}{\ell}. \end{aligned}$$

Проникающий поток:

$$\begin{aligned} J_1(t) &= -Dc_x|_{\ell} = D\tilde{c}_1\ell^{-1} \times \\ &\times \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp\left\{-\frac{n^2\pi^2 Dt}{\ell^2}\right\}\right]. \end{aligned}$$

С вычислительной точки зрения целесообразно перейти к безразмерному времени $t' = Dt/\ell^2$, ориентированному на характерное время диффузии ℓ^2/D . При малых $t \rightarrow 0$ возникает особенность при непосредственном использовании частичной суммы представления

$$f(t') = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp\{-n^2\pi^2 t'\}. \quad (11)$$

Приведем другое выражение для f , используя аппарат тэта-функций Якоби. Точнее, нас интересует функция

$$\theta_3(t, x) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\{-n^2\pi^2 t\} \cos(2n\pi x), \quad t > 0.$$

При $x = 0$ имеем другое представление [9]

$$\begin{aligned} \theta_3(t, 0) &= 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\{-n^2\pi^2 t\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \sum_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2}{t}\right\}. \quad (12) \end{aligned}$$

Ряд слева быстро сходится при больших значениях t , а ряд справа — при малых t (которые нас сейчас и интересуют). Если определить $\theta(t) = \sum \exp\{-\pi n^2 t\}$ ($n \in \mathbb{Z}$, $t > 0$), то получим соотношение $\theta(1/t) = \sqrt{t}\theta(t)$, или

$$\sqrt{t} \sum \exp\{-\pi n^2 t\} = \sum \exp\{-\pi n^2 t^{-1}\} \quad (n \in \mathbb{Z}),$$

известное как функциональное уравнение для тэта-функции [7]. После технических преобразований получаем

$$f(t') = \frac{2}{\sqrt{\pi t'}} \sum_{m=2n-1} \exp\left\{-\frac{m^2}{4t'}\right\} \quad (n \in \mathbb{N}). \quad (13)$$

Для полноты изложения приведем подробные выкладки, которые можно пропустить. Для разбиения на суммы с четными и нечетными номерами слагаемых удобно ввести обозначение $\sum' \equiv \sum_{1,3,5,\dots}$. Преобразования:

$$\begin{aligned} f(t') &= 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp\{-n^2 \pi^2 t'\} = \\ &= 1 - 2 \sum' \exp\{-n^2 \pi^2 t'\} + \\ &+ 2 \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \exp\{-4n^2 \pi^2 t'\}}_{\text{четн.}} \stackrel{(12)}{=} \\ &\stackrel{(12)}{=} -2 \sum' \dots + \frac{1}{2\sqrt{\pi t'}} \sum_{-n}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2}{4t'}\right\} = \\ &= -2 \sum' \dots + \frac{1}{2\sqrt{\pi t'}} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2}{4t'}\right\}\right] = \\ &= -2 \sum' \dots + \frac{1}{2\sqrt{\pi t'}} \left[2 \sum' \exp\left\{-\frac{n^2}{4t'}\right\} + \right. \\ &\left. + 1 + 2 \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n^2}{t'}\right\}}_{\text{четн.}}\right] \stackrel{(12)}{=} \\ &\stackrel{(12)}{=} \frac{1}{\sqrt{\pi t'}} \sum' \exp\left\{-\frac{n^2}{4t'}\right\} + \\ &+ \frac{1}{2\sqrt{\pi t'}} \left[\sqrt{\pi t'} \left\{1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\{-n^2 \pi^2 t'\}\right\}\right] - \\ &- 2 \sum' \exp\{-n^2 \pi^2 t'\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi t'}} \sum' \exp\left\{-\frac{n^2}{4t'}\right\} + \frac{1}{2} f(t') \Rightarrow \\ &\Rightarrow f(t') = \frac{2}{\sqrt{\pi t'}} \sum' \exp\left\{-\frac{n^2}{4t'}\right\}. \end{aligned}$$

Для рассматриваемой прикладной задачи с достаточной точностью можно положить (используя лишь частичные суммы из пяти слагаемых):

1. $t' \in [0, 10^{-4}] \Rightarrow f(t') \equiv 0$;
2. $t' \in [10^{-4}, 10^{-1}] \Rightarrow f(t') : (13)$;
3. $t' \in [10^{-1}, 1] \Rightarrow f(t') : (11)$;
4. $t' \geq 1 \Rightarrow f(t') = 1$.

Функция $f(t')$ имеет S -образный вид кривой насыщения (см. врезку на рисунке 1).

Окончание I этапа: $c(t_*, x) = \tilde{c}_1(\ell - x)\ell^{-1}$.

II этап ($t_* \rightarrow t_0 = 0$, начало отсчета t):

$$\begin{aligned} c_t &= Dc_{xx}, \quad 0 < x < \ell, \quad t > 0, \\ c(t, 0) &= \tilde{c}_2, \quad c(t, \ell) = 0, \quad t \geq 0, \\ c(0, x) &= \tilde{c}_1(\ell - x)\ell^{-1}, \quad x \in [0, \ell]. \end{aligned}$$

Решение: $c(t, x) = \tilde{c}_2(\ell - x)\ell^{-1} -$

$$-2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{c}_2 - \tilde{c}_1}{n\pi} \exp\left\{-\frac{n^2 \pi^2 D t}{\ell^2}\right\} \sin \frac{n\pi x}{\ell}.$$

Проникающий поток:

$$\begin{aligned} J_2(t) &= D\ell^{-1} [\tilde{c}_1 + (\tilde{c}_2 - \tilde{c}_1) \times \\ &\times \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp\left\{-\frac{n^2 \pi^2 D t}{\ell^2}\right\}\right]]. \end{aligned}$$

Окончание II этапа: $c(t_*, x) = \tilde{c}_2(\ell - x)\ell^{-1}$.

III этап. Формулы аналогичны с циклической заменой $\tilde{c}_1 \rightarrow \tilde{c}_2$, $\tilde{c}_2 \rightarrow \tilde{c}_3$.

Результат склейки этапов в единый «экспериментальный» график проникающего потока $J(t)$ (условно $t = (t_1, t_1^* + t_2, t_2^* + t_3)$, $J = (J_1, J_2, J_3)$) показан на рисунке 1.

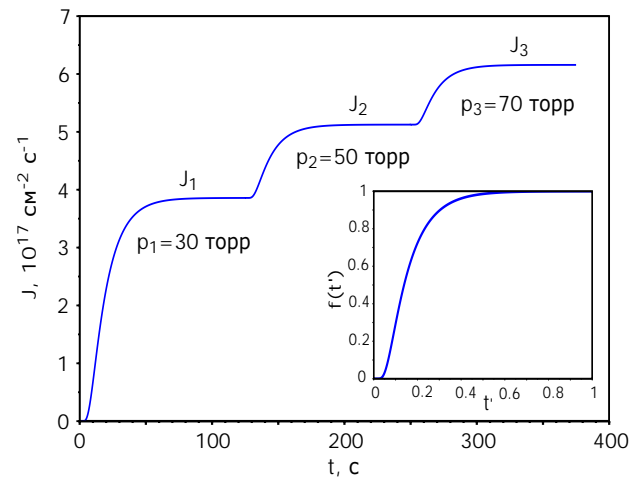


Рис. 1. Установление стационарных потоков

Пересчет давления в поток

В реальном эксперименте измеряется не проникающий поток, а давление газа в выходном объеме $V = V_{\text{out}}$. Поэтому приведем соответствующую формулу пересчета. Обозначим ν скорость откачки вакуумной системы ($[\nu] = \text{м}^3/\text{с}$). За основу примем уравнение состояния идеального газа: $pV = NkT$. Здесь $[p] = \text{Па}$, $[V] = \text{м}^3$, N — число частиц (молекул H_2), k — константа Больцмана. Дифференцируя по t , получаем $\dot{p}V = \dot{N}kT$.

Подсчитаем баланс частиц за время Δt :

$$\Delta N = \frac{J_\ell}{2} S \Delta t - \nu \Delta t \frac{N}{V}, \quad J_\ell = -SD \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_\ell,$$

где $[N/V] = 1_{\text{H}_2}/\text{м}^3$ — концентрация, $[J_\ell] = 1_{\text{H}}/(\text{м}^2 \text{с})$. Множитель $1/2$ появился из-за того, что диффузионный поток атомарный, а частицей в объеме V является молекула H_2 .

Поделим уравнение материального баланса на Δt и устремим $\Delta t \rightarrow 0$. В итоге:

$$\begin{aligned} \dot{N}(t) &= \frac{J_\ell(t)}{2} S - \frac{\nu}{V} N(t) \Rightarrow \\ \Rightarrow \dot{p}V &= \dot{N}kT = kT \left[\frac{J_\ell}{2} S - \frac{\nu}{V} N \right] = \\ &= kTS \frac{J_\ell(t)}{2} - \frac{\nu}{V} \underbrace{kTN(t)}_{p(t)V} \Rightarrow \\ \Rightarrow \dot{p}(t) &= \frac{kTS}{2V} J_\ell(t) - \frac{\nu}{V} p(t), \quad p(0) = 0. \end{aligned}$$

Обозначая $\theta_1 = kTS/(2V)$, $\theta_0 = V/\nu$, получаем $\dot{p} = \theta_1 J_\ell - p/\theta_0$ ($p_0 = 0$), откуда

$$p(t) = \theta_1 \int_0^t \exp \left\{ \frac{\tau - t}{\theta_0} \right\} J_\ell(\tau) d\tau.$$

Формула пересчета давления в поток:

$$J_\ell(t) = \frac{2V}{kTS} \dot{p}(t) + \frac{2\nu}{kTS} p(t).$$

Измеряемая функция $p(t)$ зашумлена, поэтому сначала применяем процедуру сглаживания, а потом вычисляем производную $\dot{p}(t)$. Заметим, что при достаточно мощной откачке и относительно медленной проницаемости первое слагаемое играет роль малой поправки к приближению $J_\ell \approx 2\nu p(t)/(kTS)$. По мере асимптотического выхода на стационар $\dot{p} \rightarrow 0 \Rightarrow \bar{J} = 2\nu \bar{p}/(kTS)$.

Для вычисления времени запаздывания (см. далее) необходимо интегрирование:

$$\int_0^t J_\ell(\tau) d\tau = \frac{2V}{kTS} p(t) + \frac{2\nu}{kTS} \int_0^t p(\tau) d\tau,$$

что не требует предварительной аппроксимации $\dot{p}(t)$. Составной формулы Симпсона достаточно. Следует не забыть, что в текущем пункте используются единицы измерения $[kT] = \text{Дж} = \text{Н} \cdot \text{м}$, $[L] = \text{м}$, $[p] = \text{Па} = \text{Н}/\text{м}^2$ ($\text{Па} \approx 7.5 \times 10^{-3} \text{ торр}$), $[J] = 1_{\text{H}}/(\text{м}^2 \text{с})$. В дальнейшем изложении возвращаемся к принятым в данной статье единицам измерения.

Краевая задача водородопроницаемости

По достижении стационара в методе прорыва прекращаем откачку на выходе и поддержание постоянного давления на входе. Комплексный эксперимент переходит в стадию «сообщающихся сосудов»: давление на входе падает, на выходе растет (измеряются $p_{0,\ell}(t)$). Пока речь идет о прямой задаче моделирования давлений водорода в объемах $V_{\text{in,out}}$.

Дополнительные входные данные: $S = 0.5 \text{ см}^2$, $V_{\text{in}} = 1500 \text{ см}^3$, $V_{\text{out}} = 2200 \text{ см}^3$, $p_0(0) = \bar{p}_0 = \bar{p}_3$, $\bar{c} = \Gamma \sqrt{\bar{p}_0}$. Здесь ориентируемся на экспериментальные условия и данные по сплаву $\text{V}_{85}\text{Ni}_{15}$, конкретизированные в [5, 11].

Решаем краевую задачу водородопроницаемости, ловушками пренебрегаем ($a = 0$):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D(T) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad c(0, x) = (\ell - x) \bar{c}_3 \ell^{-1},$$

$$2s(T)\mu(T)p_{0,\ell}(t) - b(T)c_{0,\ell}^2(t) = \mp D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0,\ell},$$

$$\frac{dQ_{\text{in,out}}}{dt} = -[2s\mu p_{0,\ell}(t) - bc_{0,\ell}^2(t)]S,$$

$$Q_{\text{in,out}} = \alpha p_{0,\ell}(t) V_{\text{in,out}} T^{-1}.$$

Уточним, что в зависимостях D , b , s , μ от T берется температура мембраны, а в выражениях для $Q_{\text{in,out}}$ — температура газа в емкостях (учитываем поправку к комнатной температуре вследствие нагрева диффузионной ячейки). Модельные кривые давлений молекулярного водорода представлены на рисунке 2.

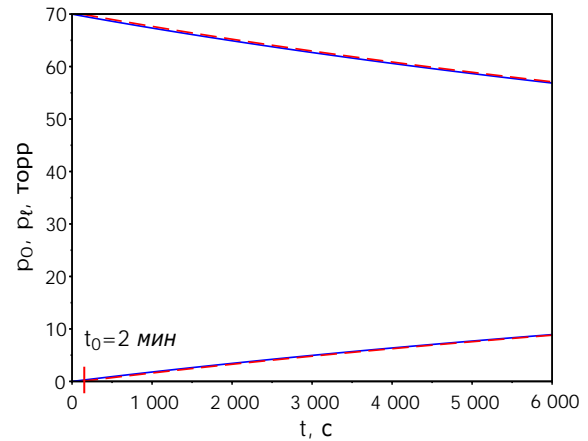


Рис. 2. Динамика давлений $p_{0,\ell}(t)$

Достаточно стандартных пакетов прикладных программ, если вместо «полной» модели использовать систему ОДУ (9), (10) (в выражения $M_{0,\ell}$ подставляем значения температуры водорода в объемах $V_{in,out}$). Для этого следует пропустить начальное время t_0 в пределах нескольких минут, пока установится квазистационарный режим (не квазиравновесный). Затем применяем изложенный выше алгоритм для модели быстрой проницаемости. На рисунке 2 отражено, что существенной дополнительной ошибки численного моделирования не возникает (визуально кривые совпадают). В принципе, дождавшись равномерного насыщения образца (выравнивания давлений), можно перейти к ТДС-эксперименту. В данной статье ограничимся «склеивкой» только двух типов экспериментов и ссылками [24–26] (ТДС-модели для цилиндрического образца и порошка представлены в публикациях [4, 27, 29]).

Для тестирования излагаемого далее алгоритма решения обратной задачи параметрической идентификации численно генерировались модельные кривые. Затем порождающие их параметры «забывались».

ОБЩАЯ МЕТОДИКА ИДЕНТИФИКАЦИИ

Определение времени запаздывания

Для полноты изложения кратко опишем метод оценки коэффициента диффузии, предложенный Дайнесом–Бэррером. Асимптотически график потока $J_1(t)$ выходит на стационар $\bar{J}_1 = D\tilde{c}_1/\ell$. Соответственно, $Q(t) = \int_0^t J(\tau) d\tau \approx \bar{J}_1[t - \ell^2/(6D)]$ ($t \geq t_* = t_1^*$). Пересечение асимптоты с осью t дает так называемое время запаздывания $\tau_0 = \ell^2/(6D)$, по которому оценивается коэффициент диффузии. Аналитически

$$\tau_0 \approx t_* - \int_0^{t_*} J_1(\tau) \bar{J}_1^{-1} d\tau, \quad J_1 \approx \bar{J}_1, \quad t \geq t_*.$$

Обратим внимание на то, что под интегралом — относительная величина, не требующая абсолютных значений проникающего потока в каких-либо единицах измерения ($\bar{J}_1 = \sup J_1(t)$). Кроме того, значение τ_0 не зависит от \tilde{c}_1 . Обычно считается, что на входе быстро устанавливается практически равновесная концентрация $\tilde{c}_1 = \Gamma\sqrt{\bar{p}_1}$, что позволяет по соответствующему значению $\bar{J}_1 = D\tilde{c}_1/\ell$ дополнительно оценить растворимость $\Gamma = \sqrt{2s\mu/b}$ и проницаемость $\Phi = D\Gamma$. В данной работе считаем такое предположение слишком оптимистическим. Ослабим его с целью повышения точности дальнейших оценок. Полагаем,

что по условиям эксперимента можно считать быстрым установление стационарной входной концентрации $c_0(t) \approx \tilde{c}_1 < \bar{c}_1$ ($t \geq \varepsilon, \varepsilon \ll 1$) при соблюдении $c_\ell(t) \approx 0$. Само значение \tilde{c}_1 еще предстоит уточнить. Таким образом, на данном этапе достоверной считаем только оценку коэффициента диффузии D .

При новом отсчете времени ($t_* \rightarrow t_0 = 0$), интегрируя выражение $J_2(t)$, получаем

$$\int_0^t [J_2(\tau) - \bar{J}_1] d\tau \approx [\bar{J}_2 - \bar{J}_1] \cdot [t - \ell^2(6D)^{-1}],$$

где $\bar{J}_i = D\tilde{c}_i/\ell$, $t \geq t_* = t_2^*$. Формально, меняя не только начальное время, но и уровень отсчета потока (превышение значения \bar{J}_1), получаем те же выражения для времени запаздывания и оценки D . Дополнительной информации (об искомым поверхностных параметрах b, s) нет, но тройной прорыв позволяет усредненно уточнить D . Для модельного численного эксперимента $\tau_{01} \approx \tau_{02} \approx \tau_{03} \approx 20.82$ с.

Изотерма. Начальные приближения b, s

В экспериментальной практике часто строят и анализируют изотерму — график зависимости стационарного проникающего потока \bar{J} от входного давления \bar{p} при вакуумной откачке на выходе. Если ориентироваться на закон Сивертса и (квази)равновесную концентрацию $\tilde{c} = \Gamma\sqrt{\bar{p}}$ на входе (соответственно $\bar{J} = D\tilde{c}/\ell$), то естественно строить график $\bar{J} = \bar{J}(\sqrt{\bar{p}})$.

Проанализируем уравнение стационара:

$$2s\mu\bar{p} - b\tilde{c}^2 = \bar{J} = D\tilde{c}\ell^{-1} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \tilde{c} = a[-1 + \sqrt{1 + a^{-2}\Gamma^2\bar{p}}], \quad a \equiv D(2\ell b)^{-1},$$

$$\bar{J} = D\tilde{c}\ell^{-1} = D\ell^{-1}a[-1 + \sqrt{1 + a^{-2}\Gamma^2\bar{p}}].$$

Асимптотический анализ показывает, что зависимость $\bar{J}(\sqrt{\bar{p}})$ имеет вид параболы ($\bar{J} \propto \bar{p}$) при малых давлениях напуска \bar{p} :

$$a^{-2}\Gamma^2\bar{p} \equiv x^2 \quad (x \propto \sqrt{\bar{p}}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \tilde{c} = a[-1 + \sqrt{1 + x^2}] = a[0.5x^2 + \dots]$$

и вид прямой при относительно больших \bar{p} :

$$a^{-2}\Gamma^2\bar{p} \gg 1 \Rightarrow \bar{J} = -D^2(2\ell^2b)^{-1} + D\Gamma\ell^{-1}\sqrt{\bar{p}}.$$

По прямолинейному участку изотермы находим $D\Gamma/\ell$ (наклон) и, зная оценку D , определяем начальное приближение коэффициента растворимости Γ . По пересечению прямой с осью ординат находим b . Зная значения $\Gamma = \sqrt{2s\mu/b}$ и b , вычисляем s и $\Phi = D\Gamma$.

Графическая иллюстрация (используя минимальный набор вычисленных модельных значений $\bar{J}_{1,2,3}$) представлена на рисунке 3.

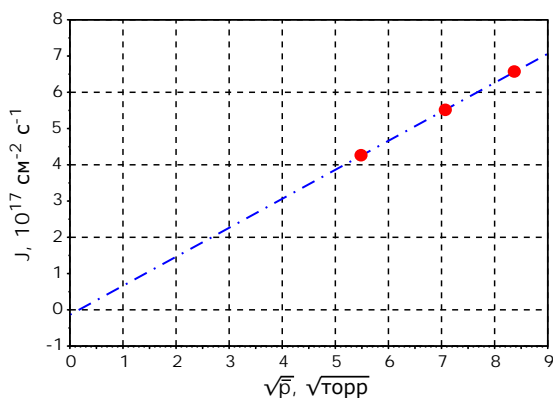


Рис. 3. Экстраполяция изотермы стационара \bar{J}

Отметим, что найденные начальные приближения хорошо согласуются с исходными «забытыми» параметрами:

	«истинное» зн-е	приблиз. зн-е
D	2.00×10^{-5}	2.0012×10^{-5}
b	5.72×10^{-24}	5.8371×10^{-24}
s	1.20×10^{-4}	1.2221×10^{-4}
Γ	2.00×10^{20}	1.9984×10^{20}
Φ	4.00×10^{15}	3.9993×10^{15}

Финальная стадия алгоритма параметрической идентификации

Приведенная таблица отражает лишь вычислительные погрешности при решении прямой и обратной задач. Реальные экспериментальные данные зашумлены. Алгоритм идентификации использует лишь интегральные операторы обработки измерений, что нацелено на определенную помехоустойчивость. В методе прорыва погрешности измерений значительны, требуются данные о проникающем потоке (а это связано с уточнением характеристик вакуумной системы). Модель скачка концентрации растворенного водорода на входе также не отличается высокой точностью. Приходим к выводу, что стадия «сообщающихся сосудов», когда измеряются давления молекулярного водорода в течение длительного времени, характеризуется значительно более высокой точностью измерений.

Поэтому первую стадию комплексного эксперимента воспринимаем как этап начальной оценки коэффициентов D , b , s . Принципиальным моментом является единственность решения обратной задачи, поскольку данные, полученные на тонких мембранах, обобщаются (пересчитываются) на реальные конструкции.

Окончательная «доводка» результата осуществляется локальным варьированием предварительных значений D , b , s уже по модели быстрой водородопроницаемости (система ОДУ). Обычно довольствуются приемлемым визуальным совпадением экспериментальных и модельных графиков давлений. Теоретический анализ сопоставимости уровня погрешностей измерений (а известны лишь примерные оценки) и точности решения обратной задачи параметрической идентификации (математически трудная задача) практически нереален и не является первостепенно актуальным.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 15-01-00744).

ЛИТЕРАТУРА

1. Алимов В. Н., Буснюк А. О., Ноткин М. Е., Лившиц А. И. Перенос водорода металлами 5-й группы: достижение максимальной плотности потока сквозь ванадиевую мембрану // Письма в ЖТФ. 2014. Т. 40, вып. 5. С. 88–94.
2. Взаимодействие водорода с металлами / Ред. А. П. Захаров. М.: Наука, 1987. 296 с.
3. Водород в металлах / Ред. Г. Алефельд, И. Фёлькль. М.: Мир, 1981. Т. 1, 506 с.; т. 2, 430 с.
4. Заика Ю. В., Родченкова Н. И. Диффузионный пик ТДС-спектра дегидрирования: краевая задача с подвижными границами // Математическое моделирование. 2008. Т. 19, № 11. С. 67–79.
5. Заика Ю. В., Родченкова Н. И., Сидоров Н. И. Моделирование водородопроницаемости сплавов для мембранного газоразделения // Компьютерные исследования и моделирование. 2016. Т. 8, № 1. С. 121–135.
6. Изотопы водорода. Фундаментальные и прикладные исследования / Ред. А. А. Юхимчук. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. 697 с.
7. Ленг С. Эллиптические функции. М.: Наука, 1984. 312 с.
8. Писарев А. А., Цветков И. В., Маренков Е. Д., Ярко С. С. Проницаемость водорода через металлы. М.: МИФИ, 2008. 144 с.
9. Уиттекер Э. Т., Ватсон Дж. Н. Курс современного анализа, часть 2. М.: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1963. 516 с.
10. Черданцев Ю. П., Чернов И. П., Тюрин Ю. И. Методы исследования систем металл–водород. Томск: ТПУ, 2008. 286 с.
11. Dolan M. D. Non-Pd BCC alloy membranes for industrial hydrogen separation // Journal of Membrane Science. 2010. Vol. 362, iss. 1–2. P. 12–28. doi: 10.1016/j.memsci.2010.06.068

12. *Evard E. A., Gabis I. E., Yartys V. A.* Kinetics of hydrogen evolution from MgH₂: experimental studies, mechanism and modelling // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2010. Vol. 35, iss. 17. P. 9060–9069. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.05.092
13. *Gabis I. E.* The method of concentration pulses for studying hydrogen transport in solids // *Technical Physics*. 1999. Vol. 44, iss. 1. P. 90–94. doi: 10.1134/1.1259257
14. *Handbook of hydrogen storage: new materials for future energy storage* / Ed. M. Hirscher. Wiley–VCH, 2010. 353 p.
15. *Indeitsev D. A., Semenov B. N.* About a model of structure-phase transformations under hydrogen influence // *Acta Mechanica*. 2008. Vol. 195, iss. 1. P. 295–304. doi: 10.1007/s00707-007-0568-z
16. *Kojakhmetov S., Sidorov N., Piven V., Sipatov I., Gabis I., Arinov B.* Alloys based on Group 5 metals for hydrogen purification membranes // *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. Vol. 645, supp. 1. P. S36–S40. doi: 10.1016/j.jallcom.2015.01.242
17. *Lototskiy M. V., Yartys V. A., Pollet B. G., Bowman R. C. Jr.* Metal hydride hydrogen compressors: a review // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2014. Vol. 39, iss. 11. P. 5818–5851. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.01.158
18. *Song G., Dolan M. D., Kellam M. E., Liang D., Zambelli S.* V-Ni-Ti multi-phase alloy membranes for hydrogen purification // *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. Vol. 509, iss. 38. P. 9322–9328. doi: 10.1016/j.jallcom.2011.07.020
19. *Terrani K. A., Balooch M., Wongsawaeng D., Jaiyen S., Olander D. R.* The kinetics of hydrogen desorption from and adsorption on zirconium hydride // *Journal of Nuclear Materials*. 2010. Vol. 397, iss. 1–3. P. 61–68. doi: 10.1016/j.jnucmat.2009.12.008
20. *The hydrogen economy* / Eds M. Ball, M. Wietschel. Cambridge Univ. Press, 2009. 646 p.
21. *Varin R. A., Czujko T., Wronski Z. S.* Nanomaterials for solid state hydrogen storage. Springer, New York, 2009. 338 p. doi: 10.1007/978-0-387-77712-2.
22. *Voyt A., Sidorov N., Sipatov I., Dobrotvorskiy M., Piven V., Gabis I.* Hydrogen solubility in V₈₅Ni₁₅ alloy // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42, iss. 5. P. 3058–3063. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.033
23. *Zaika Yu. V., Bormatova E. P.* Parametric identification of a hydrogen permeability model by delay times and conjugate equations // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2011. Vol. 36, iss. 1. P. 1295–1305. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.07.099
24. *Zaika Yu. V., Kostikova E. K.* Computer simulation of hydrogen thermal desorption by ODE-approximation // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42, iss. 1. P. 405–415. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.104
25. *Zaika Yu. V., Kostikova E. K.* Computer simulation of hydrogen thermodesorption // *Advances in Materials Science and Applications*. World Acad. Publ. 2014. Vol. 3, iss. 3. P. 120–129. doi: 10.5963/AMSA0303003
26. *Zaika Yu. V., Kostikova E. K.* Determination of effective recombination coefficient by thermodesorption method // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2014. Vol. 39, iss. 28. P. 15819–15826. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.07.117
27. *Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I.* Boundary-value problem with moving bounds and dynamic boundary conditions: diffusion peak of TDS-spectrum of dehydrating // *Applied Mathematical Modelling*. 2009. Vol. 33, iss. 10. P. 3776–3791. doi: 10.1016/j.apm.2008.12.018
28. *Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I.* Hydrogen-solid boundary-value problems with dynamical conditions on surface // *Mathematical Modelling*. Nova Sci. Publishers. 2013. P. 269–302.
29. *Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I.* Numerical modelling of hydrogen desorption from cylindrical surface // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2011. Vol. 36, iss. 1. P. 1239–1247. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.06.121
30. *Zhang Y., Maeda R., Komaki M., Nishimura C.* Hydrogen permeation and diffusion of metallic composite membranes // *Journal of Membrane Science*. 2006. Vol. 269, iss. 1–2. P. 60–65. doi: 10.1016/j.memsci.2005.06.018

Поступила в редакцию 05.05.2017

REFERENCES

1. *Alimov V. N., Busnyuk A. O., Notkin M. E., Livshits A. I.* Hydrogen transport by group 5 metals: Achieving the maximal flux density through a vanadium membrane. *Technical Physics Letters*. 2014. Vol. 40, iss. 3. P. 228–230. doi: 10.1134/S1063785014030031

2. *Vzaimodeistvie vodoroda s metallami* [Interactions of hydrogen with metals]. Ed. A. P. Zakharov. Moscow: Nauka, 1987. 296 p.

3. *Vodorod v metallakh* [Hydrogen in metals]. Eds G. Alefel'd, J. Fel'kl'. Moscow: Mir, 1981. Vol. 1, 2. 506, 403 p.

4. *Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I.* Diffuzionnyi pik TDS-spektra degidrirovaniya: kraevaya zadacha s podvizhnymi granitsami [Diffusion

- peak of TDS-spectrum of dehydrogenation: a boundary-value problem with moving bounds]. *Matematicheskoe modelirovanie [Mathematical Models and Computer Simulations]*. 2008. Vol. 19, iss. 11. P. 67–79.
5. Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I., Sidorov N. I. Modelirovanie vodorodopronitsaemosti splavov dlya membrannogo gazorazdeleniya [Modeling of H_2 -permeability of alloys for gas separation membranes]. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie [Computer Research and Modeling]*. 2016. Vol. 8, iss. 1. P. 121–135.
 6. *Izotopy vodoroda. Fundamental'nye i prikladnye issledovaniya [Hydrogen isotopes. Fundamental and applied studies]*. Ed. A. A. Yukhimchuk. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2009.
 7. Lang S. *Elliptic functions*. Addison-Wesley Publishing, 1973. 326 p.
 8. Pisarev A. A., Tsvetkov I. V., Marenkov E. D., Yarko S. S. Pronitsaemost' vodoroda cherez metally [Hydrogen permeability through metals]. Moscow: MIFI, 2008. 144 p.
 9. Whittaker E. T., Watson G. N. *A Course of Modern Analysis*. Cambridge Univ. Press, 1996. 612 p.
 10. Cherdantsev Yu. P., Chernov I. P., Tyurin Yu. I. *Metody issledovaniya sistem metall-vodorod [Methods of studying metal-hydrogen systems]*. Tomsk: TPU, 2008. 286 p.
 11. Dolan M. D. Non-Pd BCC alloy membranes for industrial hydrogen separation. *Journal of Membrane Science*. 2010. Vol. 362, iss. 1–2. P. 12–28. doi: 10.1016/j.memsci.2010.06.068
 12. Evard E. A., Gabis I. E., Yartys V. A. Kinetics of hydrogen evolution from MgH₂: experimental studies, mechanism and modelling. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2010. Vol. 35, iss. 17. P. 9060–9069. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.05.092
 13. Gabis I. E. The method of concentration pulses for studying hydrogen transport in solids. *Technical Physics*. 1999. Vol. 44, iss. 1. P. 90–94. doi: 10.1134/1.1259257
 14. *Handbook of hydrogen storage: new materials for future energy storage*. Ed. M. Hirscher. Wiley–VCH, 2010. 353 p.
 15. Indeitsev D. A., Semenov B. N. About a model of structure-phase transformations under hydrogen influence. *Acta Mechanica*. 2008. Vol. 195, iss. 1. P. 295–304. doi: 10.1007/s00707-007-0568-z
 16. Kojakhmetov S., Sidorov N., Piven V., Sipatov I., Gabis I., Arinov B. Alloys based on Group 5 metals for hydrogen purification membranes. *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. Vol. 645, supp. 1. P. S36–S40. doi: 10.1016/j.jallcom.2015.01.242
 17. Lototskiy M. V., Yartys V. A., Pollet B. G., Bowman R. C. Jr. Metal hydride hydrogen compressors: a review. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2014. Vol. 39, iss. 11. P. 5818–5851. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.01.158
 18. Song G., Dolan M. D., Kellam M. E., Liang D., Zambelli S. V-Ni-Ti multi-phase alloy membranes for hydrogen purification. *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. Vol. 509, iss. 38. P. 9322–9328. doi: 10.1016/j.jallcom.2011.07.020
 19. Terrani K. A., Balooch M., Wongsawaeng D., Jaiyen S., Olander D. R. The kinetics of hydrogen desorption from and adsorption on zirconium hydride. *Journal of Nuclear Materials*. 2010. Vol. 397, iss. 1–3. P. 61–68. doi: 10.1016/j.jnucmat.2009.12.008
 20. *The hydrogen economy*. Eds M. Ball, M. Wietschel. Cambridge Univ. Press, 2009. 646 p.
 21. Varin R. A., Czujko T., Wronski Z. S. *Nanomaterials for solid state hydrogen storage*. Springer, New York, 2009. 338 p. doi: 10.1007/978-0-387-77712-2
 22. Voyt A., Sidorov N., Sipatov I., Dobrotvorskii M., Piven V., Gabis I. Hydrogen solubility in V₈₅Ni₁₅ alloy. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42, iss. 5. P. 3058–3063. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.033
 23. Zaika Yu. V., Bormatova E. P. Parametric identification of a hydrogen permeability model by delay times and conjugate equations. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2011. Vol. 36, iss. 1. P. 1295–1305. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.07.099
 24. Zaika Yu. V., Kostikova E. K. Computer simulation of hydrogen thermal desorption by ODE-approximation. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42, iss. 1. P. 405–415. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.104
 25. Zaika Yu. V., Kostikova E. K. Computer simulation of hydrogen thermodesorption. *Advances in Materials Science and Applications. World Acad. Publ.* 2014. Vol. 3, iss. 3. P. 120–129. doi: 10.5963/AMSA0303003
 26. Zaika Yu. V., Kostikova E. K. Determination of effective recombination coefficient by thermodesorption method. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2014. Vol. 39, iss. 28. P. 15819–15826. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.07.117
 27. Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I. Boundary-value problem with moving bounds and dynamic boundary conditions: Diffusion peak of TDS-spectrum of dehydriding. *Applied Mathematical Modelling*. 2009. Vol. 33, iss. 10. P. 3776–3791. doi: 10.1016/j.apm.2008.12.018.
 28. Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I. Hydrogen-solid boundary-value problems with dynamical conditions on surface. *Mathematical Modelling. Nova Sci. Publishers*. 2013. P. 269–302.

29. *Zaika Yu. V., Rodchenkova N. I.* Numerical modelling of hydrogen desorption from cylindrical surface. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2011. Vol. 36, iss. 1. P. 1239–1247. doi: 10.1016/j.ijhydene.2010.06.121

30. *Zhang Y., Maeda R., Komaki M., Nishimura C.* Hydrogen permeation and diffusion of metallic composite membranes. *Journal of Membrane Science*. 2006. Vol. 269, iss. 1–2. P. 60–65. doi: 10.1016/j.memsci.2005.06.018

Received May 5, 2017

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

Заика Юрий Васильевич

рук. лаб. моделирования природно-технических систем, д. ф.-м. н.
Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: zaika@krc.karelia.ru
тел.: (8142) 780059

Родченкова Наталья Ивановна

старший научный сотрудник, к. ф.-м. н.
Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: nirodchenkova@krc.karelia.ru
тел.: (8142) 766312

CONTRIBUTORS:

Zaika, Yury

Institute of Applied Mathematical Research,
Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia,
Russia
e-mail: zaika@krc.karelia.ru
tel.: (8142) 780059

Rodchenkova, Natalia

Institute of Applied Mathematical Research,
Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk, Karelia,
Russia
e-mail: nirodchenkova@krc.karelia.ru
tel.: (8142) 766312

УДК 519.977

МОДЕЛЬ ПОЛТЕРОВИЧА – ХЕНКИНА С АМОРТИЗАЦИЕЙ

А. Н. Кириллов, И. В. Данилова

*Институт прикладных математических исследований
Карельского научного центра РАН, Петрозаводск*

Проводится качественное исследование модели Полтеровича – Хенкина, которая является математической формализацией шумпетеровской концепции экономической динамики. Рассмотрены три уровня технологического развития предприятий с учетом амортизации. Доказана глобальная асимптотическая устойчивость положения равновесия. Найдены инвариантные множества.

Ключевые слова: модель Полтеровича – Хенкина; устойчивость; инвариантное множество.

A. N. Kirillov, I. V. Danilova. POLTEROVICH – HENKIN MODEL WITH DEPRECIATION

The qualitative analysis of the Polterovich – Henkin model, a mathematical formalization of the Shumpeterian concept of economical dynamics, was carried out. Three levels of technological development of an enterprise are considered taking into account depreciation. The global asymptotic stability of equilibrium is proved. The invariant sets were found.

Key words: Polterovich – Henkin model; stability; invariant set.

ВВЕДЕНИЕ

В работе [5] австрийский экономист Дж. Шумпетер (1883–1950) разработал теорию экономического развития, основанную на концепции распространения новых технологий имитационным и инновационным путем. Теория Шумпетера активно развивается в различных направлениях до сих пор. Математический формализм этой теории был предложен в работе В. М. Полтеровича, Г. М. Хенкина [3], которые построили модель, описывающую динамику распределения предприятий отрасли по уровням технологического развития. Их модель ведет свое происхождение от известного в гидродинамике уравнения И. Бюргерса.

Дадим краткое описание модели Полтеровича – Хенкина. Рассмотрим производственную систему (объединение предприятий, отрасль), состоящую из конечного числа предприятий, упорядоченных по уровням эффективности с номерами $1, 2, \dots, N$. В качестве показателя уровня эффективности можно взять, например, рентабельность [1]. Предполагается, что с течением времени предприятие может переходить с уровня n на следующий, более высокий, уровень $n + 1$.

Пусть $F_n = F_n(t)$ – доля предприятий, находящихся в момент времени t на уровнях с номерами, не превышающими $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, $t \in [0, \infty)$, $F_n(t) \in [0, 1]$. Последовательность $(F_1(t), \dots, F_N(t))$ описывает динамику распределения предприятий по уровням эффектив-

ности. Очевидно, что $y_n(t) = F_n(t) - F_{n-1}(t)$ – доля предприятий, находящихся в момент времени t на уровне n . Предполагается, что доля предприятий, переходящих с уровня n на уровень $n + 1$ за счет инноваций, пропорциональна доле предприятий, находящихся на уровне n , т. е. равна $\alpha y_n(t) = \alpha(F_n(t) - F_{n-1}(t))$, где α – коэффициент интенсивности инновационного перехода, $\alpha > 0$. Далее, доля предприятий, переходящих с уровня n на уровень $n + 1$ за счет имитации, предполагается пропорциональной y_n и доле предприятий, находящихся на уровнях, более высоких, чем n , т. е. равна $\beta(1 - F_n(t))(F_n(t) - F_{n-1}(t))$, где β – коэффициент интенсивности имитационного перехода, $\beta > 0$. В итоге получаем модель динамики перехода предприятий с n -го на $n + 1$ -й уровень

$$\dot{F}_n = -\alpha(F_n - F_{n-1}) + \beta(1 - F_n)(F_n - F_{n-1}), \quad (1)$$

где $n = 1, \dots, N - 1$, $F_0(0) = 0$, $F_N(t) = 1$. Таким образом, первое слагаемое в правой части характеризует убывание F_n за счет инноваций, а второе – за счет имитаций. В модели (1) не учитывается возможность перехода предприятий на более низкие уровни, т. е. амортизация. Сами авторы модели отмечают, что в случае учета процесса амортизации не удастся получить аналитически решение системы (1), полученное ими в [3]. В работе [1] модель (1) применяется для описания процесса развития предприятий черной металлургии СССР за период с 1976 по 1988 гг. При этом учтена амортизация, но производится только численный анализ модели, показывающий удовлетворительный прогноз модельной динамики в сравнении с реальной динамикой. Следует отметить, что модификация модели Полтеровича – Хенкина, без амортизации, исследовалась в работе [4], где в частном случае было показано ее совпадение с цепочкой Ленгмюра.

В настоящей работе проводится качественное исследование модели Полтеровича – Хенкина с учетом амортизации, для трех уровней эффективности. Находятся инвариантные множества. Показано существование единственного положения равновесия соответствующей динамической системы. Доказана глобальная асимптотическая устойчивость положения равновесия.

МОДЕЛЬ С АМОРТИЗАЦИЕЙ НА ВТОРОМ УРОВНЕ

Пусть количество уровней технологического развития предприятий $N = 3$. Сначала рассмотрим модель с возможностью перехода с

третьего на второй уровень. Тогда динамика системы Полтеровича – Хенкина задается уравнениями

$$\begin{cases} \dot{F}_1 = -(\alpha + \beta(1 - F_1))F_1, \\ \dot{F}_2 = -(\alpha + \beta(1 - F_2))(F_2 - F_1) + \mu(1 - F_2). \end{cases} \quad (2)$$

При этом $F_3(t) = 1$, $\mu(1 - F_2)$ – слагаемое, задающее переход с уровня $n = 3$ на уровень $n = 2$, μ – коэффициент интенсивности процесса амортизации, $\mu > 0$.

Теорема 1. *Квадрат $\Pi = [0, 1] \times [0, 1]$ – инвариантное множество системы 2.*

Доказательство. Для доказательства определим положение векторов скорости системы в точках, принадлежащих сторонам квадрата Π . На стороне $F_1 = 0$, $F_2 \in [0, 1]$ вектор скорости направлен вдоль этой стороны, так как $\dot{F}_1(t) = 0$, на $F_1 = 1$, $F_2 \in [0, 1]$ имеем $\dot{F}_1(t) = -\alpha < 0$, при $F_2 \in (0, 1)$ $\dot{F}_2(t) = -(\alpha + \beta(1 - F_2))(F_2 - 1) + \mu(1 - F_2) > 0$, в точке $(1, 0)$ имеем $\dot{F}_2(t) = \alpha + \beta > 0$, в точке $(1, 1)$ имеем $\dot{F}_2(t) = 0$, т. е. траектории не покидают квадрат Π через сторону $F_1 = 1$, $F_2 \in [0, 1]$. Далее, при $F_2(t) = 0$ и $F_1 \in (0, 1)$ имеем $\dot{F}_2(t) = (\alpha + \beta)F_1 + \mu > 0$, т. е. траектории не покидают квадрат Π через эту сторону. Наконец, если $F_2(t) = 1$, $F_1 \in (0, 1)$, то $\dot{F}_2(t) = -\alpha(1 - F_1) < 0$, что окончательно доказывает утверждение об инвариантности Π . \square

Таким образом, квадрат Π является фазовым пространством системы (2) (см. рис. 1).

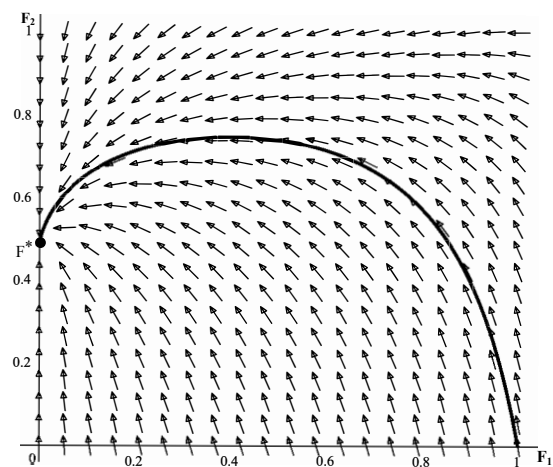


Рис. 1. Фазовый портрет системы 2

Найдем положения равновесия системы (2): $F^* = (F_1^*, F_2^*) \in \Pi$. Приравняв правые части к нулю, после несложных преобразований получаем единственное положение равновесия, принадлежащее Π :

$$F_1^* = 0, F_2^* = \frac{\alpha + \beta + \mu - \sqrt{(\alpha + \beta + \mu)^2 - 4\mu\beta}}{2\beta}.$$

Выясним характер устойчивости положения равновесия F^* . Линеаризуя систему (2) в окрестности точки F^* , находим собственные числа матрицы коэффициентов: $\lambda_1 = -(\alpha + \beta) < 0$, $\lambda_2 = \beta F_2^* < 0$. Таким образом, положение равновесия F^* асимптотически устойчиво. Можно показать, что F^* глобально асимптотически устойчиво, т. е. область асимптотической устойчивости – все фазовое пространство Π . Это можно сделать, используя рассуждения, представленные в следующем разделе для более сложного случая.

Экономическая интерпретация полученного результата: асимптотическое распределение предприятий по уровням эффективности имеет вид: $F_1^* = 0$, $F_2^* = \frac{\alpha + \beta + \mu - \sqrt{(\alpha + \beta + \mu)^2 - 4\mu\beta}}{2\beta}$, $F_3^* = 1$, т. е. с течением времени практически все предприятия перейдут на второй и третий уровень. В этом отличие от модели без амортизации, где все предприятия переходят на третий уровень (см. [3]).

МОДЕЛЬ С АМОРТИЗАЦИЕЙ НА ПЕРВОМ И ВТОРОМ УРОВНЯХ

Далее будем учитывать возможность перехода предприятий как с третьего уровня на второй, так и со второго – на первый. Для этого добавим в правую часть системы 2 слагаемое $\mu(F_2 - F_1)$. Получим систему

$$\begin{cases} \dot{F}_1 = -(\alpha + \beta(1 - F_1))F_1 + \\ + \mu(F_2 - F_1), \\ \dot{F}_2 = -(\alpha + \beta(1 - F_2))(F_2 - \\ - F_1) + \mu(1 - F_2). \end{cases} \quad (3)$$

Теорема 2. Квадрат $\Pi = [0, 1] \times [0, 1]$ – инвариантное множество системы (3).

Доказательство. Доказательство с небольшими очевидными изменениями повторяет доказательство теоремы 1. \square

Теорема 3. Система 3 имеет единственное положение равновесия $F^* = (F_1^*, F_2^*)$ в квадрате Π .

Доказательство. Положения равновесия системы 3 являются решениями системы алгебраических уравнений

$$\begin{cases} -(\alpha + \beta(1 - F_1))F_1 + \mu(F_2 - F_1) = 0 \\ -(\alpha + \beta(1 - F_2))(F_2 - F_1) + \mu(1 - F_2) = 0. \end{cases}$$

Для удобства введем обозначения: $x = F_1$, $y = F_2$. Из первого уравнения системы получаем: $y = \frac{(\alpha + \beta(1-x) + \mu)x}{\mu} = f_p(x)$ – парабола, пересекающая ось ox в точках $x_1 = 0$, $x_2 = 1 + \frac{\alpha + \mu}{\beta} > 1$. Вершина параболы – точка максимума функции $f_p(x)$ – имеет ординату $y = \frac{(\alpha + \beta + \mu)^2}{4\beta\mu} > 1$. При этом точка $(1, 1)$ лежит ниже параболы. Следовательно, парабола, проходящая через начало, пересекает верхнюю сторону квадрата Π : $x \in (0, 1)$, $y = 1$.

Из второго уравнения: $x = y - \frac{\mu}{\beta} + \frac{\alpha\mu}{\beta(\alpha + \beta(1-y))}$ – гипербола. Асимптоты гиперболы $y = 1 + \frac{\alpha}{\beta}$, $y = x + \frac{\mu}{\beta}$. Нетрудно показать, что одна из ветвей гиперболы лежит выше асимптоты $y = 1 + \frac{\alpha}{\beta}$ и, значит, не имеет общих точек с квадратом Π . Вторая ветвь проходит через точку $(1, 1)$ и пересекает сторону квадрата $x = 0$, $y \in (0, 1)$. В силу вышесказанного, парабола и гипербола имеют единственную общую точку (точку пересечения) в квадрате Π , а именно – положение равновесия F^* (см. рис. 2). \square

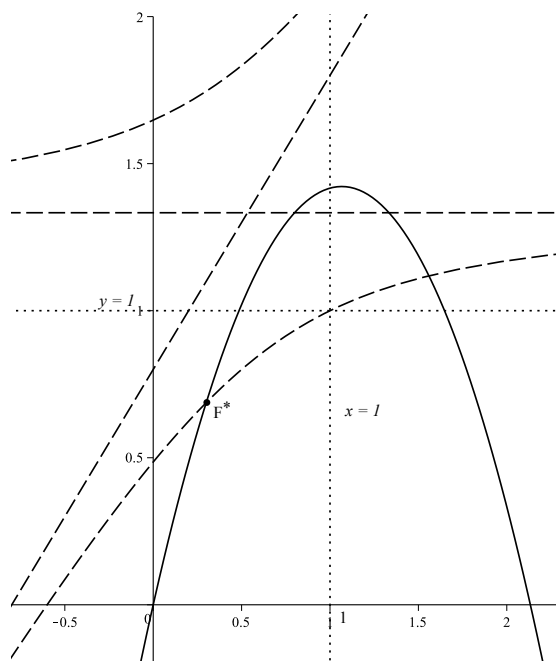


Рис. 2. Пересечение главных изоклин системы 3

Теорема 4. Положение равновесия (F_1^*, F_2^*) – глобально асимптотически устойчиво.

Доказательство. Разобьем квадрат Π на четыре области D_i , $i = 1, 2, 3, 4$, изоклинами $g(x, y) = 0$, $h(x, y) = 0$. Пусть

$$D_1 = \{(x, y) \in \Pi : g > 0, h > 0\},$$

$$D_2 = \{(x, y) \in \Pi : g < 0, h < 0\},$$

$$D_3 = \{(x, y) \in \Pi : g > 0, h < 0\},$$

$$D_4 = \{(x, y) \in \Pi : g < 0, h > 0\}.$$

Несложно показать, что области D_1, D_2 инвариантны: траектории пересекают границы этих областей снаружи внутрь. Это определяется знаками функций h и g в точках границ. Рассмотрим семейство прямых $l_1 : x + y = c_1$, $l_2 : x - y = c_2$, где $c_1 \in [0, 2]$, $c_2 \in [-1, -1]$. Определим направления пересечений траекториями системы 3 отрезков прямых l_1, l_2 , принадлежащих областям D_i . Обозначим через l_{11}, l_{12} отрезки прямых семейства l_1 , принадлежащие областям D_1, D_2 соответственно и через l_{23}, l_{24} – отрезки прямых семейства l_2 , принадлежащие областям D_3, D_4 соответственно. Каждый отрезок типа l_{24} делит область D_4 на две области: содержащую точку $(1, 0)$ – область D_{40} и не содержащую ее – область D_{41} . Траектории пересекают отрезки l_{24} , переходя из D_{40} в D_{41} . Это следует из того, что: $(x - y) = g(x, y) - h(x, y) < 0$, поскольку в области $D_4 : g < 0, h > 0$, а значит, функция $(x - y)(t)$ убывает вдоль траекторий. Следовательно, траектории, начинающиеся в D_4 , либо стремятся к положению равновесия F^* , либо входят в области D_1, D_2 . Далее каждый отрезок типа l_{23} делит область D_3 на две области: содержащую точку $(1, 1)$ – область D_{30} и не содержащую ее – область D_{31} . При этом $(x - y) = g(x, y) - h(x, y) > 0$, поскольку в области $D_3 : g > 0, h < 0$, а значит, функция $(x - y)(t)$ возрастает вдоль траектории. Следовательно, траектории, начинающиеся в D_3 , либо стремятся к положению равновесия F^* , либо входят в области D_1, D_2 .

Итак, траектории, начинающиеся в D_3 или в D_4 , либо стремятся к F^* , либо попадают в инвариантные области D_1 или D_2 . Пусть траектории попали в D_1 . Отрезок типа l_{11} делит D_1 на две области: содержащую точку $(0, 0)$ – область D_{10} и не содержащую ее – область D_{11} . Траектории пересекают отрезки l_{11} , переходя из D_{10} в D_{11} . При этом D_{11} содержит положение равновесия F^* . Взяв отрезок l_{11} сколь угодно близким к точке F^* , получаем, что траектории, начинающиеся в D_1 , входят в любую сколь угодно малую область D_{11} и не покидают ее.

Аналогичное рассуждение можно провести для областей, принадлежащих D_2 и имеющих граничную компоненту – отрезок l_{12} . Из вышесказанного следует, что положение равновесия F^* глобально асимптотически устойчиво (см. рис. 3). \square

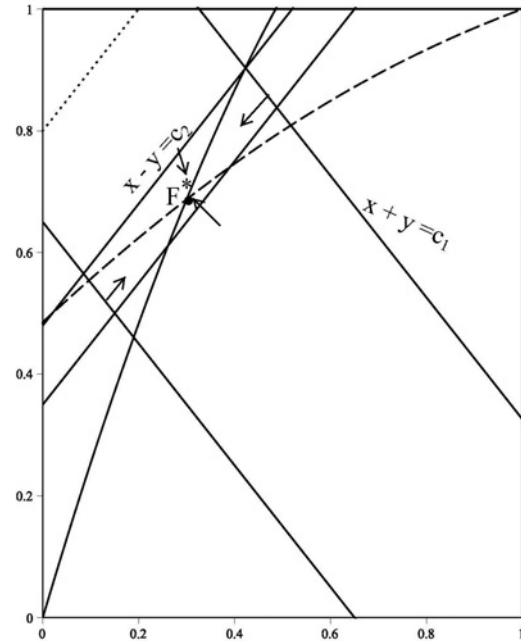


Рис. 3. Пересечение траекториями системы 3 прямых $x + y = c_1$ и $x - y = c_2$

Замечание: Из доказательства следует существование семейства инвариантных областей, являющихся невыпуклыми криволинейными шестиугольниками типа $ABCDPQ$, где AB – отрезок l_{12} , точки P, D принадлежат компоненте $h = 0$ границы области D_1 , Q – точка пересечения прямых семейств l_1, l_2 , проходящих через точки A и P , т. е. AQ, QP – отрезки – граничные компоненты шестиугольника, CD – отрезок семейства прямых l_2 такой, что точка D принадлежит дуге PF^* кривой $h = 0$, а точка C – дуге BF^* кривой $g = 0$. Две оставшиеся компоненты криволинейного шестиугольника – дуги PD и BC кривых $h = 0$ и $g = 0$ соответственно. Траектории, начинаясь в квадрате Π , входят в любой описанный шестиугольник, что доказывает глобальную устойчивость.

BF^* – дуга кривой $g = 0$, PF^* – дуга кривой $h = 0$ (см. рис. 4).

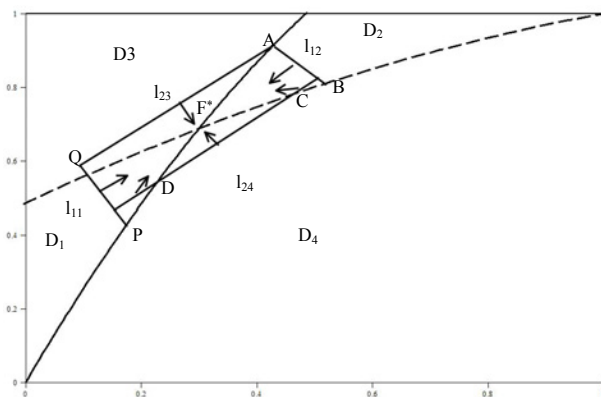


Рис. 4. Инвариантность множества $ABCDPQ$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено качественное исследование двумерной нелинейной динамической системы, являющейся моделью Полтеровича – Хенкина с амортизацией. Найдены инвариантные множества. Доказана единственность и глобальная асимптотическая устойчивость положений равновесия в моделях с амортизацией на одном и двух уровнях. В последующих исследованиях предполагается рассмотреть модель произвольной размерности и отказаться от условия равенства коэффициентов интенсивности инноваций и имитаций на всех уровнях. Также представляет интерес построение модели с динамически изменяющейся структу-

рой на основе подхода, предложенного в [2]. При этом коэффициенты интенсивности инноваций и имитаций α и β могут рассматриваться как управляемые параметры.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гельман Л. М., Левин М. И., Полтерович В. М., Спивак В. А. Моделирование распределений предприятий отрасли по уровням эффективности (на примере черной металлургии) // Экономика и математические методы. 1993. Т. XXIX, № 3. С. 460–469.
2. Кириллов А. Н. Управление многостадийными технологическими процессами // Вестник СПбГУ. Прикладная математика, информатика, процессы управления. 2006. № 4, сер. 10. С. 127–131.
3. Полтерович В. М., Хенкин Г. М. Эволюционная модель взаимодействия процессов создания и заимствования технологий // Экономика и математические методы. 1988. Т. XXIV, № 6. С. 1071–1083.
4. Хенкин Г. М., Шананин А. А. Математическое моделирование шумпетеровской инновационной динамики // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, № 8. С. 127–131.
5. Шумпетер Й. Теория экономического развития (Исследование предпринимательской прибыли, капитала, кредита, процента и цикла конъюнктуры): пер. с англ. М.: Прогресс, 1982. 455 с.

Поступила в редакцию 05.06.2017

REFERENCES

1. Gelman L. M., Levin M. I., Polterovich V. M., Spivak M. A. Modelirovanie raspredeleniya predpriyatii otrasli po urovnyam effektivnosti (na primere chernoi metallurgii) [Modelling of industry enterprises distribution according to efficiency levels (case of the iron-and-steel industry)]. *Economica i matematicheskie metody* [Economics and Mathematical Methods]. 1993. Vol. XXIX, no. 3. P. 460–469.
2. Kirillov A. N. Upravlenie mnogostadiinymi tekhnologicheskimi protsessami [The multistage technological processes control]. *Vestnik SPbGU. Prikladnaya matematika, informatika, protsessy upravleniya* [Vestnik SPbSU. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes]. 2006. No. 4, iss. 10. P. 127–131.
3. Polterovich V. M., Henkin G. M. Evolyutsionnaya model' vzaimodeistviya protsessov sozdaniya i zaимstvovaniya tekhnologii [The evolutionary

model of interaction between technology creation and adoption]. *Economica i matematicheskie metody* [Economics and Mathematical Methods]. 1988. Vol. XXIV, no. 6. P. 1071–1083.

4. Henkin G. M., Shaninin A. A. Matematicheskoe modelirovanie shumpetеровskoi innovatsionnoi dinamiki [Mathematical modeling of the schumpeterian dynamics of innovation]. *Matematicheskoe modelirovanie* [Mathematical Models and Computer Simulations]. 2014. Vol. 26, no. 8. P. 127–131.

5. Shumpeter J. Teoriya ekonomicheskogo razvitiya (Issledovanie predprinimatel'skoi pribyli, kapitala, kredita, protsenta i tsikla kon'yunktury) [The Theory of economic development: an inquiry into profits, capital, credit, interest, and the business cycle]: tr. from Eng. Moscow: Progress, 1982. 455 p.

Received June 5, 2017

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

Кириллов Александр Николаевич
ведущий научный сотрудник, д. ф.-м. н.
Институт прикладных математических
исследований Карельского научного центра РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: kirillov@krc.karelia.ru
тел.: (8142) 763370

Данилова Инна Владимировна
аспирант
Институт прикладных математических
исследований Карельского научного центра РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: DanilovaInna1987@mail.ru

CONTRIBUTORS:

Kirillov, Alexander
Institute of Applied Mathematical Research,
Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk,
Karelia, Russia
e-mail: kirillov@krc.karelia.ru
tel.: (8142) 766312

Danilova, Inna
Institute of Applied Mathematical Research,
Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk,
Karelia, Russia
e-mail: DanilovaInna1987@mail.ru

УДК 519.175.4

ОДИН СЛУЧАЙ ПРЕДЕЛЬНОГО ПОВЕДЕНИЯ СТЕПЕНЕЙ ВЕРШИН В УСЛОВНЫХ КОНФИГУРАЦИОННЫХ ГРАФАХ

Ю. Л. Павлов

*Институт прикладных математических исследований
Карельского научного центра РАН, Петрозаводск*

Рассматриваются конфигурационные графы с N вершинами. Степени вершин являются независимыми одинаково распределенными случайными величинами, имеющими дискретное степенное распределение с параметром τ . Они равны числу занумерованных в произвольном порядке полуребер. Граф строится путем попарного равновероятного соединения полуребер для образования ребер. Такие модели используются для описания различных сетей коммуникаций и топологии сети Интернет. Мы изучаем подмножество случайных графов при условии, что сумма степеней известна и равна n . Свойства графа зависят от поведения параметра τ . Пусть τ является случайной величиной, равномерно распределенной на отрезке $[a, b]$, $0 < a < b < \infty$. Пусть $\eta_{(N)}$ и μ_r равны максимальной степени вершины и числу вершин заданной степени r . Предельные распределения этих случайных величин при $N, n \rightarrow \infty$ так, что $n/N \rightarrow \infty$ ранее были известны, только если $a \leq 1$. В статье доказаны предельные теоремы для $\eta_{(N)}$ и μ_r в случае $a > 1$.

Ключевые слова: случайный конфигурационный граф; степень вершины; предельные теоремы.

Yu. L. Pavlov. A CASE OF LIMIT BEHAVIOUR OF VERTEX DEGREES IN CONDITIONAL CONFIGURATION GRAPHS

We consider configuration graphs with N vertices. The degrees of the vertices are independent identically distributed random variables according to power-law distribution with positive parameter τ . They are equal to the number of vertex's semiedges that are numbered in an arbitrary order. The graph is constructed by joining all of the semiedges pairwise equiprobably to form edges. Such models can be used for describing different communication networks and Internet topology. We study the subset of random graphs under the condition that the sum of vertex degrees is known and it is equal to n . The properties of the graph depend on the behaviour of the parameter τ . We assume that τ is a random variable following uniform distribution on the interval $[a, b]$, $0 < a < b < \infty$. Let $\eta_{(N)}$ and μ_r be the maximum vertex degree and the number of vertices with a given degree r . Limit distributions of these random variables as $N, n \rightarrow \infty$ in such a way that $n/N \rightarrow \infty$ were known only if $a \leq 1$. In the paper we proved limit theorems for $\eta_{(N)}$ and μ_r in the case $a > 1$.

Key words: configuration random graph; vertex degree; limit theorems.

ВВЕДЕНИЕ

В статье [5] рассматривались условные случайные конфигурационные графы при условии, что число ребер графа известно. Граф содержит N вершин, а сумма степеней вершин равна n . Степени всех вершин являются независимыми одинаково распределенными случайными величинами, имеющими следующее дискретное степенное распределение:

$$p_k = \mathbf{P}\{\eta = k\} = k^{-\tau} - (k+1)^{-\tau}, \quad (1)$$

где η – случайная величина, равная степени любой вершины, $k = 1, 2, \dots$, τ – положительный параметр распределения. Степень каждой вершины определяет число так называемых полуредер, т. е. инцидентных этой вершине различных ребер, для которых смежные вершины еще не определены. Граф строится путем попарного равновероятного соединения полуредер друг с другом для образования ребер. Понятно, что сумма степеней вершин любого графа должна быть четной, поэтому в случае нечетной суммы в граф добавляется фиктивная вершина единичной степени. В работе [8] отмечалось, что появление этой вспомогательной вершины не влияет на асимптотическое поведение графа при стремлении к бесконечности числа вершин. Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать степени только основных N вершин. Такие условные случайные графы впервые предложено изучать в [7] в качестве моделей сетей коммуникаций, имеющих естественные ограничения на общее число связей. В [5] рассматривались конфигурационные графы со случайным распределением степеней вершин. Предполагалось, что степени вершин имеют распределение (1), но параметр τ является случайной величиной, равномерно распределенной на отрезке $[a, b]$, $0 < a < b < \infty$. В этом случае, как легко проверить, степень каждой вершины имеет такое распределение:

$$p_1 = 1 - \frac{1}{(b-a) \ln 2} \left(\frac{1}{2^a} - \frac{1}{2^b} \right), \quad (2)$$

$$p_k = \frac{1}{(b-a) \ln k} \left(\frac{1}{k^a} - \frac{1}{k^b} \right) -$$

$$- \frac{1}{(b-a) \ln(k+1)} \left(\frac{1}{(k+1)^a} - \frac{1}{(k+1)^b} \right),$$

где $k = 2, 3, \dots$

Обозначим η_1, \dots, η_N степени вершин $1, \dots, N$ соответственно. Мы будем рассматривать графы при условии, что $\eta_1 + \dots + \eta_N = n$. В этом случае случайные величины η_1, \dots, η_N уже не являются независимыми. Обозначим $\eta_{(N)}$ максимальную степень вершины такого условного графа, следовательно,

$$\eta_{(N)} = \max_{1 \leq i \leq N} \eta_i.$$

Обозначим также μ_r число вершин графа, имеющих степень r . В статье [5] найдены предельные распределения $\eta_{(N)}$ и μ_r в различных зонах стремления N и n к бесконечности. Доказательства этих результатов основаны на использовании обобщенной схемы размещения частиц по ячейкам, введенной и подробно изученной В. Ф. Колчиным (см., например, [2]). Эта схема позволяет сводить задачи о зависимых случайных величинах к исследованию поведения вспомогательных независимых случайных величин. В [5] доказаны предельные теоремы для $\eta_{(N)}$ и μ_r в случае $N, n \rightarrow \infty$ так, что $n/N \leq C < \infty$, а также и при $n/N \rightarrow \infty$, но только если $a \leq 1$. Все эти случаи объединяет то, что при указанных условиях справедливости локальные предельные теоремы о сходимости распределений сумм вспомогательных независимых случайных величин к нормальному закону. Однако при $n/N \rightarrow \infty$ и $a > 1$ такие суммы попадают в зону действия больших отклонений, при этом значения сумм могут быть сколь угодно далеки от их математических ожиданий. Поэтому в [5] получить соответствующие результаты не удалось. В [3, 4, 6] разрабатывались подходы к доказательству локальных предельных теорем для подобных сумм в случае больших отклонений. С их помощью в настоящей статье доказаны предельные теоремы для $\eta_{(N)}$ и μ_r в не рассматривавшемся ранее случае $n/N \rightarrow \infty, a > 1$.

В следующем разделе формулируются полученные результаты в виде теоремы 1 для $\eta_{(N)}$ и теоремы 2 для μ_r . Далее приводятся вспомогательные утверждения (леммы 1–6), с помощью которых в последнем разделе доказываются теоремы 1 и 2.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Из (1)–(3) следует, что если $a > 1$, то

$$m = \mathbf{E}\eta = 1 + \frac{H(a) - H(b)}{b-a} \leq C < \infty, \quad (4)$$

где

$$H(x) = \sum_{k=2}^{\infty} (k^x \ln k)^{-1}. \quad (5)$$

В (4) и везде далее буквой C будем обозначать некоторые положительные постоянные.

Понятно, что в разных формулах и неравенствах эти постоянные могут быть разными, но, поскольку они встречаются часто, мы, для краткости, не нумеруем их и используем общий символ C .

Далее обозначим $g_a(x)$ плотность распределения устойчивого закона, характеристическая функция которого имеет вид:

$$\Psi_a(t) = \begin{cases} \exp\left\{-\frac{a}{b-a}H(a)\Gamma(1-a)\cos\frac{\pi a}{2}|t|^a \times \right. \\ \left. \times \left(1 - i\frac{t}{|t|}\tan\frac{\pi a}{2}\right)\right\}, & \text{если } 1 < a < 2; \\ \exp\{-t^2/(b-a)\}, & \text{если } a = 2; \\ \exp\{-t^2/2\}, & \text{если } a > 2, \end{cases} \quad (6)$$

где $\Gamma(x)$ – значение гамма-функции в точке x . Нам понадобятся также следующие нормирующие величины:

$$B_N = \begin{cases} (N/\ln N)^{1/a}, & \text{если } 1 < a < 2; \\ \sqrt{N \ln \ln N}, & \text{если } a = 2; \\ \sigma\sqrt{N}, & \text{если } a > 2, \end{cases} \quad (7)$$

где

$$\sigma^2 = \mathbf{D}\eta = 1 + \frac{1}{b-a} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{2k-1}{\ln k} \left(\frac{1}{k^a} - \frac{1}{k^b} \right) - m^2. \quad (8)$$

Справедливы следующие результаты.

Теорема 1. Пусть $a > 1, N, n \rightarrow \infty$ и существуют положительные постоянные δ и A такие, что $n/N^{1+\delta} \rightarrow \infty$ и $n = O(N^A)$. Тогда для любого фиксированного z

$$\mathbf{P}\{n - Nm - \eta_{(N)}/B_N \leq z\} \rightarrow \int_{-\infty}^z g_a(x) dx.$$

Теорема 2. Пусть $a > 1, N, n \rightarrow \infty$ и существуют положительные постоянные δ и A такие, что $n/N^{1+\delta} \rightarrow \infty$ и $n = O(N^A)$. Тогда для любого фиксированного натурального r и для целых неотрицательных k равномерно относительно $u_r = (k - Np_r(\lambda))/\sqrt{Np_r(1-p_r)}$ в любом фиксированном конечном интервале

$$\mathbf{P}\{\mu_r = k\} = \frac{1 + o(1)}{\sqrt{2\pi Np_r(1-p_r)}} e^{-u_r^2/2}.$$

ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ УТВЕРЖДЕНИЯ

Введем вспомогательные независимые случайные величины ξ_1, \dots, ξ_N , распределения которых совпадают с распределениями

η_1, \dots, η_N (см. (1)–(3)), т. е. для $i = 1, \dots, N$ и $k = 1, 2, \dots$

$$\mathbf{P}\{\xi_i = k\} = p_k. \quad (9)$$

Поскольку в рассматриваемом множестве графов сумма степеней вершин $i = 1, \dots, N$ равна n , из (2), (3) и (9) получаем следующий результат.

Лемма 1. Справедливо равенство:

$$\mathbf{P}\{\eta_1 = k_1, \dots, \eta_N = k_N\} = \mathbf{P}\{\xi_1 = k_1, \dots, \xi_N = k_N | \xi_1 + \dots + \xi_N = n\}.$$

Обозначим $\xi_1^{(r)}, \dots, \xi_N^{(r)}$ независимые случайные величины такие, что

$$\mathbf{P}\{\xi_i^{(r)} = k\} = \mathbf{P}\{\xi_i = k | \xi_i \leq r\}, \quad (10)$$

где $i = 1, \dots, N$. Обозначим также $\zeta_N = \xi_1 + \dots + \xi_N$, $\zeta_N^{(r)} = \xi_1^{(r)} + \dots + \xi_N^{(r)}$,

$$P_r = \mathbf{P}\{\xi_1 > r\}. \quad (11)$$

Лемма 1 показывает, что два множества случайных величин η_1, \dots, η_N и ξ_1, \dots, ξ_N удовлетворяют условиям обобщенной схемы размещения частиц по ячейкам [2]. Известно, что в этом случае из леммы 1 следует такое утверждение.

Лемма 2. Справедливо равенство:

$$\mathbf{P}\{\eta_{(N)} \leq r\} = (1 - P_r)^N \frac{\mathbf{P}\{\zeta_N^{(r)} = n\}}{\mathbf{P}\{\zeta_N = n\}}.$$

Пусть $\tilde{\xi}_1^{(r)}, \dots, \tilde{\xi}_N^{(r)}$ означают независимые случайные величины, имеющие распределение:

$$\mathbf{P}\{\tilde{\xi}_i^{(r)} = k\} = \mathbf{P}\{\xi_i = k | \xi_i \neq r\}, \quad (12)$$

где $i = 1, \dots, N; k = 1, 2, \dots$. Из леммы 1 легко выводится следующая лемма.

Лемма 3. Справедливо равенство:

$$\mathbf{P}\{\mu_r = k\} = \binom{N}{k} p_r^k (\lambda) (1 - p_r(\lambda))^{N-k} \times \frac{\mathbf{P}\{\tilde{\zeta}_{N-k}^{(r)} = n - kr\}}{\mathbf{P}\{\zeta_N = n\}},$$

где $\tilde{\zeta}_{N-k}^{(r)} = \tilde{\xi}_1^{(r)} + \dots + \tilde{\xi}_{N-k}^{(r)}$.

Леммы 2 и 3 будут использованы для доказательства теорем 1 и 2. Для этого изучим предельное поведение ζ_N , $\zeta_N^{(r)}$, $\tilde{\zeta}_{N-k}^{(r)}$, бинома $(1 - P_r)^N$ и биномиальных вероятностей, присутствующих в утверждении леммы 3.

Лемма 4. Пусть $a > 1, N, n \rightarrow \infty$ и существуют положительные постоянные δ и A такие, что $n/N^{1+\delta} \rightarrow \infty$ и $n = O(N^A)$. Тогда

$$\mathbf{P}\{\zeta_N = n\} \sim \frac{aN}{(b-a)n^{a+1} \ln n}.$$

Доказательство. Введем обозначение:

$$\gamma = (N/n)^\varepsilon, \quad (13)$$

где положительная постоянная ε будет выбрана позднее. Легко видеть, что

$$\mathbf{P}\{\zeta_N = n\} = P_{N1} + NP_{N2} + P_{N3}, \quad (14)$$

где

$$P_{N1} = \mathbf{P}\{\zeta_N = n; \xi_i \leq \gamma n, i = 1, \dots, N\};$$

$$P_{N2} = \mathbf{P}\{\zeta_N = n; \bigcap_{i=1}^{N-1} (\xi_i \leq \gamma n), \xi_N > \gamma n\};$$

$$P_{N3} = \mathbf{P}\{\zeta_N = n; \bigcup_{i \neq j} (\xi_i \geq \gamma n, \xi_j \geq \gamma n)\}.$$

Оценим P_{N1} . Обозначим

$$R(w) = \sum_{k \leq \gamma n} \exp\{wk\} \mathbf{P}\{\xi_1 = k\}. \quad (15)$$

Из (3) следует, что при $k \rightarrow \infty$

$$p_k \sim \frac{a}{(b-a)k^{a+1} \ln k}. \quad (16)$$

Отсюда и из (9):

$$\sum_{k>l} \mathbf{P}\{\xi_1 = k\} < C \int_l^\infty \frac{dx}{x^{a+1}} = \frac{C}{l^a}. \quad (17)$$

Учитывая, что при $0 \leq y \leq 1$ справедливо равенство

$$e^y = 1 + q(y), \quad (18)$$

где $q(y) \leq 2y$, из (4), (15)–(17) находим, что

$$R(1/(\gamma n)) = 1 + O(1/(\gamma n)).$$

Отсюда и из (13) получаем, что при $\varepsilon < 1$

$$(\gamma n)^{-1} = o(1/N) \quad (19)$$

и

$$R(1/(\gamma n)) = 1 + o(1/N). \quad (20)$$

Введем независимые одинаково распределенные случайные величины $\xi_1(\gamma), \dots, \xi_N(\gamma)$, имеющие следующее распределение:

$$\mathbf{P}\{\xi_1(\gamma) = k\} = \exp\left\{\frac{k}{\gamma n}\right\} \frac{\mathbf{P}\{\xi_1 = k\}}{R(1/(\gamma n))}, \quad (21)$$

где $k \leq \gamma n$. Обозначим $\zeta_N(\gamma) = \xi_1(\gamma) + \dots + \xi_N(\gamma)$. Легко видеть, что

$$P_{N1} = R^N(1/(\gamma n)) e^{-1/\gamma} \mathbf{P}\{\zeta_N(\gamma) = n\}. \quad (22)$$

Докажем, что при достаточно больших n

$$\mathbf{P}\{\zeta_N(\gamma) = n\} \leq C/B_N, \quad (23)$$

где величины B_N определены в (7). Обозначим $\varphi(t)$ и $\varphi_\gamma(t)$ характеристические функции случайных величин ξ_1 и $\xi_1(\gamma)$ соответственно.

По формуле обращения

$$\mathbf{P}\{\zeta_N(\gamma) = n\} = \quad (24)$$

$$= \frac{1}{2\pi B_N} \int_{-\pi B_N}^{\pi B_N} \exp\left\{-\frac{itn}{B_N}\right\} \left(\varphi_\gamma\left(\frac{t}{B_N}\right)\right)^N dt.$$

Рассмотрим выражение

$$|\varphi_\gamma(t)|^N = \left| \frac{R(1/(\gamma n) + it)}{R(1/(\gamma n))} \right|^N. \quad (25)$$

В силу (9), (15) и (18)

$$\begin{aligned} |R(1/(\gamma n) + it)| &= \\ &= \left| \sum_{k \leq \gamma n} \exp\{1/(\gamma n) + it\} k\} p_k \right| \leq \\ &\leq \left| \sum_{k \leq \gamma n} e^{itk} p_k \right| + 2(\gamma n)^{-1} \sum_{k \leq \gamma n} p_k. \end{aligned} \quad (26)$$

Отсюда и из (4), (17), (19) и (20) получаем, что

$$|R(1/(\gamma n) + it)| \leq |\varphi(t)| + o(1/N). \quad (27)$$

Из (20), (25) и (27) следует, что при любом фиксированном t

$$|\varphi_\gamma(t)|^N \leq C|\varphi(t)|^N. \quad (28)$$

Применяя (2), (3) и (9), находим, что

$$\varphi(t) = e^{it} \times \quad (29)$$

$$\times \left(1 + \frac{e^{it} - 1}{(b-a)e^{2it}} \left[\sum_{k=2}^{\infty} \frac{e^{itk}}{k^a \ln k} - \sum_{k=2}^{\infty} \frac{e^{itk}}{k^b \ln k} \right] \right).$$

Рассмотрим случай $1 < a < 2$. Обозначим ν случайную величину такую, что

$$\mathbf{P}\{\nu = k\} = (H(a)k^a \ln k)^{-1},$$

где $k = 2, 3, \dots$, а $H(x)$ определена в (5). Характеристическая функция случайной величины ν равна

$$f_\nu(t) = \frac{1}{H(a)} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{e^{itk}}{k^a \ln k}. \quad (30)$$

Обозначим $F_\nu(x)$ функцию распределения ν . Очевидно, что

$$F_\nu(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0; \\ 1 - \frac{1}{H(a)} \sum_{k>x} \frac{1}{k^a \ln k}, & x > 0. \end{cases} \quad (31)$$

Пусть $x \rightarrow \infty$. Легко видеть, что

$$\sum_{k>x} \frac{1}{k^a \ln k} = \frac{1 + o(1)}{x^{a-1}} \int_1^\infty \frac{dy}{y^a \ln xy}. \quad (32)$$

Последний интеграл представим в виде суммы:

$$\int_1^\infty \frac{dy}{y^a \ln xy} = \int_1^{x^\varepsilon} \frac{dy}{y^a \ln xy} + \int_{x^\varepsilon}^\infty \frac{dy}{y^a \ln xy}. \quad (33)$$

Здесь, конечно, положительная постоянная ε не обязательно совпадает с ε из (13), но, поскольку во всех случаях нам потребуется выбор достаточно малого ε , мы полагаем возможным здесь и далее считать, что это одна и та же сколь угодно малая положительная константа.

Ясно, что если $1 \leq y \leq x^\varepsilon$, то выражение $1/\ln(xy)$ можно сделать сколь угодно близким к $1/\ln x$ выбором достаточно большого x и достаточно малого ε . Легко видеть также, что при $x \rightarrow \infty$

$$\int_{x^\varepsilon}^\infty \frac{dy}{y^a \ln xy} < \frac{1}{(1+\varepsilon) \ln x} \int_{x^\varepsilon}^\infty \frac{dy}{y^a} = o\left(\frac{1}{\ln x}\right).$$

Отсюда и из (32), (33) следует, что

$$\sum_{k>x} \frac{1}{k^a \ln k} = \frac{1 + o(1)}{(a-1)x^{a-1} \ln x}. \quad (34)$$

Из (31) и (34) выводим, что при $x \rightarrow \infty$

$$F_\nu(x) = 1 - \frac{1 + o(1)}{H(a)(a-1)x^{a-1} \ln x}. \quad (35)$$

Поскольку функция $(H(a)(a-1) \ln x)^{-1}$ является медленно меняющейся в смысле Карамата, из (31) и (35) видим, что $F_\nu(x)$ удовлетворяет условиям теоремы 2.6.1 книги [1], а это значит, что она принадлежит области притяжения устойчивого закона с показателем $a-1$ и параметрами $c_1 = 0, c_2 = 1$. В лемме 2.6.2 [1] показано, что при $t \rightarrow 0$

$$f_\nu(t) = 1 + |t|^{a-1} (\ln(1/|t|))^{-1} \Gamma(1-a) \times \left(\sin\left(\frac{\pi a}{2}\right) + i \frac{t}{|t|} \cos\left(\frac{\pi a}{2}\right) \right) (1 + o(1)).$$

Отсюда и из (30) получаем, что

$$\begin{aligned} & \sum_{k=2}^\infty \frac{e^{itk}}{k^a \ln k} = \\ & = H(a) + \frac{|t|^{a-1} H(a)}{\ln(1/|t|)} \Gamma(1-a) \times \\ & \times \left(\sin\left(\frac{\pi a}{2}\right) + i \frac{t}{|t|} \cos\left(\frac{\pi a}{2}\right) \right) (1 + o(1)). \end{aligned} \quad (36)$$

Заменяем в этом соотношении a на b . Тогда

$$\sum_{k=2}^\infty \frac{e^{itk}}{k^b \ln k} = H(b) + O(|t|^{b-1} / \ln(1/|t|)),$$

поэтому из (36) следует, что

$$\begin{aligned} & it \left(\sum_{k=2}^\infty \frac{e^{itk}}{k^a \ln k} - \sum_{k=2}^\infty \frac{e^{itk}}{k^b \ln k} \right) = \\ & = it(H(a) - H(b)) - H(a) \Gamma(1-a) \cos(\pi a/2) \times \\ & \times \frac{|t|^a}{\ln(1/|t|)} \left(1 - i \frac{t}{|t|} \tan \frac{\pi a}{2} \right) (1 + o(1)). \end{aligned}$$

Отсюда и из (4), (29) вытекает, что в окрестности нуля

$$\begin{aligned} \varphi(t) & = 1 + itm - \\ & - H(a) \Gamma(1-a) \cos\left(\frac{\pi a}{2}\right) \frac{|t|^a}{\ln(1/|t|)} \times \\ & \times \left(1 - i \frac{t}{|t|} \tan \frac{\pi a}{2} \right) (1 + o(1)). \end{aligned} \quad (37)$$

Из (37) следует, что при $1 < a < 2$ и любом фиксированном t

$$\begin{aligned} & \varphi^N(t(\ln N/N)^{1/a}) \sim 1 + \\ & + itmN^{1-1/a} (\ln N)^{1/a} - H(a) \Gamma(1-a) \times \\ & \times |t|^a \frac{a}{b-a} \cos\left(\frac{\pi a}{2}\right) \left(1 - i \frac{t}{|t|} \tan \frac{\pi a}{2} \right). \end{aligned} \quad (38)$$

Пусть $a = 2$ и $t \rightarrow 0$. В ходе доказательства теоремы 2.6.5 [1] показано, что

$$\ln \varphi(t) = imt - \frac{t^2}{2} G\left(\frac{1}{|t|}\right) (1 + o(1)), \quad (39)$$

где

$$G(1/|t|) = \sum_{k=1}^{1/|t|} k^2 p_k.$$

Используя (1)–(3), получаем, что

$$G(1/|t|) = 1 - \sum_{k=2}^{1/|t|} \frac{2k+1}{(b-2) \ln k} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{k^b} \right) \sim$$

$$\sim \frac{2}{b-2} \sum_{k=2}^{1/|t|} \frac{1}{k \ln k},$$

откуда

$$G\left(\frac{1}{|t|}\right) \sim \frac{2}{b-2} \int_{2|t|}^1 \frac{dy}{y \ln(y/|t|)} \sim \frac{2}{b-2} \ln \ln \frac{1}{|t|}.$$

Из этого соотношения и (39) следует, что

$$\ln \varphi(t) = imt - \frac{t^2(1+o(1))}{b-a} \ln \ln \frac{1}{|t|}. \quad (40)$$

Это значит, что при любом фиксированном t

$$\begin{aligned} \varphi^N\left(\frac{t}{\sqrt{N \ln \ln N}}\right) &\sim \\ &\sim \exp\left\{imt \sqrt{\frac{N}{\ln \ln N}} - \frac{t^2}{b-a}\right\}. \end{aligned} \quad (41)$$

Поскольку при $a > 2$ распределение (1)–(3) имеет конечную дисперсию (8), очевидно, что

$$\varphi(t) = 1 + imt - \frac{t^2 \mathbf{E} \xi^2}{2} + o(1) \quad (42)$$

и при фиксированных t

$$\varphi^N\left(\frac{t}{\sigma \sqrt{N}}\right) \sim 1 + \frac{itmN}{\sigma \sqrt{N}} - \frac{t^2}{2}. \quad (43)$$

Из (7), (38), (41) и (43) следует, что при $|t| \leq \varepsilon B_N$ и достаточно малом ε

$$|\varphi^N(t/B_N)| \leq \exp\{-C|t|^\beta\}, \quad (44)$$

где $\beta = a$ при $1 < a < 2$ и $\beta = 2$, если $a \geq 2$. Если $\varepsilon B_N \leq |t| \leq \pi B_N$, то, как хорошо известно,

$$|\varphi^N(t/B_N)| \leq e^{-CN}. \quad (45)$$

Разобьем интеграл, стоящий в правой части (24), на сумму двух интегралов, области интегрирования которых определяются как $|t| \leq \varepsilon B_N$ и $\varepsilon B_N \leq |t| \leq \varepsilon \pi B_N$. Тогда из (24), (44), (45):

$$\mathbf{P}\{\zeta_N(\gamma) = n\} \leq \frac{C}{B_N} \left(\int_0^\infty e^{-C|t|^\beta} dt + e^{-CN} \right),$$

откуда и получаем оценку (23). Из (13), (20), (22), (23) и условий $n/N^{1+\delta} \rightarrow \infty, n = O(N^A)$ следует, что

$$P_{N1} \leq C B_N^{-1} e^{-1/\gamma} = o(N/(n^{a+1} \ln n)). \quad (46)$$

Оценим вероятность P_{N2} . Согласно (14)

$$P_{N2} = \sum_{N-1 \leq k \leq n-\gamma n} \mathbf{P}\{\xi_N = n-k\} \times \quad (47)$$

$$\times \mathbf{P}\{\zeta_{N-1} = k; \xi_i \leq \gamma n, i \leq N-1\}.$$

Используя (10), (11), получаем, что

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\{\zeta_{N-1} = k; \xi_i \leq \gamma n, i \leq N-1\} &= \\ &= (1 - P_{\gamma n})^{N-1} \mathbf{P}\{\zeta_{N-1}^{(\gamma n)} = k\}. \end{aligned}$$

Отсюда и из (11), (17), (19) следует, что

$$P_{\gamma n} = o(1/N), \quad (48)$$

поэтому из (47) вытекает, что

$$P_{N2} = (1 + o(1)) \times \quad (49)$$

$$\times \sum_{N-1 \leq k \leq n-\gamma n} \mathbf{P}\{\xi_N = n-k\} \mathbf{P}\{\zeta_{N-1}^{(\gamma n)} = k\}.$$

Это равенство позволяет нам представить вероятность P_{N2} в виде суммы:

$$P_{N2} = S_1 + S_2, \quad (50)$$

где

$$S_i = (1 + o(1)) \times \quad (51)$$

$$\times \sum_{K_i} \mathbf{P}\{\xi_N = n-k\} \mathbf{P}\{\zeta_{N-1}^{(\gamma n)} = k\},$$

$i = 1, 2; K_1 = \{k : N-1 \leq k \leq \gamma n\}, K_2 = \{k : \gamma n < k < n(1-\gamma)\}.$

Применяя (13) и (16) к оценке вероятности $\mathbf{P}\{\xi_N = n-k\}$, видим, что в области суммирования K_1 при достаточно больших N, n

$$S_1 \sim \frac{a}{(b-a)n^{a+1} \ln n} \times \quad (52)$$

$$\times \mathbf{P}\{N-1 \leq \zeta_{N-1}^{(\gamma n)} \leq \gamma n\}.$$

Обозначим $\varphi^{(\gamma n)}(t)$ характеристическую функцию $\xi_1^{(\gamma n)}$. Очевидно, что

$$(\varphi^{(\gamma n)}(t/B_N))^{N-1} = \quad (53)$$

$$= \left(\frac{\varphi(t/B_N) - \sum_{k > \gamma n} e^{itk/B_N} p_k}{1 - P_{\gamma n}} \right)^{N-1}.$$

Соотношения (38), (41), (43) означают, что распределения случайных величин $(\zeta_N - mN)/B_N$ слабо сходятся к устойчивым законам с указанными в правых частях этих соотношений характеристическими функциями.

Из (48) и (53) следует, что к этим же законам сходятся и распределения случайных величин $(\zeta_N^{(\gamma n)} - mN)/B_N$. Тогда из (52) получаем, учитывая (13) и условие $n/N^{1+\delta} \rightarrow \infty$, что при достаточно малом ε

$$S_1 = \frac{a(1+o(1))}{(b-a)n^{a+1} \ln n} \times \\ \times \mathbf{P} \left\{ -\infty < \frac{\zeta_{N-1} - mN}{B_N} < \infty \right\} \sim \quad (54) \\ \sim \frac{a}{(b-a)n^{a+1} \ln n}.$$

Покажем теперь, что

$$S_2 = o((n^{a+1} \ln n)^{-1}). \quad (55)$$

Если $\gamma n < k < n(1-\gamma)$, то из (13) и (16) следует, что

$$\mathbf{P}\{\xi_N = n-k\} < C((\gamma n)^{a+1} \ln n)^{-1}. \quad (56)$$

Отсюда и из (51) получаем, что

$$S_2 < C((\gamma n)^{a+1} \ln n)^{-1} \mathbf{P}\{\zeta_{N-1}^{(\gamma n)} > \gamma n\}. \quad (57)$$

Из (10) и (16) вытекает, что

$$\mathbf{D}\xi_1^{(\gamma n)} < C \sum_{k=1}^{\gamma n} k^2 \mathbf{P}\{\xi_1 = k\} < C(\gamma n)^{2-a}. \quad (58)$$

Отсюда и из (57):

$$S_2 < CN((\gamma n)^{2a+1} \ln n)^{-1}, \quad (59)$$

что и доказывает (55). Из (50), (54) и (55) получаем, что

$$P_{N2} = \frac{a(1+o(1))}{(b-a)n^{a+1} \ln n}. \quad (60)$$

Оценим P_{N3} . Легко заметить, что

$$P_{N3} = (N(N-1)/2) \sum_{k \leq \gamma n} \mathbf{P}\{\zeta_{N-2} = k\} \times$$

$$\times \mathbf{P}\{\xi_{N-1} + \xi_N = n-k, \xi_{N-1} > \gamma n, \xi_N > \gamma n\}.$$

Отсюда следует, что

$$P_{N3} \leq CN^2 \sum_{k \leq \gamma n} \mathbf{P}\{\zeta_{N-2} = k\} \times \quad (61)$$

$$\times \sum_Z \mathbf{P}\{\xi_{N-1} = s\} \mathbf{P}\{\xi_N = n-k-s\},$$

где $Z = \{s : \gamma n < s < n(1-\gamma)\}$. В силу (16)

$$\mathbf{P}\{\xi_{N-1} = s\} < C/(\gamma n)^{a+1},$$

поэтому, используя (17), получаем, что

$$\sum_Z \mathbf{P}\{\xi_{N-1} = s\} \mathbf{P}\{\xi_N = n-k-s\} \leq C/(\gamma n)^{2a+1}.$$

Отсюда и из (13), (61) находим, что при достаточно малых ε

$$P_{N3} \leq C \frac{N^2}{(\gamma n)^{2a+1}} = o\left(\frac{N}{n^{a+1} \ln n}\right). \quad (62)$$

Из (14), (46), (62) следует, наконец, утверждение леммы 4.

Рассмотрим теперь предельное поведение вероятности $\mathbf{P}\{\zeta_N^{(r)} = n\}$.

Лемма 5. Пусть $a > 1, N, n \rightarrow \infty$ и существуют положительные постоянные δ и A такие, что $n/N^{1+\delta} \rightarrow \infty, n = O(N^A)$. Тогда если $r = n - mN - zB_N$, где z - фиксированное число, то

$$\mathbf{P}\{\zeta_N^{(r)} = n\} = \frac{aN(1+o(1))}{(b-a)n^{a+1} \ln n} \int_z^\infty g_a(x) dx,$$

где $g_a(x)$ - плотность распределения устойчивого закона, характеристическая функция которого определена в (6).

Доказательство. Как и при доказательстве леммы 4, запишем равенство:

$$\mathbf{P}\{\zeta_N^{(r)} = n\} = P_{N1}^{(r)} + NP_{N2}^{(r)} + P_{N3}^{(r)}, \quad (63)$$

где вероятности $P_{Nj}^{(r)}, j = 1, 2, 3$, определяются аналогично P_{Nj} (см. (14)) с заменой ζ_N на $\zeta_N^{(r)}$ и ξ_i на $\xi_i^{(r)}, i = 1, \dots, N$. По аналогии с (20) легко показать, что

$$R^{(r)}(1/(\gamma n)) = 1 + o(1/N), \quad (64)$$

где $R^{(r)}(w)$ отличается от (15) только заменой ξ_i на $\xi_i^{(r)}$. Введем также независимые одинаково распределенные случайные величины $\xi_1^{(r)}(\gamma), \dots, \xi_N^{(r)}(\gamma)$ такие, что (см. (21))

$$\mathbf{P}\{\xi_1^{(r)}(\gamma) = k\} = e^{k/(\gamma n)} \frac{\mathbf{P}\{\xi_1^{(r)} = k\}}{R(1/(\gamma n))}, \quad (65)$$

где $k \leq \gamma n$ и пусть $\zeta_N^{(r)}(\gamma) = \xi_1^{(r)}(\gamma) + \dots + \xi_N^{(r)}(\gamma)$. Как и в (24),

$$\mathbf{P}\{\zeta_N^{(r)}(\gamma) = n\} = \frac{1}{2\pi B_N} \times \quad (66)$$

$$\times \int_{-\pi B_N}^{\pi B_N} \exp\left\{-\frac{itn}{B_N}\right\} \left(\varphi_\gamma^{(r)}\left(\frac{t}{B_N}\right)\right)^N dt,$$

где характеристическая функция $\varphi_\gamma^{(r)}(t)$ случайной величины $\xi_1^{(r)}(\gamma)$ в силу (18), (64), (65) имеет вид:

$$\varphi_\gamma^{(r)}(t) = \frac{\varphi^{(r)}(t) + O(1/(\gamma n))}{R^{(r)}(1/(\gamma n))}, \quad (67)$$

а $\varphi^{(r)}(t)$ – характеристическая функция случайной величины $\xi_1^{(r)}$:

$$\varphi^{(r)}(t) = \frac{\varphi(t) - \sum_{k>r} p_k e^{itk}}{1 - P_r}. \quad (68)$$

Учитывая соотношение (48) и выбор r , из (64)–(68) получаем, что

$$\begin{aligned} \varphi_\gamma^{(r)}(t) &= \varphi(t)(1 + o(1/N)) \\ \text{и} \\ (\varphi_\gamma^{(r)}(t))^N &\sim \varphi^N(t). \end{aligned} \quad (69)$$

Из этого соотношения, (44), (45), как и при доказательстве (46), вытекает, что

$$P_{N1}^{(r)} = o(N/(n^{a+1} \ln n)). \quad (70)$$

Продолжая следовать схеме доказательства леммы 4 и учитывая, что

$$((1 - P_{\gamma n})/(1 - P_r))^{N-1} \rightarrow 1,$$

представим вероятность $P_{N2}^{(r)}$ в виде суммы

$$P_{N2}^{(r)} = S_1^{(r)} + S_2^{(r)}, \quad (71)$$

где

$$S_i^{(r)} = (1 + o(1)) \sum_{K_i^{(r)}} \mathbf{P}\{\xi_N^{(r)} = n - k\} \mathbf{P}\{\zeta_{N-1}^{(\gamma n)} = k\},$$

$i = 1, 2$; $K_1^{(r)} = \{k : n - r \leq k \leq \gamma n\}$, $K_2^{(r)} = \{k : \gamma n < k < n(1 - \gamma)\}$. Применяя (10), (13) и (16), получаем, что при $k \in K_1^{(r)}$ равномерно относительно k

$$\mathbf{P}\{\xi_N^{(r)} = n - k\} = \frac{a + o(1)}{(b - a)n^{a+1} \ln n}, \quad (72)$$

следовательно,

$$S_1^{(r)} \sim \frac{a \mathbf{P}\{n - r \leq \zeta_{N-1}^{(\gamma n)} \leq \gamma n\}}{(b - a)n^{a+1} \ln n}. \quad (73)$$

В ходе доказательства леммы 4 было показано (см. комментарий к соотношению (53)), что распределения случайных величин $(\zeta_N - mN)/B_N$ слабо сходятся к устойчивым законам с плотностями $g_a(x)$ и характеристическими функциями, определенными в (6). Из (69) следует, что это же утверждение верно и для случайных величин $(\zeta_N^{(r)} - mN)/B_N$. Поскольку $r = n - mN - zB_N$, из (73) получаем, что

$$S_1^{(r)} \sim \frac{a}{(b - a)n^{a+1} \ln n} \int_z^\infty g_a(x) dx. \quad (74)$$

Покажем, что при выполнении условий леммы

$$S_2^{(r)} = o((n^{a+1} \ln n)^{-1}). \quad (75)$$

С помощью (10), (16), (17), (19) нетрудно обнаружить, что если $k \in K_2^{(r)}$, то, как и в (56), (57),

$$\mathbf{P}\{\xi_N^{(r)} = n - k\} < C((\gamma n)^{a+1} \ln n)^{-1}$$

и

$$S_2^{(r)} < C((\gamma n)^{a+1} \ln n)^{-1} \mathbf{P}\{\zeta_{N-1}^{(\gamma n)} > \gamma n\}.$$

Поскольку $\gamma n = o(r)$, из (13), (58) легко следует оценка, аналогичная (59), что и доказывает (75). Из (71), (74) и (75) находим, что

$$P_{N2}^{(r)} \sim \frac{a}{(b - a)n^{a+1} \ln n} \int_z^\infty g_a(x) dx. \quad (76)$$

Оценка $P_{N3}^{(r)}$ аналогична (62), поэтому из (63), (70) и (76) следует лемма 5.

Теперь мы рассмотрим асимптотическое поведение суммы вида $\tilde{\zeta}_N^{(r)}$, присутствующей в утверждении леммы 3.

Лемма 6. Пусть $a > 1$, $N, n \rightarrow \infty$ и существуют положительные постоянные δ и A такие, что $n/N^{1+\delta} \rightarrow \infty$, $n = O(N^A)$. Тогда при $T = N(1 - p_r)(1 + o(1))$

$$\mathbf{P}\{\tilde{\zeta}_T^{(r)} = n\} = \frac{aT(1 + o(1))}{(b - a)(1 - p_r)n^{a+1} \ln n}.$$

Доказательство. Будем следовать идее доказательства лемм 4 и 5. Поэтому

$$\mathbf{P}\{\tilde{\zeta}_T^{(r)} = n\} = \tilde{P}_{T1}^{(r)} + T\tilde{P}_{T2}^{(r)} + \tilde{P}_{T3}^{(r)}, \quad (77)$$

где вероятности $\tilde{P}_{Tj}^{(r)}$, $j = 1, 2, 3$, определяются аналогично P_{Nj} в (14) с заменой N на T , ζ_N на $\tilde{\zeta}_T^{(r)}$ и ξ_i на $\tilde{\xi}_i^{(r)}$.

Нетрудно видеть, что, как и в (20),

$$\tilde{R}^{(r)}(1/(\gamma n)) = 1 + o(1/T), \quad (78)$$

где

$$\tilde{R}^{(r)}(w) = \sum_{k \leq \gamma n} \exp\{wk\} \mathbf{P}\{\xi_1^{(r)} = k\}.$$

Понятно также, что

$$\mathbf{P}\{\tilde{\zeta}_T^{(r)}(\gamma) = n\} = \frac{1}{2\pi B_T} \times \quad (79)$$

$$\int_{-\pi B_T}^{\pi B_T} \exp\left\{-\frac{itn}{B_T}\right\} \left(\tilde{\varphi}_\gamma^{(r)}\left(\frac{t}{B_T}\right)\right)^T dt,$$

где $\tilde{\zeta}_T^{(r)}(\gamma) = \tilde{\xi}_1^{(r)}(\gamma) + \dots + \tilde{\xi}_T^{(r)}(\gamma)$, а слагаемые $\tilde{\xi}_i^{(r)}(\gamma)$, $i = 1, \dots, T$ имеют распределение:

$$\mathbf{P}\{\tilde{\xi}_1^{(r)}(\gamma) = k\} = e^{k/(\gamma n)} \frac{\mathbf{P}\{\tilde{\xi}_1^{(r)} = k\}}{\tilde{R}^{(r)}(1/(\gamma n))}, \quad (80)$$

$k \leq \gamma n$; и характеристическую функцию

$$\tilde{\varphi}^{(r)}(t) = \frac{\tilde{R}^{(r)}(1/(\gamma n) + it)}{\tilde{R}^{(r)}(1/(\gamma n))}. \quad (81)$$

Обозначим $\tilde{\varphi}^{(r)}(t)$ характеристическую функцию случайной величины $\tilde{\xi}_1^{(r)}$. Тогда

$$\tilde{\varphi}^{(r)}(t) = \frac{\varphi(t) - p_r e^{itr}}{1 - p_r}. \quad (82)$$

Применяя (7) и повторяя рассуждения, подобные выводу (26)–(28), из (78), (80)–(82) находим, что

$$|\tilde{\varphi}_\gamma^{(r)}(t/B_T)|^T \leq C|\varphi(t)|^T,$$

поэтому, используя (37), (40), (42), как и в (44), (45), видим, что при $|t| \leq aB_T$

$$|\tilde{\varphi}_\gamma^{(r)}(t/B_T)|^T \leq \exp\{-C|t|^\beta\},$$

а при $\varepsilon B_T < |t| \leq \pi B_T$

$$|\tilde{\varphi}_\gamma^{(r)}(t/B_T)|^T \leq e^{-CT}.$$

Из этих оценок и (79), как и в (46), получаем, что

$$\tilde{P}_{T1}^{(r)} = o(T(n^{a+1} \ln n)^{-1}). \quad (83)$$

Как и при доказательстве (49), нетрудно вывести, что

$$\tilde{P}_{T2}^{(r)} = (1 + o(1)) \times$$

$$\times \sum_{T-1 \leq k \leq n-\gamma n} \mathbf{P}\{\tilde{\xi}_T^{(r)} = n - k\} \mathbf{P}\{\tilde{\zeta}_{T-1, \gamma}^{(r)} = k\},$$

где $\tilde{\zeta}_{T-1, \gamma}^{(r)} = \tilde{\xi}_{1, \gamma}^{(r)} + \dots + \xi_{T-1, \gamma}^{(r)}$, а $\tilde{\xi}_{1, \gamma}^{(r)}, \dots, \xi_{T-1, \gamma}^{(r)}$ – независимые, одинаково распределенные случайные величины, для которых

$$\mathbf{P}\{\tilde{\xi}_{1, \gamma}^{(r)} = k\} = \mathbf{P}\{\xi_1 = k | \xi_1 \leq \gamma n, \xi_1 \neq r\}.$$

Тогда

$$\tilde{P}_{T2}^{(r)} = \tilde{S}_1^{(r)} + \tilde{S}_2^{(r)}, \quad (84)$$

где области суммирования в $\tilde{S}_1^{(r)}$ и $\tilde{S}_2^{(r)}$ задаются в виде $\tilde{K}_1^{(r)} = \{k : T - 1 \leq k \leq \gamma n\}$, $\tilde{K}_2^{(r)} = \{k : \gamma n \leq k \leq n(1 - \gamma)\}$.

Используя (12), (16) и (72), нетрудно увидеть, что при $k \in \tilde{K}_1^{(r)}$ сумма $\tilde{S}_1^{(r)}$ сколь угодно мало отличается от

$$\frac{a}{(b-a)(1-p_r)n^{a+1} \ln n} \mathbf{P}\left\{ \frac{T-1-\tilde{m}^{(r)}T}{B_T} \leq \frac{\tilde{\zeta}_{T-1, \gamma}^{(r)} - \tilde{m}^{(r)}T}{B_T} \leq \frac{\gamma n - \tilde{m}^{(r)}T}{B_T} \right\},$$

где

$$\tilde{m}^{(r)} = \mathbf{E}\tilde{\xi}_1^{(r)} = \frac{m - rp_r}{1 - p_r}.$$

Отсюда, как и в (54),

$$\tilde{S}_1^{(r)} = \frac{a + o(1)}{(b-a)(1-p_r)n^{a+1} \ln n}. \quad (85)$$

Если $k \in \tilde{K}_2^{(r)}$, то, как следует из (3), (12) и (16),

$$\mathbf{P}\{\tilde{\xi}_T^{(r)} = n - k\} \leq C((n\gamma)^{a+1} \ln n)^{-1}.$$

Тогда

$$\tilde{S}_2^{(r)} \leq C((n\gamma)^{a+1} \ln n)^{-1} \mathbf{P}\{\tilde{\zeta}_{T-1, \gamma}^{(r)} \geq \gamma n\}$$

и, как и в (55),

$$\tilde{S}_2^{(r)} = o((n^{a+1} \ln n)^{-1}).$$

Отсюда и из (84), (85)

$$\tilde{P}_{T2}^{(r)} = \frac{a + o(1)}{(b-a)(1-p_r)n^{a+1} \ln n}. \quad (86)$$

Оценка $\tilde{P}_{T3}^{(r)}$ проводится аналогично доказательству (62), что приводит к соотношению

$$\tilde{P}_{T3}^{(r)} = o(T/(n^{a+1} \ln n)). \quad (87)$$

Утверждение леммы 6 следует из (77), (83), (86) и (87).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВА ТЕОРЕМ

Пусть выполнены условия теоремы 1 и $r = n - mN - zB_N$, где z – фиксированное число. Тогда из (11), (17), (19) и условия $n/N^{1+\delta} \rightarrow \infty$ следует, что

$$(1 - P_r)^N \rightarrow 1. \quad (88)$$

Из лемм 4 и 5 находим, что

$$\mathbf{P}\{\zeta_N^{(r)} = n\} / \mathbf{P}\{\zeta_N = n\} \rightarrow \int_z^\infty g_a(x) dx. \quad (89)$$

Согласно лемме 2, из (88) и (89) вытекает, что

$$\mathbf{P}\{(n - mN - \eta_{(N)})/B_N < z\} = \mathbf{P}\{\eta_{(N)} > r\} \rightarrow \int_{-\infty}^z g_a(x) dx.$$

Теорема 1 доказана.

Если r фиксировано, то $Np_r \rightarrow \infty$ при $N \rightarrow \infty$ и, используя нормальное приближение биномиальных вероятностей, получаем, что

$$\begin{aligned} \binom{N}{k} p_r^k (1 - p_r)^{N-k} &= \\ &= \frac{1 + o(1)}{\sqrt{2\pi N p_r (1 - p_r)}} e^{-u_r^2/2} \end{aligned} \quad (90)$$

равномерно относительно целых неотрицательных k таких, что $u_r = (k - Np_r)/\sqrt{2\pi Np_r(1-p_r)}$ лежит в любом фиксированном конечном интервале. Рассматривая такие k и учитывая, что в условиях теоремы 2 $k = o(n)$, а в лемме 6 $T = N(1-p_r)(1+o(1))$, из лемм 4 и 6 выводим, что

$$\mathbf{P}\{\tilde{\zeta}_{N-k}^{(r)} = n - kr\} / \mathbf{P}\{\zeta_N = n\} \rightarrow 1. \quad (91)$$

Теперь утверждение теоремы 2 очевидным образом следует из леммы 3, (90) и (91).

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 16-01-00005.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ибрагимов И. А., Линник Ю. В.* Независимые и стационарно связанные величины. М.: Наука, 1965. 524 с.
2. *Колчин В. Ф.* Случайные графы. М.: Физматлит, 2000. 256 с.
3. *Павлов Ю. Л.* Один случай предельного распределения максимального объема дерева в слу-

чайном лесе // Математические заметки. 1979. Т. 25, вып. 5. С. 751–760.

4. *Павлов Ю. Л.* Об условных интернет-графах, степени вершин которых не имеют математического ожидания // Дискретная математика. 2010. Т. 22, вып. 3. С. 20–33. doi: 10.4213/dm1104
5. *Павлов Ю. Л.* Об условных конфигурационных графах со случайным распределением степеней вершин // Труды КарНЦ РАН. 2016. № 8. С. 62–72. doi: 10.17076/mat313
6. *Павлов Ю. Л., Дертшишникова Е. Н.* О предельном распределении максимальной степени вершины в случайном графе интернет-типа // Труды КарНЦ РАН. 2010. № 3. С. 59–65.
7. *Павлов Ю. Л., Чеплюкова И. А.* Случайные графы интернет-типа и обобщенная схема размещения // Дискретная математика. 2008. Т. 20, вып. 3. С. 3–18. doi: 10.4213/dm1008
8. *Reittu H., Norros I.* On the power-law random graph model of massive data networks // Performance Evaluation. 2004. Vol. 55, no. 4. P. 3–23. doi: 10.1016/S0166-53/6(3)00097-x

Поступила в редакцию 14.03.2017

REFERENCES

1. *Ibragimov I. A., Linnik Yu. V.* Independent and stationary sequences of random variables. Groningen: Wolters Neordhoff Publ., 1971. 438 p.
2. *Kolchin V. F.* Random graphs. Cambridge: Univ. Press, 1999. 252 p.
3. *Pavlov Yu. L.* A case of limit distribution of the maximal volume on a tree in a random forest. *Mathematical Notes*. 1979. Vol. 25, iss. 5. P. 387–392. doi: 10.1515/dma.2007.034
4. *Pavlov Yu. L.* On conditional Internet graphs whose vertex degrees have no mathematical expectation. *Discrete Mathematics and Applications*. 2010. Vol. 20, iss. 5–6. P. 509–524. doi: 10.1515/dma.2010.031
5. *Pavlov Yu. L.* Ob uslovykh konfiguratsionnykh graphakh so sluchainym raspredeleniem stepenei vershin [On conditional configuration graphs with random distribution of vertex degrees]. *Trudy*

KarNTs RAN [Trans. KarRC RAS]. 2016. No. 8. P. 62–72.

6. *Pavlov Yu. L., Dertishnikova E. N.* O predel'nom raspredelenii maksimal'noi stepeni vershiny v sluchainom grafe internet-tipa [On the limited distribution of the maximum vertex degree in a random internet-type graph]. *Trudy KarNTs RAN [Trans. KarRC RAS]*. 2010. No. 3, iss. 1. P. 59–65. doi: 10.17076/mat313
7. *Pavlov Yu. L., Cheplyukova I. A.* Random Internet-type graphs and the generalized allocation scheme. *Discrete Mathematics and Applications*. 2008. Vol. 18, iss. 5. P. 447–464. doi: 10.1515/DMA.2008.033
8. *Reittu H., Norros I.* On the power-law random graph model of massive data networks. *Performance Evaluation*. 2004. Vol. 55, no. 4. P. 3–23. doi: 10.1016/S0166-53/6(3)00097-x

Received March 14, 2017

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

Павлов Юрий Леонидович
главный научный сотрудник, д. ф.-м. н., проф.
Институт прикладных математических
исследований Карельского научного центра РАН
ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
Республика Карелия, Россия, 185910
эл. почта: pavlov@krc.karelia.ru
тел.: (8142) 781218

CONTRIBUTOR:

Pavlov, Yury
Institute of Applied Mathematical Research,
Karelian Research Centre,
Russian Academy of Sciences
11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk,
Karelia, Russia
e-mail: pavlov@krc.karelia.ru
tel.: (8142) 781218

УДК 004.01:006.72 (470.22)

СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КЛАСТЕРА С ГИСТЕРЕЗИСНЫМ УПРАВЛЕНИЕМ СКОРОСТЬЮ ОБСЛУЖИВАНИЯ

А. С. Румянцев¹, К. А. Калинина¹, Т. Е. Морозова²

¹ *Институт прикладных математических исследований
Карельского научного центра РАН, Петрозаводск*

² *Петрозаводский государственный университет*

Предлагается стохастическая модель многосерверной системы массового обслуживания с одновременным занятием и одновременным освобождением заявкой случайного числа серверов и пороговым (гистерезисным) управлением скоростью обслуживаемых устройств. Для предложенной модели определены характеристики качества обслуживания и производительности системы. Представлены результаты численного эксперимента, иллюстрирующего зависимость характеристик модели от порога переключения. Предложенная модель позволяет оценить возможности экономии энергии на вычислительном кластере при контроле качества обслуживания без вмешательства в работу реальной системы.

Ключевые слова: стохастическое моделирование; гистерезисное управление; вычислительный кластер; энергоэффективность.

A. S. Rumyantsev, K. A. Kalinina, T. E. Morozova. STOCHASTIC MODELING OF A HIGH-PERFORMANCE CLUSTER WITH HYSTERETIC CONTROL OF SERVICE RATE

A stochastic model of a multiserver queueing system with simultaneous service of a customer by a random number of servers and threshold-based (hysteretic) control of the service rate is presented. The performance and quality-of-service measures of the model are defined. Numerical results of experiments studying the dependence of performance/energy measures on the service rate switching threshold are presented. The model allows studying the energy efficiency of a high-performance cluster under quality-of-service and performance constraints.

Key words: stochastic modeling; hysteretic control; high-performance computing cluster; energy efficiency.

ВВЕДЕНИЕ

Высокопроизводительные вычислительные кластеры широко применяются для ускорения расчетов в науке и промышленности. Высокое энергопотребление кластеров и нерав-

номерность нагрузки дают потенциал для применения методов экономии энергии. Общие для всех многосерверных систем механизмы управления энергопотреблением доступны для непосредственного применения на уровне системного и пользовательского про-

граммного обеспечения вычислительного кластера. Среди таких механизмов наибольший потенциал экономии обеспечивают состояния пониженного энергопотребления ACPI (сон, глубокий сон, выключение), однако применение данных механизмов негативно отражается на качестве обслуживания. Это связано с тем, что уход системы в состояние пониженного энергопотребления и возвращение в рабочий режим требуют значительных временных затрат. Поэтому оптимизация управления механизмами ACPI на многосерверных системах, как правило, выполняется относительно компромиссного критерия, включающего качество обслуживания и энергопотребление, в аддитивном либо мультипликативном виде [7, 8, 10].

Важным отличием высокопроизводительного кластера от классической многосерверной системы (например, серверной фермы) является возможность запуска пользовательской программы одновременно на всех вычислительных узлах (серверах), что может служить препятствием для выключения части серверов с помощью ACPI.

Один из базовых механизмов экономии, оказывающих наименьшее влияние на качество обслуживания, состоит в управлении скоростью серверов вычислительного кластера (например, с помощью подсистемы `cpufreq` операционных систем Linux). Как правило, подобные механизмы основаны на переключении состояний методом порогового (в частности, гистерезисного) управления, например, с использованием специальных приложений (таких, как регулятор `ondemand` из подсистемы `cpufreq` ядра операционной системы Linux). Такое переключение происходит практически мгновенно, при этом снижение частоты и питающего напряжения оказывает существенное влияние на энергопотребление системы [9]. Кроме того, в отличие от механизма ACPI управление скоростью обслуживания оставляет доступными все серверы, не препятствуя запуску на них пользовательских программ.

На практике подбор параметров управления зачастую производится экспериментально, поскольку аналитические результаты доступны лишь для упрощенных моделей, например, для односерверных систем [1, 13]. При этом важно не только учитывать максимально возможную экономию, но и контролировать качество обслуживания. Подчеркнем, что поток заявок на обслуживание в системе имеет случайный характер [6]. Таким образом, возникает задача разработки стохастической модели вычислительного кластера с управлени-

ем скоростью обслуживания для подбора оптимальных параметров конфигурации.

Стохастические модели многосерверных систем с одновременным занятием и одновременным освобождением заявкой случайного числа серверов рассматривались в ряде работ. Так, в работе [4] рассмотрена двухсерверная система с одновременным обслуживанием серверами одной заявки либо обслуживанием по отдельности двух последовательных заявок. В работе [12] представлена модель многосерверной системы, в которой заявке требуется случайное число процессоров на одно и то же случайное время, и с помощью матрично-аналитического метода проведен численный анализ основных характеристик системы. В работе [2] для двух серверов найдено стационарное распределение состояний системы. В работе [17] предложена модель процесса нагрузки вычислительного кластера, основанная на модификации рекурсии Кифера – Вольфовица. В работе [3] доказан критерий стационарности двухсерверной системы, а в работе [14] матрично-аналитическим методом доказан критерий стационарности модели вычислительного кластера с любым числом серверов, входным потоком марковского типа и экспоненциальным распределением времени обслуживания. В то же время общим базовым предположением указанных моделей является постоянная скорость обслуживания на серверах системы.

В данной работе предлагается новая стохастическая модель вычислительного кластера с управлением скоростью серверов гистерезисного типа, обобщающая ранее предложенную модель процесса нагрузки [17].

Структура работы следующая. В первом разделе предложена стохастическая модель системы массового обслуживания с гистерезисным управлением скоростью обслуживаемых устройств, предложены рекуррентные соотношения для расчета динамики состояния системы, предложен способ построения вектора нагрузки в моменты наступления базовых событий. Во втором разделе представлены результаты численного эксперимента по анализу характеристик системы в зависимости от параметров управления.

СТОХАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КЛАСТЕРА С УПРАВЛЕНИЕМ СКОРОСТЬЮ ОБСЛУЖИВАНИЯ

Рассматривается система обслуживания, имеющая s серверов, которые одновременно могут работать на одной из двух скоростей, каждый при этом выполняя r_1 или r_2 ($\geq r_1$)

единиц работы за единицу времени. На вход системы поступает поток заявок, пусть t_j есть время поступления заявки с номером $j \geq 1$ (где $t_1 = 0$). Заявка j обладает двумя характеристиками: объемом работы $S_j \in \mathbb{R}_+$ и требуемым числом серверов $N_j \in \{1, \dots, c\}$, которые занимаются и освобождаются заявкой одновременно. Если свободных серверов для обслуживания заявки недостаточно либо в системе ожидают обслуживания другие заявки, то пришедшая заявка поступает в общую очередь. Поступление ожидающих заявок на обслуживание происходит в порядке прихода в систему (дисциплина обслуживания First Come First Served, FCFS). Поступившая на обслуживание заявка проводит на серверах время до исчерпания объема работы S_j , при этом в процессе ее обслуживания скорость серверов может меняться. Это означает, что реальное время обслуживания заявки j заранее неизвестно, но, очевидно, лежит в интервале $[S_j/r_2, S_j/r_1]$.

Предполагается, что в системе реализован двухпороговый механизм управления скоростью серверов. Все серверы системы мгновенно переключаются на высокую скорость r_2 , если сумма оставшихся объемов работ заявок, находящихся в системе, включая вновь пришедшую заявку (суммарная работа), превышает наперед заданный порог k_2 . Если же суммарная работа в системе опустится ниже порога $k_1 \leq k_2$, то все серверы системы мгновенно снижают скорость до r_1 . Отметим, что включение высокой скорости r_2 происходит лишь в моменты прихода заявок.

Управление скоростью обслуживающих устройств может оказывать влияние не только на энергопотребление системы, но и на метрики качества обслуживания, такие как среднее число заявок в системе/очереди, среднее время ожидания/пребывания заявки. Для нахождения оптимальной конфигурации системы необходимо определить как целевую функцию (связанную с энергопотреблением системы), так и ограничения, накладываемые на качество обслуживания. Целью дальнейшего анализа является построение математической модели системы и ее верификация методом имитационного моделирования.

Основные рекуррентные соотношения

Для дальнейшего анализа необходимо ввести ряд обозначений. Прежде всего заметим, что в системе возможны три типа *базовых событий*: приход заявки в систему, уход заявки из системы, снижение суммарной работы до уровня k_1 . Важно подчеркнуть, что, в отличие от классической многопроцессорной си-

стемы без управления скоростью обслуживания, в момент ухода заявки может произойти как уменьшение, так и увеличение числа заявок, находящихся на обслуживании (что связано с дополнительным параметром заявки — числом требуемых серверов), причем начать обслуживание могут несколько заявок одновременно. Таким образом, для исследования динамики системы важны все три указанных типа базовых событий. В то же время превышение суммарной работой уровня k_2 возможно лишь в момент прихода очередной заявки, поэтому множество моментов переключения на высокую скорость есть подмножество моментов прихода.

Обозначим T_i — i -й момент наступления базового события в системе. В следующих обозначениях нижний индекс i означает, что объект рассматривается в момент времени T_i . Обозначим в момент времени T_i

- M_i — упорядоченное (в порядке поступления) множество номеров заявок, находящихся в системе;
- $B_i(j)$, $j \in M_i$ — оставшаяся (незавершенная) работа заявки j , находящейся в системе;
- R_i — скорость серверов.

Будем называть $\{M_i, \{B_i(j), j \in M_i\}, R_i\}$ *состоянием системы* в момент времени T_i . Следующие (необходимые для анализа) величины являются производными величинами от состояния системы в момент времени T_i :

- $\mathcal{M}_i = \max_{k \geq 1} \{j_1 < \dots < j_k \in M_i : \sum_{t=1}^k N_{j_t} \leq c\} \subseteq M_i$ — множество номеров заявок, находящихся на обслуживании;
- $W_i = \sum_{j \in M_i} B_i(j)$ — суммарная работа;
- $\nu_i = |M_i|$ — число заявок в системе;
- $Q_i = |M_i \setminus \mathcal{M}_i|$ — число заявок в очереди.

Необходимо подчеркнуть, что определение множества M_i номеров заявок, находящихся на обслуживании, в общем случае *зависит от дисциплины обслуживания*. Изменяя правило включения заявок из M_i в множество M_i , можно изменять дисциплину обслуживания системы без изменения модели.

Определим базис стохастической рекурсии. Будем полагать, что первым событием, наступающим в момент времени $T_1 = t_1 = 0$, явля-

ется приход первой заявки. Тогда

$$\begin{aligned} M_1 &= \{1\}, B_1(1) = S_1, \\ R_1 &= r_1 I\{S_1 \leq k_2\} + r_2 I\{S_1 > k_2\} \\ M_1 &= \{1\}, W_1 = S_1, \nu_1 = 1, Q_1 = 0, \end{aligned}$$

где $I\{\cdot\}$ есть индикатор события.

Изменение состояния системы при переходе от события i к событию $i + 1$ определим с помощью рекуррентных соотношений. Момент времени T_{i+1} наступления события с номером $i + 1$ можно определить как момент наступления ближайшего из трех событий: ближайшего прихода заявки, ближайшего потенциального ухода заявки и ближайшего потенциального момента включения пониженной скорости (полагаемого равным бесконечности, если суммарная работа ниже уровня k_1) соответственно, т. е.

$$T_{i+1} = \min \left\{ t_{A(T_i)+1}, T_i + \min_{j \in \mathcal{M}_i} \frac{B_i(j)}{R_i}, T_i + \frac{W_i - k_1}{I\{W_i > k_1\}R_i} \right\}, \quad (1)$$

где $A(t) = j$, $t_j \leq t < t_{j+1}$, $j \geq 1$ есть число приходов в $[0, t]$. Можно заметить, что $A(T_i) = j$, если $T_i = t_j$ для некоторого j . Подчеркнем, что указанные моменты наступления событий являются потенциальными, поскольку скорость обслуживания до этих моментов может измениться, тем самым изменив время наступления событий. Обозначим $\tau_i = T_{i+1} - T_i$ интервал времени между событиями, $i \geq 1$.

Для удобства введем следующие индикаторы: I_i^A — индикатор того, что момент T_i есть приход заявки, т. е. $I_i^A = I\{T_i = t_{A(T_i)}\}$; I_i^D — индикатор ухода заявки в момент T_i (если минимум в (1) реализуется на втором элементе) и I_i^S — индикатор включения пониженной скорости (из-за снижения суммарной работы до уровня k_1). Отметим, что $I_i^A + I_i^D + I_i^S = 1$. Можно считать, что указанные индикаторы являются *метками*, связанными с моментами событий T_i , что позволяет единообразно определить изменения состояния системы в моменты наступления базовых событий.

Множество номеров заявок в системе M_{i+1} в момент T_{i+1} наступления $i + 1$ -го события может измениться в связи с уходом либо приходом очередной заявки следующим образом:

$$\begin{aligned} M_{i+1} &= M_i \cup \{A(T_{i+1}) : I_{i+1}^A = 1\} \setminus \\ &\setminus \{d_{i+1} : I_{i+1}^D = 1\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где d_{i+1} есть номер потенциально уходящей заявки в момент T_{i+1} , определяемый следующим

образом:

$$d_{i+1} = \arg \min_{j \in \mathcal{M}_i} \frac{B_i(j)}{R_i}. \quad (3)$$

Если же индикатор соответствующего события (приход/уход заявки) равен 0, то соответствующее одноэлементное множество считаем пустым.

Следующее соотношение определяет величину незавершенной работы заявки j , находящейся в системе в момент T_{i+1} :

$$B_{i+1}(j) = \begin{cases} B_i(j) - \tau_i R_i, & j \in \mathcal{M}_i \cap M_{i+1} \\ S_j, & j \in M_{i+1} \setminus \mathcal{M}_i. \end{cases} \quad (4)$$

Таким образом, для заявки j , находившейся на обслуживании в момент T_i , работа $B_i(j)$ уменьшается к моменту T_{i+1} пропорционально скорости R_i . Для заявок, ожидающих в очереди, как и для вновь пришедшей заявки (если был приход заявки), работа равна первоначальной (зафиксированной в момент прихода заявки). Уходящая в момент T_{i+1} заявка исключается из дальнейшего рассмотрения. Заметим, что

$$M_{i+1} = (M_{i+1} \setminus \mathcal{M}_i) \cup (\mathcal{M}_i \cap M_{i+1}),$$

т. е. $B_{i+1}(j)$ в (4) полностью определен для всех $j \in M_{i+1}$.

Скорость обслуживания на всех процессорах системы будет определяться следующим соотношением:

$$\begin{aligned} R_{i+1} &= r_1 I\{W_{i+1} \leq k_1\} + r_2 I\{W_{i+1} > k_2\} \\ &+ R_i I\{k_1 < W_{i+1} \leq k_2\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Напомним, что величина W_{i+1} может быть определена через состояние системы в момент T_i с использованием рекурсии (4). Отметим, что в частном случае $k_1 = k_2$ скорость обслуживания становится производной величиной от состояния системы, поскольку зависит лишь от текущего состояния системы (не от предыдущего значения скорости).

Характеристики системы

Определим некоторые характеристики *качества обслуживания* предложенной модели. Для заявки j момент поступления на обслуживание можно определить следующим образом:

$$t_j^S = \min\{T_i \geq t_j : j \in \mathcal{M}_i\}. \quad (6)$$

Подчеркнем, что момент t_j^S совпадает либо с моментом прихода t_j заявки j , либо с моментом ухода заявки, находившейся в системе в момент t_j , уход которой освободит ожидаемые заявкой j ресурсы.

При этом время ухода самой заявки j можно определить как

$$t_j^D := \{T_i > t_j^S : j = d_i, I_i^D = 1\}. \quad (7)$$

С помощью (6), (7) можно определить такие важные характеристики качества обслуживания заявки $j \geq 1$, как:

- $t_j^S - t_j$ — время ожидания заявки;
- $t_j^D - t_j^S$ — время обслуживания заявки;
- $t_j^D - t_j$ — время отклика системы;
- $\frac{t_j^D - t_j}{t_j^D - t_j^S}$ — замедление заявки;
- $\max \left[\frac{t_j^D - t_j}{\max(t_j^D - t_j^S, T_0)}, 1 \right]$ — усеченное сверху замедление заявки (для фиксированного $T_0 > 0$);
- $\max \left[\frac{t_j^D - t_j}{N_j \max(t_j^D - t_j^S, T_0)}, 1 \right]$ — усеченное сверху нормированное замедление заявки.

Отметим, что замедление заявки (отношение общего времени пребывания заявки в системе ко времени ее обслуживания) является характеристикой, специфичной для вычислительных кластеров [5]. Усеченное сверху, как и нормированное по количеству процессоров замедление являются вариантами характеристики замедления заявки, исключая выбросы исходной характеристики при малых значениях времени обслуживания заявки [5, 16].

Определим теперь характеристики *производительности системы*. Важной характеристикой, связанной с дисциплиной обслуживания, является потерянная работа. При непустой очереди данная характеристика отражает простой серверов, вызванный их нехваткой для заявки, ожидающей в начале очереди (когда требуемое число серверов превышает число свободных). Определим число свободных серверов в момент T_i :

$$\psi_i = c - \sum_{j \in \mathcal{M}_i} N_j, \quad i \geq 1. \quad (8)$$

Тогда потерянная работа за интервал $[T_i, T_{i+1})$ равна

$$\psi_i \tau_i R_i I\{Q_i > 0\}, \quad i \geq 1. \quad (9)$$

Таким образом, потерянная работа является суммарной работой, которая могла быть выполнена на простаивающих серверах, при условии, что очередь системы непуста.

Еще одна важная характеристика производительности — уровень загрузки системы. Будем считать, что уровень загрузки равен 1, если в системе есть очередь. При этом простаивающая мощность, если она имеется, хотя и

свободна, но не выполняет полезной работы. Если же очередь пуста, то уровень загрузки является отношением числа занятых к общему числу серверов. Таким образом, уровень загрузки в момент T_i равен

$$\frac{c - \psi_i I\{Q_i = 0\}}{c}, \quad i \geq 1. \quad (10)$$

Наконец, рассмотрим *энергопотребление системы*. Если в момент T_i в системе находится только одна заявка и эта заявка покидает систему, то момент T_i является моментом опустошения системы. Обозначим $I_i^0 = I\{I_i^D = 1, \nu_i = 0\}$ индикатор опустошения системы в момент T_i . Очевидно, тогда в момент T_{i+1} возможен только приход заявки, а интервал $[T_i, T_{i+1})$ является интервалом простоя системы. В ином случае (т. е. при $\nu_i > 0$) система потратит за время τ_i энергию, соответствующую скорости R_i . Обозначим $e(R) = e_1 I\{R = r_1\} + e_2 I\{R = r_2\}$ функцию стоимости активного режима, где e_j есть стоимость единицы времени работы на скорости $r_j, j = 1, 2$. Тогда энергопотребление за интервал $[T_i, T_{i+1})$ будет равно

$$E_i := \tau_i [e_0 I_i^0 + e(R_i)(1 - I_i^0)], \quad (11)$$

где e_0 есть стоимость единицы времени работы в режиме простоя.

Предложенные рекуррентные соотношения (2)–(5) для вычисления последовательных состояний системы позволяют формулировать задачи оптимизации с ограничениями как на производительность системы, так и на качество обслуживания заявок. В качестве примера приведем постановку задачи минимизации среднего энергопотребления при выполнении фиксированного числа заявок N_0 , с учетом допустимого увеличения средней суммарной работы (*деградации* качества обслуживания). Обозначим среднее энергопотребление в системе с одним порогом переключения $k_1 = k_2 = k$

$$E(k) = \frac{\sum_{i=1}^{N(k)} E_i}{T_{N(k)}}, \quad (12)$$

где $N(k) \leq 3N_0$ есть число базовых событий, наступивших в системе при обслуживании N_0 заявок. При этом $E(0)$ есть среднее энергопотребление в системе без управления, работающей на высокой скорости r_2 . Обозначим среднюю суммарную работу в моменты прихода заявок

$$W(k) = \frac{\sum_{i=1}^{N(k)} W_i}{N(k)}. \quad (13)$$

Тогда задача минимизации энергопотребления при ограничении на качество обслуживания

может быть сформулирована следующим образом:

$$E(k) \rightarrow \min_{k \geq 0},$$

$$W(k) \leq (1 + \varepsilon)W(0),$$

где $\varepsilon \geq 0$ — неотрицательная константа, характеризующая деградацию качества обслуживания. Во втором разделе данной статьи представлены результаты численного эксперимента по решению данной задачи оптимизации.

Вектор нагрузки на серверы

Важной характеристикой системы является нагрузка (незавершенная работа на серверах) в момент T_i . Для исследования процесса нагрузки многопроцессорной системы применяется вектор Кифера – Вольфовица [11]. Процесс нагрузки представляет собой оставшуюся работу на серверах в момент непосредственно перед приходом очередной заявки. Отметим, что диспетчеризация заявки на серверы при построении вектора происходит сразу после прихода, поскольку заявка направляется на наименее занятый сервер. Как правило, серверы являются идентичными, и порядок серверов внутри вектора соответствует возрастанию оставшейся работы. Модификация рекурсии Кифера – Вольфовица для построения процесса нагрузки вычислительного кластера в моменты прихода заявок предложена в работе [17]. В данном разделе предложен метод построения вектора нагрузки на основе состояния системы в каждый момент времени T_i .

Рассмотрим множество неотрицательных упорядоченных векторов длины c :

$$Z = \{x \in \mathbb{R}_+^c : x_1 \leq \dots \leq x_c\}.$$

Определим отображение $\sigma : Z \times \{1, \dots, c\} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow Z$, осуществляющее *планирование заявки* (диспетчеризацию заявки на серверы). Отметим, что это отображение зависит от дисциплины обслуживания. Пусть $W \in Z$ — вектор нагрузки (незавершенной работы) на серверах. Предположим, что необходимо запланировать обслуживание заявки с объемом работы $b \in \mathbb{R}_+$ и требуемым числом серверов $n \in \{1, \dots, c\}$. В предположениях модели (уход на обслуживание в порядке поступления, дисциплина FCFS)

$$\sigma := \sigma[W, n, b] =$$

$$= \mathcal{R}(\underbrace{W_n + b, \dots, W_n + b}_n, W_{n+1}, \dots, W_c), \quad (14)$$

где отображение $\mathcal{R}(\cdot)$ упорядочивает компоненты вектора в порядке возрастания. Таким

образом, планирование заявки с объемом работы b и требуемым числом серверов n на обслуживание осуществляется на n наименее занятых серверов в системе, при этом заявке необходимо ожидать освобождения наиболее занятого из них (ожидать выполнения работы объема W_n).

Для получения вектора нагрузки в момент T_i необходимо последовательно применить планирование ко всем заявкам $j_1, \dots, j_{|M_i|} \in M_i$, находящимся в системе. Результатом будет вектор нагрузки $\mathcal{W}_i(|M_i|)$, получаемый с помощью следующего соотношения:

$$\mathcal{W}_i(k) = \sigma[\mathcal{W}_i(k-1), B_i(j_k), N_{j_k}], \quad (15)$$

где $k = 1, \dots, |M_i|$, а базис индукции представлен нулевым вектором $\mathcal{W}_i(0) := \mathbf{0} \in Z$. Иными словами, (15) означает, что планирование заявки $j_k \in M_i$ осуществляется с учетом текущей нагрузки в результате диспетчеризации заявок j_1, \dots, j_{k-1} , а также оставшегося времени обслуживания $B_i(j_k)$ и числа требуемых серверов N_{j_k} . При этом заявке j_k необходимо дождаться выполнения величины работы $[\mathcal{W}_i(k-1)]_{N_{j_k}}$ (т. е. N_{j_k} -й компоненты вектора нагрузки $\mathcal{W}_i(k-1)$) наиболее занятого из требующихся ей серверов.

Важно отметить связь предложенной модели с ранее исследованной моделью вычислительного кластера без управления скоростью обслуживания. В работе [15] для исследования критерия стационарности модели вычислительного кластера применялся матрично-аналитический метод. При этом состояние системы представляло собой двухкомпонентный марковский процесс $\{X(t), Y(t), t \geq 0\}$, где $X(t)$ есть число заявок в системе в момент t , а $Y(t)$ есть число серверов, которые требуются $\min\{X(t), c\}$ заявкам с наименьшими номерами среди находящихся в системе. Для данного процесса был предложен критерий стационарности в следующем виде:

$$\lambda \mathbb{E}S \sum_{i=1}^c \frac{1}{i} \sum_{j=i}^c p_j^{*i} \sum_{t=c-j+1}^s p_t < 1, \quad (16)$$

где

$$p_t = \mathbb{P}\{N = t\}, \quad t = 1, \dots, c,$$

а p_j^{*i} есть j -я компонента i -кратной дискретной свертки вектора $p := (p_1, \dots, p_c)$ с самим собой, т. е. $p_j^{*i} = \mathbb{P}(\hat{N}_1 + \dots + \hat{N}_i = j)$, где \hat{N}_i есть независимые копии с.в. N . (Здесь S — типичный объем работы заявки, а N — типичное число требуемых серверов.) Для получения критерия стационарности исследовалась интенсивность перехода процесса между состояниями в моменты прихода и ухода заявок.

Отметим, что предложенная модель позволяет получить значения процесса $\{X(t), Y(t)\}$ в указанные базовые моменты T_i . Действительно, предположим, что $k_1 = k_2 = 0$ (или $k_1 = k_2 = \infty$), что означает, что система всегда работает на скорости r_2 (или r_1). Тогда

$$\begin{aligned} X(T_i) &= |M_i|, \\ Y(T_i) &= (N_{j_1}, \dots, N_{j_{\min(c, |M_i|)}}), \\ j_1, \dots, j_{\min(c, |M_i|)} &\in M_i, \quad i \geq 1. \end{aligned}$$

Это означает, что для исследования стационарности модели, работающей на постоянной скорости, можно применять ранее полученный критерий стационарности (16) (для пуассоновского входного потока и экспоненциального времени обслуживания).

Таким образом, предложенная модель позволяет исследовать метрики качества обслуживания вычислительного кластера с управлением скоростью обслуживающих устройств для определения оптимальной конфигурации, минимизирующей энергопотребление при контроле за качеством обслуживания.

Заметим, что для минимизации используемой памяти при проведении численных экспериментов состояние системы можно хранить в виде следующего множества:

$$\begin{aligned} \{T_i; I_i^A, I_i^D, I_i^S; R_i; \\ \{A(T_{i+1}) : I_{i+1}^A = 1\} \cup \{\delta_{i+1} : I_{i+1}^D = 1\}\}, i \geq 1. \end{aligned} \quad (17)$$

Таким образом, хранится только время наступления события, тип события и, при необходимости, номер приходящей/уходящей заявки. Такая запись позволяет по индукции восстановить состояние системы в каждый момент времени T_i .

ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Для иллюстрации возможности анализа характеристик системы с помощью разработанной модели проведены численные эксперименты. В экспериментах рассматривается система, состоящая из $c = 10$ серверов, на вход которой поступает пуассоновский поток заявок интенсивности $\lambda = 1$. Размер работы распределен экспоненциально с $ES = 1$. Количество серверов, требующихся заявке, имеет равномерное распределение $p_t = 1/c$, $t = 1, \dots, c$. Высокая и низкая скорость обслуживания выбирались следующим образом: в первом эксперименте критерий стационарности (16) был выполнен как для системы, работающей только на скорости r_1 , так и для системы, работающей на скорости r_2 . Во втором эксперименте критерий (16) был нарушен для системы, работающей на скорости r_1 . Таким образом, использовались следующие пары значений: для

первого эксперимента $r_1 = 0.9, r_2 = 1.5$; для второго эксперимента $r_1 = 0.6, r_2 = 1.5$. В каждом эксперименте фиксировалось значение $k_1 = k_2 = k \in \{1, \dots, 50\}$, затем генерировалось 100 траекторий процесса обслуживания, в каждой траектории проходило обслуживание 20 000 заявок. Стоимость энергопотребления в режиме простоя, на низкой и высокой скорости была выбрана следующим образом: $e_0 = 1, e_1 = 2, e_2 = 4$. Полученное в результате имитационного моделирования значение среднего энергопотребления (12) и средней суммарной работы (13) усреднялось по всем траекториям для данного k . Расчеты производились на кластере ЦКП КарНЦ РАН «Центр высокопроизводительной обработки данных». Результаты экспериментов представлены графически в форме зависимости $E(k)$ и $W(k)$ от $k = 1, \dots, 50$. Приведем для сравнения базовые значения энергопотребления и качества обслуживания в системе без управления, работающей на скорости r_2 (напомним, при этом $k = 0$): $E(0) = 2.822888$, $W(0) = 1.636116$; и на скорости r_1 ($k = \infty$): $E(\infty) = 1.892117$, $W(\infty) = 6.528911$.

На рисунке 1 представлен результат первого численного эксперимента. Видно, что с ростом значения порога переключения скорости k средние значения энергопотребления и качества обслуживания стремятся к $E(\infty)$ и $W(\infty)$ соответственно.

На рисунке 2 представлен результат второго численного эксперимента. Видно, что с ростом значения порога переключения скорости k среднее энергопотребление стремится к постоянной величине из интервала $(E(0), E(\infty))$. В то же время в связи с нестационарностью системы, работающей на низкой скорости, средняя суммарная работа линейно растёт.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена модель вычислительного кластера на основе рекуррентных соотношений, описывающих последовательные изменения состояния системы. Эта модель позволяет формализовать широкий круг систем с управлением скоростью обслуживания. Небольшие изменения ключевых соотношений модели позволяют охватить системы с различными дисциплинами обслуживания. Кроме того, модель может быть адаптирована для исследования эффекта от применения режимов пониженного энергопотребления АСРІ. В дальнейшем планируется исследовать монотонность характеристик системы относительно управляющих последовательностей и ключевых параметров.

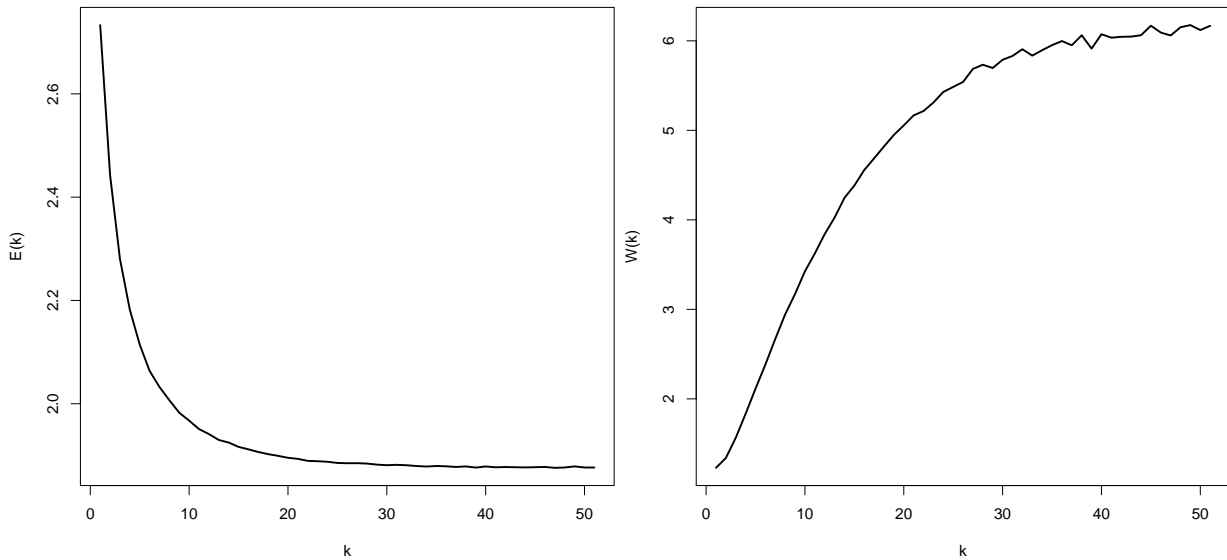


Рис. 1. Среднее энергопотребление (левая часть), средняя суммарная работа (правая часть) в 10-серверной системе. Критерий стационарности выполнен для системы при $r_1 = 0.9$ и $r_2 = 1.5$

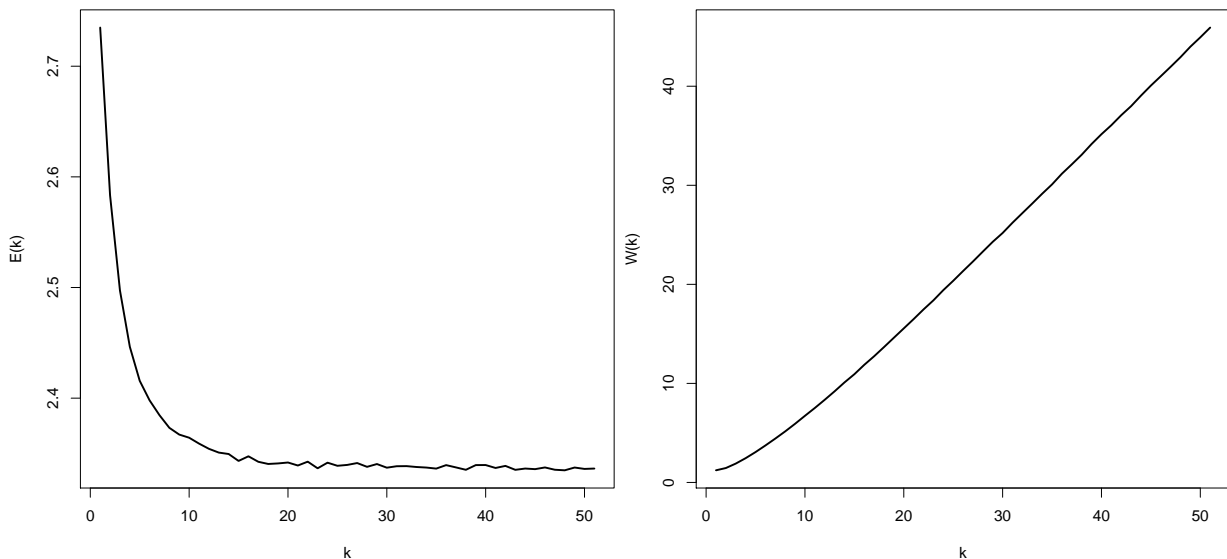


Рис. 2. Среднее энергопотребление (левая часть), средняя суммарная работа (правая часть) в 10-серверной системе. Критерий стационарности нарушен при скорости $r_1 = 0.6$ и выполнен при скорости $r_2 = 1.5$

Работа поддержана грантом Президента РФ МК-1641.2017.1, грантами РФФИ 15-07-02341, 15-07-02354, 15-07-02360, 16-07-00622, 15-29-07974.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bekker R., Borst S. C., Voxxa O. J., Kella O. Queues with workload-dependent arrival and service rates // Queueing Systems. 2004. Vol. 46. P. 537-556. doi: 10.1023/B:QUES.0000027998.95375.ee

2. Brill P. H., Green L. Queues in which customers receive simultaneous service from a random number of servers: a system point approach // Management Science. 1984. Vol. 30, no. 1. P. 51-68. doi: 10.1287/mnsc.30.1.51

3. Chakravarthy S. R., Karatza H. D. Two-server parallel system with pure space sharing and Markovian arrivals // Computers & Operations Research. 2013. Vol. 40, no. 1. P. 510-519. doi: 10.1016/j.cor.2012.08.002

4. *Evans R. V.* Queuing when Jobs Require Several Services which Need Not be Sequenced // *Management Science*. 1964. Vol. 10, no. 2. P. 298–315. doi: 10.1287/mnsc.10.2.298
5. *Feitelson D. G.* Metrics for parallel job scheduling and their convergence // *Lecture Notes in Computer Science. Job Scheduling Strategies for Parallel Processing*. 2001. Vol. 2221. P. 188–205. doi: 10.1007/3-540-45540-X_11
6. *Feitelson D. G.* Workload modeling for computer systems performance evaluation. Cambridge University Press, 2015. doi: 10.1017/CBO9781139939690
7. *Gandhi A., Harchol-Balter M., Das R., Lefurgy C.* Optimal power allocation in server farms // *ACM SIGMETRICS Performance Evaluation Review*. 2009. Vol. 37. P. 157–168. doi: 10.1145/1555349.1555368
8. *Gebrehiwot M. E., Aalto S. A., Lassila P.* Optimal sleep-state control of energy-aware M/G/1 queues // *Proceed. of the 8th Int. Conf. on Performance Evaluation Methodologies and Tools*. 2014. P. 82–89. doi: 10.4108/icst.valuetools.2014.258149
9. *Horvath T., Skadron K.* Multi-mode energy management for multi-tier server clusters // *Proceed. of the 17th Int. Conf. on Parallel Architectures and Compilation Techniques*. 2008. P. 270–279. doi: 10.1145/1454115.1454153
10. *Hyytiä E., Righter R., Aalto S.* Task assignment in a heterogeneous server farm with switching delays and general energy-aware cost structure // *Performance Evaluation*. 2014. Vol. 75–76. P. 17–35. doi: 10.1016/j.peva.2014.01.002
11. *Kiefer J., Wolfowitz J.* On the theory of queues with many servers // *Transactions of the American Mathematical Society*. 1955. P. 1–18. doi: 10.1090/S0002-9947-1955-0066587-3
12. *Kim S. S.* M/M/s Queueing System Where Customers Demand Multiple Server Use, Ph.D. Dissertation, Southern Methodist University, 1979.
13. *Morozov E., Rumyantsev A.* A State-Dependent Control for Green Computing // *Lecture Notes in Electrical Engineering. Information Sciences and Systems*. 2015. Vol. 363. P. 57–67. doi: 10.1007/978-3-319-22635-4_5
14. *Morozov E., Rumyantsev A.* Stability Analysis of a MAP/M/s Cluster Model by Matrix-Analytic Method // *Lecture Notes in Computer Science. Computer Performance Engineering: 13th European Workshop*. 2016. Vol. 9951. P. 63–76. doi: 10.1007/978-3-319-46433-6_5
15. *Rumyantsev A., Morozov E.* Stability criterion of a multiserver model with simultaneous service // *Annals of Operations Research*. 2017 (First Online: 2015). Vol. 252, no. 1. P. 29–39. doi: 10.1007/s10479-015-1917-2
16. *Zotkin D., Keleher P. G.* Job-length estimation and performance in backfilling schedulers // *Proceed. of the Eighth Int. Symposium on High Performance Distributed Computing*. 1999. P. 236–243. doi: 10.1109/HPDC.1999.805303
17. *Морозов Е. В., Румянцев А. С.* Модели многосерверных систем для анализа вычислительного кластера // *Труды Карельского научного центра РАН*. 2011. № 5. С. 75–85.

Поступила в редакцию 09.06.2017

REFERENCES

1. *Bekker R., Borst S. C., Bozma O. J., Kella O.* Queues with workload-dependent arrival and service rates. *Queueing Systems*. 2004. Vol. 46. P. 537–556. doi: 10.1023/B:QUES.0000027998.95375.ee
2. *Brill P. H., Green L.* Queues in which customers receive simultaneous service from a random number of servers: a system point approach. *Management Science*. 1984. Vol. 30, no. 1. P. 51–68. doi: 10.1287/mnsc.30.1.51
3. *Chakravarthy S. R., Karatza H. D.* Two-server parallel system with pure space sharing and Markovian arrivals. *Computers & Operations Research*. 2013. Vol. 40, no. 1. P. 510–519. doi: 10.1016/j.cor.2012.08.002
4. *Evans R. V.* Queuing when Jobs Require Several Services which Need Not be Sequenced. *Management Science*. 1964. Vol. 10, no. 2. P. 298–315. doi: 10.1287/mnsc.10.2.298
5. *Feitelson D. G.* Metrics for parallel job scheduling and their convergence. *Lecture Notes in Computer Science. Job Scheduling Strategies for Parallel Processing*. 2001. Vol. 2221. P. 188–205. doi: 10.1007/3-540-45540-X_11
6. *Feitelson D. G.* Workload modeling for computer systems performance evaluation. Cambridge University Press, 2015. doi: 10.1017/CBO9781139939690
7. *Gandhi A., Harchol-Balter M., Das R., Lefurgy C.* Optimal power allocation in server farms. *ACM SIGMETRICS Performance Evaluation Review*. 2009. Vol. 37. P. 157–168. doi: 10.1145/1555349.1555368
8. *Gebrehiwot M. E., Aalto S. A., Lassila P.* Optimal sleep-state control of energy-aware M/G/1 queues. *Proceed. of the 8th Int. Conf. on Performance Evaluation Methodologies and Tools*. 2014. P. 82–89. doi: 10.4108/icst.valuetools.2014.258149

9. Horvath T., Skadron K. Multi-mode energy management for multi-tier server clusters. *Proceed. of the 17th Int. Conf. on Parallel Architectures and Compilation Techniques*. 2008. P. 270–279. doi: 10.1145/1454115.1454153
10. Hyytiä E., Righter R., Aalto S. Task assignment in a heterogeneous server farm with switching delays and general energy-aware cost structure. *Performance Evaluation*. 2014. Vol. 75–76. P. 17–35. doi: 10.1016/j.peva.2014.01.002
11. Kiefer J., Wolfowitz J. On the theory of queues with many servers. *Transactions of the American Mathematical Society*. 1955. P. 1–18. doi: 10.1090/S0002-9947-1955-0066587-3
12. Kim S. S. M/M/s Queueing System Where Customers Demand Multiple Server Use, Ph.D. Dissertation, Southern Methodist University, 1979.
13. Morozov E., Rumyantsev A. A State-Dependent Control for Green Computing. *Lecture Notes in Electrical Engineering. Information Sciences and Systems*. 2015. Vol. 363. P. 57–67. doi: 10.1007/978-3-319-22635-4_5
14. Morozov E., Rumyantsev A. Stability Analysis of a MAP/M/s Cluster Model by Matrix-Analytic Method. *Lecture Notes in Computer Science. Computer Performance Engineering: 13th European Workshop*. 2016. Vol. 9951. P. 63–76. doi: 10.1007/978-3-319-46433-6_5
15. Rumyantsev A., Morozov E. Stability criterion of a multiserver model with simultaneous service. *Annals of Operations Research*. 2017 (First Online: 2015). Vol. 252, no. 1. P. 29–39. doi: 10.1007/s10479-015-1917-2
16. Zotkin D., Keleher P. G. Job-length estimation and performance in backfilling schedulers. *Proceed. of the Eighth Int. Symposium on High Performance Distributed Computing*. 1999. P. 236–243. doi: 10.1109/HPDC.1999.805303
17. Morozov E. V., Rumyantsev A. S. Modeli mnogoservernykh sistem dlya analiza vychislitel'nogo klastera [Multi-server models to analyze high performance cluster]. *Trudy KarNTs RAN [Trans. KarRC RAS]*. 2011. No. 5. P. 75–85.

Received June 9, 2017

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

Румянцев Александр Сергеевич
 научный сотрудник
 Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН
 ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
 Республика Карелия, Россия, 185910
 эл. почта: ar0@krc.karelia.ru
 тел.: (8142) 763370

Калинина Ксения Алексеевна
 аспирант
 Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН
 ул. Пушкинская, 11, Петрозаводск,
 Республика Карелия, Россия, 185910
 эл. почта: kalininaksenia90@gmail.com
 тел.: (8142) 763370

Морозова Таисия Евсеевна
 студентка
 Петрозаводский государственный университет
 пр. Ленина, 33, Петрозаводск, Республика Карелия,
 Россия, 185910
 эл. почта: tiamorozova@mail.ru
 тел.: (8142) 719606

CONTRIBUTORS:

Rumyantsev, Alexander
 Institute of Applied Mathematical Research,
 Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences
 11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk,
 Karelia, Russia
 e-mail: ar0@krc.karelia.ru
 tel.: (8142) 763370

Kalinina, Ksenia
 Institute of Applied Mathematical Research,
 Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences
 11 Pushkinskaya St., 185910 Petrozavodsk,
 Karelia, Russia
 e-mail: kalininaksenia90@gmail.com
 tel.: (8142) 763370

Morozova, Taisia
 Petrozavodsk State University
 33 Lenin Pr., 185910 Petrozavodsk, Karelia, Russia
 e-mail: tiamorozova@mail.ru
 tel.: (8142) 719606

УДК 519.115:519.2

КОМБИНАТОРНЫЙ АНАЛИЗ СХЕМЫ ДОМИНО И СЛУЧАЙ ФИКСИРОВАННОЙ МИНИМАЛЬНОЙ ЦИФРЫ НА ФИШКЕ ДОМИНО

Н. Ю. Энатская

*Московский институт электроники и математики
Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики»*

Определяется схема домино как схема случайного заполнения фишки обобщенного домино с r концами и n цифрами от 0 до $n - 1$ на концах фишек всех возможных составов с повторениями без учета их порядка. Проводится исследование этой схемы и аналогичной с фиксированной минимальной цифрой $\geq m$ в исходе случайного выбора фишки из полного набора домино по следующим направлениям перечислительной комбинаторики: построения процедуры перечисления нумерованных исходов схемы, определения их числа, решения для них задачи нумерации (т. е. установления взаимно-однозначного соответствия между номерами и видами исходов схемы), нахождения их вероятностного распределения и моделирования возможных исходов.

Ключевые слова: схема сочетаний с повторением; минимальная цифра; схема домино; моделирование.

N. Yu. Enatskaya. COMBINATORIAL ANALYSIS OF THE DOMINOES SCHEME AND THE CASE OF FIXED MINIMAL FIGURE ON A DOMINO TILE

The dominoes scheme is defined as a scheme of random tiling with poliomino tiles with r ends and n figures from 0 to $(n - 1)$ on the ends of tiles of all possible compositions with repetitions, regardless of their order. This scheme is studied, together with an analogous one, with a fixed minimal figure $r \geq m$ at the outcome of a random choice of a tile from a complete domino set, using the following ways of enumerative combinatorics: design of the enumeration procedure for the numbered outcomes of the scheme, determination of their number, solution of the corresponding numeration problem (i.e. establishment of one-to-one correspondence between numbers and types of the outcomes of the scheme), finding of their probabilistic distribution and modeling of their possible outcomes.

Key words: scheme of combinations with repetitions; minimal figure; dominoes scheme; modeling.

ВВЕДЕНИЕ

Рассматривается два подхода к анализу схемы домино на основе прямого непосредственного перечисления ее исходов или с пе-

ресчетом результатов исследования в [8] схемы сочетаний. Схема домино с данным выше ограничением изучается по тем же, указанным в аннотации, направлениям с использованием результатов схемы домино без ограничений.

В исследованиях используются результаты анализа схемы сочетаний и изучается связанная с ней схема сочетаний с повторением. Схема сочетаний возникает при выборе r элементов из n различных элементов без учета их порядка или при размещении r неразличимых частиц не более чем по одной по n различным ячейкам и является одной из наиболее распространенных комбинаторных схем, широко используемой в теории и практике (см. [1]–[7]). Например, интерпретация размещения частиц по ячейкам схемы сочетаний используется в статистике Ферми – Дирака [6], а при неограниченном числе частиц в ячейке – в статистике Бозе – Эйнштейна и является в этом случае схемой сочетаний с повторениями.

Схема сочетаний участвует во многих важных распространенных математических формулах: биноме Ньютона, биномиальной схеме и биномиальном распределении вероятностей, в выражениях для чисел исходов многих комбинаторных схем и т. д.

Число исходов схемы сочетаний есть $C_n^r = n!/r!(n-r)!$. (В схеме сочетаний с повторениями число исходов – C_{n+r-1}^r).

Свойства сочетаний подробно рассмотрены, например, в [6].

Производящие функции последовательности чисел C_n^r и C_{n+r-1}^r приведены в [2] и [6]:

$$\sum_{r=0}^n C_n^r x^r = (1+x)^n;$$

$$\sum_{r=0}^{\infty} C_{n+r-1}^r x^r = (1-x)^{-n}.$$

Моделирование исходов схемы сочетаний приведено в [7].

В [8] проведены исследования схемы сочетаний по указанным в аннотации для схемы сочетаний с повторением направлениям методом графов на основе визуального перечисления всех ее исходов с возможностями учета различных ограничений в ней.

Схема сочетаний с повторением с параметрами n и r известна в двух интерпретациях (в терминах выбора и размещений): это – 1) число различных выборов из n различных (нумерованных) элементов по r с возвращением и без учета их порядка или – 2) число размещений r неразличимых шаров по n различным ящикам. Число исходов схемы $N^*(n, r)$ известно и равно C_{n+r-1}^r . В случае $r \geq n$ число исходов схемы выбора, в которых присутствуют все n элементов, или в схеме размещений шаров по ячейкам – число описанных размещений по ящикам без пустых ящиков есть C_{r-1}^{n-1} .

Предложим еще одну наглядную интерпретацию схемы – 3) это заполнение фишек (обобщенного) домино, использующего n цифр с r концами, заполняемыми по правилам обычного традиционного домино, т. е. всеми комбинациями r из n данных цифр с возможными их повторениями. Будем считать имеющими значение только составы цифр на фишках домино, но не их порядок. Поэтому для удобства сравнения фишек будем задавать их форму в виде звездочек, на концах которых стоят цифры, и располагать их в порядке возрастания по часовой стрелке. Тогда число фишек домино есть C_{n+r-1}^r , а при $r \geq n$ число фишек, содержащих все n цифр, есть C_{r-1}^{n-1} .

Введем обозначения для вида исхода схемы. Так как порядок элементов в исходе схемы (фишке домино) не имеет значения, для стандартности и удобства сравнения будем представлять его в виде вектора с компонентами выбранных r цифр на фишке домино в неубывающем порядке $R^{(r)} = (a_1, \dots, a_r)$, определяемом соответствующим вектором номеров исходов в пучках графа их перечисления $\bar{n} = (n_1, n_2, \dots, n_r)$. (Используемые в домино цифры идут подряд, начиная с нуля.) Размером фишки домино будем считать число ее концов.

Будем проводить намеченные исследования в терминах «домино» двумя способами: непосредственным анализом ее исходов или с использованием соответствующих результатов из [8] для схемы сочетаний.

1. НЕПОСРЕДСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ СХЕМЫ ДОМИНО

1.1. Перечисление исходов схемы домино

Для наглядности графом перечисления всех фишек домино представим пошаговую процедуру последовательного поединичного увеличения числа их концов от 1 до заданного значения r , нумеруя исходы в порядке роста чисел A , описывающих фишки домино промежуточных размеров с фиксацией на первом шаге значений минимальных цифр на них и с последующим равновероятным добавлением на каждом шаге всех возможных допустимых цифр, не меняющих ранее установленных минимумов.

Приведем примеры построения графов перечисления фишек домино.

Пример 1. а) $n = 7, r = 2$ (традиционное домино);

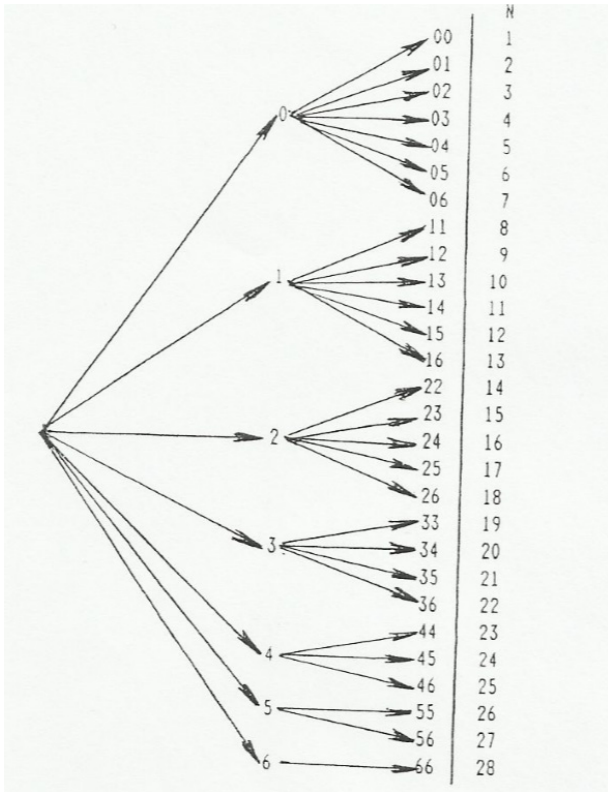


Рис. 1. Граф перечисления фишек домино ($n = 7$, $r = 2$)

б) $n = 4$, $r = 3$.

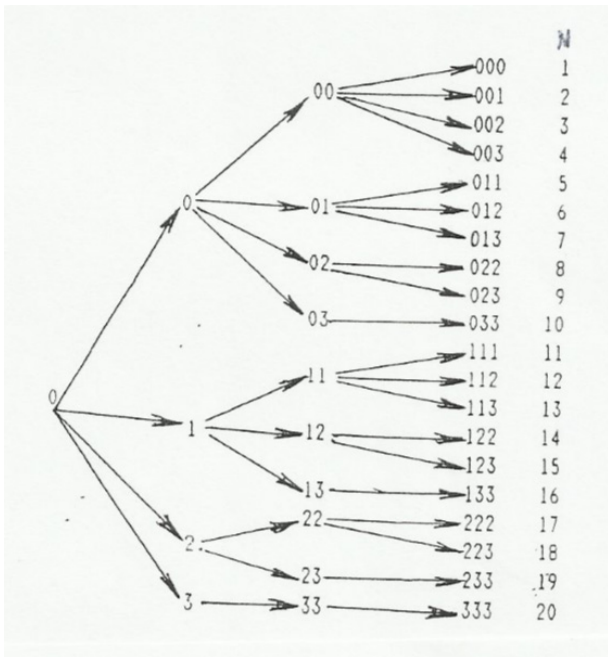


Рис. 2. Граф перечисления фишек домино ($n = 4$, $r = 3$)

1.2. Структура графа перечисления исходов схемы домино

Исследование пучковой структуры графа потребует для проведения дальнейших, определенных в аннотации направлений прямого анализа схемы домино или схемы сочетаний с повторением без ссылок на результаты аналогичных исследований схемы сочетаний в [8].

Назовем число исходов из одного состояния в графе размером пучка, а численности совокупностей исходов подряд идущих пучков размерами, убывающими до 1, – монотонным участком размером общего числа входящих в него исходов. Тогда в этих терминах на основе визуального анализа приведенных на рисунках 1 и 2 графов перечисления исходов схемы с конкретными числовыми параметрами опишем закономерности его структуры:

1) общее число исходов схемы на i -м шаге ($i = \overline{1, r}$) равно C_{n+i-1}^i ;

2) число пучков на i -м шаге равно числу исходов на $(i - 1)$ -м шаге и равно C_{n+i-2}^{i-1} ;

3) число монотонных участков на i -м шаге равно числу пучков на $(i - 1)$ -м шаге и равно C_{n+i-3}^{i-2} ;

4) размеры первых монотонных участков на любом шаге $i \geq 2$ совпадают с общим числом исходов 2-го шага C_{n+2-1}^2 ;

5) размеры пучков на каждом участке монотонности убывают на 1 до 1.

6) добавленные элементы исходов пучка на i -м шаге размера t_i , $i = \overline{1, r}$, $t_i = \overline{1, n}$ начинаются с исхода $(n - t_i)$ и поединично возрастают в пучке до $(n - 1)$;

7) добавленный элемент исхода a_i в пучке размером t_i на i -м шаге определяет его номер в пучке n_i по формуле

$$a_i = (n - t_i) + n_i - 1; \quad (1)$$

8) номер исхода n_i в пучке размером t_i на i -м шаге определяется видом исхода a_i по формуле

$$n_i = a_i - (n - t_i) + 1. \quad (2)$$

Обозначим число исходов схемы на i -м шаге C_{n+i-1}^i через $N^*(n, i)$, $N^*(1, i) = 1$. Тогда по графам на рисунках 1 и 2 очевидно равенство

$$N^*(n, i) = N^*(n, i - 1) + N^*(n - 1, i - 1) + \\ + N^*(n - 2, i - 1) + \dots + 1,$$

откуда следует рекуррентная формула для сочетаний

$$C_{n+i-1}^i = C_{n+i-1}^{i-1} + C_{n+i-2}^{i-1} + \dots + 1, \quad (3)$$

в которой левая часть задает общее число исходов схемы на i -м шаге ($i > 1$), а слагаемые

правой части задают численности исходов за $(i-1)$ шагов с поединично возрастающими от 0 до $(n-1)$ фиксированными минимальными цифрами домино на первом шаге. Причем при $(i-1) = 1$ в качестве слагаемых в правой части (3) получаем размеры пучков. Таким образом, по рекурренте (3), представив число исходов на i -м шаге C_{n+i-1}^i последовательными итерациями через сумму сочетаний с единичным верхним индексом, получим в качестве пучковой структуры графа перечисления исходов схемы перечень последовательных слагаемых правой части (3).

Обозначив пучковую структуру графа на i -м шаге через $K_i = (k_1^{(i)}, \dots, k_{N^*(n, i-1)})$, где в круглых скобках перечислены размеры последовательных в порядке перечисления пучков на i -м шаге, на основании (3) можно получать пучковую структуру графа перечисления исходов схемы по очевидному размеру пучка первого шага, равному $C_{n+1-1}^1 = n = N^*(n, 1)$, откуда $K_1 = (n)$; на втором шаге $C_{n+2-1}^2 = C_{n+1}^2 = C_n^1 + C_{n-1}^1 + \dots + 1 = n + (n-1) + \dots + 1$, откуда $K_2 = (n, n-1, \dots, 1)$; на третьем шаге $C_{n+3-1}^3 = C_{n+2-1}^2 + C_{n+1-1}^2 + \dots + 1 = ((n+1) + n + \dots + 1) + (n + (n-1) + \dots + 1) + \dots + (2+1) + (1)$, откуда $K_3 = (n+1, n, \dots, 1, n, n-1, \dots, 1, \dots), 2, 1)$ и т. д. Покажем это в условиях примера 1б.

Пример 2. Пусть $n = 4, r = 3$, см. рисунок 2 по (3).

$N^*(4, 1) = 4$, откуда $K_1 = (4)$;

$N^*(n, 2) = C_{4+2-1}^2 = C_5^2 = C_4^1 + C_3^1 + C_2^1 + C_1^1 = 4 + 3 + 2 + 1$, откуда $K_2 = (4, 3, 2, 1)$;

$N^*(n, 3) = C_{4+3-1}^3 = C_6^3 = C_5^2 + C_4^2 + C_3^2 + C_2^2 = (C_4^1 + C_3^1 + C_2^1 + C_1^1) + (C_3^1 + C_2^1 + C_1^1) + (C_2^1 + C_1^1) + C_1^1 = (4+3+2+1) + (3+2+1) + (2+1) + 1$, откуда $K_3 = (4, 3, 2, 1, 3, 2, 1, 2, 1, 1)$, что совпадает с результатами на рисунке 2.

1.3. Задача нумерации для исходов схемы

На основании п. 1.2 будем считать пучковую структуру K_i на i -м шаге $(i = \overline{1, r})$ графа известной.

Прямая задача нумерации

Даны параметры схемы n и r . Требуется по номеру $N = N^{(r)}$ исхода схемы в порядке, принятом в п. 1, найти вид исхода $R^{(r)} = (a_1, \dots, a_r)$ – цифр на фишке домино.

Решение. Будем определять искомый вид исхода через форму $\bar{n} = (n_1, \dots, n_r)$, которая задает в качестве компонент номера исходов в пучках последовательных предсостояний, приводящих к итоговому исходу с заданным номером. Для дальнейшего введем обо-

значение $N^{(i)}$ – номер исхода в траектории T на i -м шаге графа, приводящей из начального состояния незаполненной фишки домино к состоянию полного заполнения всех r ее концов. Тогда заданный номер $N = N^{(r)}$, а траекторию T можно задавать еще и в виде $T = (N^{(1)}, \dots, N^{(r)})$.

Задача нахождения вида исхода по его номеру существенно опирается на пучковую структуру исходов K_i .

Вид исхода \bar{n} будем находить покомпонентно от n_r до n_1 . Из приведенных в п. 1.2 закономерностей пучковой структуры графа следует, что

$$n_r = N^{(r)} - \max_{s_r} S : \left\{ S = \sum_{j=1}^{s_r} k_j^{(r)} < N^{(r)} \right\}.$$

Тогда $N^{(r-1)} = s_r + 1$, как номер пучка на r -м шаге графа или исхода на $(r-1)$ -м шаге графа, содержащегося в траектории T . Отсюда по пучковой структуре графа K_{r-1} аналогично получаем, что

$$n_{r-1} = N^{(r-1)} - \max_{s_{r-1}} S : \left\{ S = \sum_{j=1}^{s_{r-1}} k_j^{(r-1)} < N^{(r-1)} \right\}.$$

Аналогичным рассуждением досчитываем \bar{n} до компоненты n_2 , принадлежащей единственному пучку графа на втором шаге размера 2, а, очевидно, $n_1 = 1$ всегда.

Теперь на основании выше приведенных рассуждений можем выписать общую формулу для нахождения компоненты n_i искомого вектора \bar{n} по пучковым структурам графа:

$$n_i = N^{(i)} - \max_{s_i} S : \left\{ S = \sum_{j=1}^{s_i} k_j^{(i)} < N^{(i)} \right\}, \quad (4)$$

где $N^{(i)} = s_{i+1} + 1$.

Далее по (1) п. 1.2 находим вид исхода $R^{(r)} = (a_1, \dots, a_r)$, где

$$t_i = k_{N^{(i-1)}}^{(i)}. \quad (5)$$

Покажем порядок вычислений при решении прямой задачи нумерации на числовом примере.

Пример 3. Пусть $n = 4, r = 3$ и номер исхода схемы $N = N^{(3)} = 15$. Требуется найти вид исхода схемы $R^{(3)} = (a_1, a_2, a_3)$.

Приведем по шагам полученные в примере 2 при тех же параметрах пучковые структуры графа до $r = 3$:

$$K_1 = (4), \quad K_2 = (4, 3, 2, 1),$$

$$K_3 = (4, 3, 2, 1, 3, 2, 1, 2, 1, 1). \quad (6)$$

По (4) $n_3 = 15 - (4 + 3 + 2 + 1 + 3) = 2$, откуда $s_3 = 5$, $N^{(2)} = 6$;

$n_2 = 6 - 4 = 2$, откуда $s_2 = 1$, $N^{(1)} = 2$;

$n_1 = 2 - 0 = 2$, откуда $s_1 = 0$, $N^{(0)} = 1$.

Далее по (5) и (6) находим $t_1 = 4$; $t_2 = 3$; $t_3 = 2$, подставляя значения которых в (1), вычисляем компоненты вектора искомого вида исхода:

$a_1 = (4 - 4) + 2 - 1 = 1$; $a_2 = (4 - 3) + 2 - 1 = 2$; $a_3 = (4 - 2) + 2 - 1 = 3$, откуда $R^{(3)} = (1, 2, 3)$, что совпадает с результатом на рисунке 2.

Обратная задача нумерации

Даны параметры схемы n и r . Требуется по данному виду исхода схемы $R^{(r)}$ найти его номер $N^{(r)}$ в принятом в п. 2 порядке нумерации исходов при известной пучковой структуре графа $K_i, i = \overline{1, r}$.

Решение.

Будем, начиная с 1-го шага, по (2) из $R^{(r)} = (a_1, \dots, a_r)$ находить компоненты вектора номеров предшествующих исходов в пучках графа перечисления исходов схемы $\bar{n} = (n_1, \dots, n_r)$ и их номеров по шагам перечисления $N^{(1)}, \dots, N^{(r)}$ по формуле для i -го шага ($i = 1, 2, \dots, r$).

При $i = 1$ $n_1 = 1$ всегда, откуда $N^{(1)} = a_1 + 1$; для $i > 1$ получаем

$$N^{(i)} = \sum_{j=1}^{N^{(i-1)}-1} k_j^{(i)} + n_i, \quad (7)$$

следующей из структуры графа. Тогда при $i = r$ по (7) получим искомым результат.

Покажем порядок вычислений при решении обратной задачи нумерации на числовом примере.

Пример 4. Пусть $n = 4$, $r = 3$ и вид исхода схемы $R^{(3)} = (1, 2, 3)$. Требуется найти номер исхода схемы $N^{(3)}$.

Приведем по шагам полученные в примере 2 при тех же параметрах пучковые структуры графа до $r = 3$:

$$K_1 = (4), \quad K_2 = (4, 3, 2, 1),$$

$$K_3 = (4, 3, 2, 1, 3, 2, 1, 2, 1, 1).$$

Далее по (2) и (7) получаем

$n_1 = 1$, откуда $N^{(1)} = 2$; $k_2^{(2)} = 3$ из K_2 ;

$n_2 = 2 - (4 - 3) + 1 = 2$, откуда $N^{(2)} = 4 + 2 = 6$; $k_6^{(3)} = 2$ из K_3 ;

$n_3 = 3 - (4 - 2) + 1 = 2$, откуда $N^{(3)} = (4 + 3 + 2 + 1 + 3) + 2 = 15$, что совпадает с результатом на рисунке 2.

Замечание 1. В частности, для традиционного домино при $r = 2$ с n цифрами в отличие от приведенного здесь рекуррентного результата задачи нумерации найдены явные формулы ее решения в прямой и обратной постановках, т. е. для соответствия вида $R^{(2)} = R(a, b)$ исхода и его номера $N = N^{(2)}$:

$$a = \min r : \left\{ \sum_{j=0}^r (n - j) \geq N \right\};$$

$$b = a + \left\{ N - \sum_{j=0}^{a-1} (n - j) - 1 \right\}$$

для прямой задачи нумерации и

$$N = \sum_{j=0}^{a-1} (n - j) + (b - a + 1)$$

для обратной задачи нумерации.

1.4. Моделирование исходов схемы домино (схемы сочетаний с повторением)

В условиях решенной прямой задачи нумерации для исходов схемы при очевидной их равновероятности предлагается проводить «быстрое» моделирование ее исходов путем равновероятного разыгрывания их номеров, каждого по одному случайному числу.

2. АНАЛИЗ СХЕМЫ ДОМИНО – СХЕМЫ СОЧЕТАНИЙ С ПОВТОРЕНИЕМ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА СХЕМЫ СОЧЕТАНИЙ

В [8] для схемы сочетаний перечислены все ее исходы, решена задача нумерации и построено моделирование исходов схемы. Используя связь схем сочетаний, сочетаний с повторением и домино, будем проводить все исследования в схеме домино путем пересчета из аналогичных результатов первых двух схем.

2.1. О пересчете видов исходов схем сочетаний, сочетаний с повторением и домино и перечисление исходов схемы домино

По логике исследования схемы домино с использованием первых двух схем ее исход может быть последовательно получен в видах исходов этих вспомогательных схем: сначала в виде $R = (v_1, \dots, v_r)$ одного из $C_{n+r-1}^r C_{n^*}^r$ выборов r элементов из n^* схемы сочетаний, потом пересчитан в виде $R^{(n)} = (b_1, \dots, b_n)$ уровней заполнения n ячеек схемы сочетаний с повторением при размещении r неразличимых

частиц по n различным ячейкам и, наконец, в виде $R^{(r)} = (a_1, \dots, a_r)$ исхода заполнения фишки домино с r концами n цифрами от 0 до $(n-1)$ в возрастающем по часовой стрелке порядке.

Исходя из связи интерпретаций этих трех схем для пересчета их видов исходов, получаем следующие правила:

ПРАВИЛО 1 (перевода вида исхода схемы сочетаний R в вид исхода схемы сочетаний с повторением $R^{(n)}$) – **невыведенные в R цифры в порядке их роста с краев заменяются нулями, а не с краев – числом нулей, на 1 меньшим их числа, а выведенные подряд цифры – их числом** – получаем вид $R^{(n)}$;

ПРАВИЛО 2 (перевода вида исхода схемы сочетаний с повторением $R^{(n)}$ в вид исхода схемы домино $R^{(r)}$) – **по каждой j -й ненулевой компоненте b_j , $j = \overline{1, n}$, в векторы $R^{(n)}$ выписываются b_j одинаковых чисел, равных $(j-1)$** (очевидно, $\sum_{j=1}^n b_j = r$) – получаем вид $R^{(r)}$.

Замечание 2. Оказывается, что можно пересчитывать вид R исхода схемы сочетаний непосредственно в исход схемы домино $R^{(r)}$ без получения промежуточного вида $R^{(n)}$ схемы сочетаний с повторением по формуле $a_i = v_i - i$. Назовем это ПРАВИЛОМ 3, которое дает более быстрый пересчет исходов схем.

В [8] методом графов построена процедура перечисления исходов схемы сочетаний, пусть это параметры $n^* = (n+r-1)$ и r . Заменяя виды всех ее промежуточных и итоговых исходов на соответствующие исходы схемы домино, получаем граф перечисления ее исходов. Таким образом, задача перечисления исходов в схеме домино сводится к пересчету видов исходов схемы сочетаний с определенными параметрами к виду исходов схемы домино.

Покажем на примере пересчет исхода R в искомым исход $R^{(r)}$.

Пример 5. Пусть $n = 5$, $r = 4$. Отсюда $n^* = 8$ и пусть $R = (2, 3, 6, 7)$. Тогда по ПРАВИЛУ 1 $R^{(n)} = (0, 2, 0, 2, 0)$, а по ПРАВИЛУ 2 получаем $R^{(r)} = (1, 1, 3, 3)$ – цифры на концах фишки домино.

Такой же результат получаем и по ПРАВИЛУ 3, т. к. $a_1 = 2 - 1 = 1$, $a_2 = 3 - 2 = 1$, $a_3 = 6 - 3 = 3$, $a_4 = 7 - 4 = 3$.

2.2. Задача нумерации для исходов схем сочетаний с повторением и домино

В [8] решена задача нумерации для исходов схемы сочетаний в прямой и обратной поста-

новках. Для перенесения этих результатов на схемы сочетаний с повторением и домино нужно только в них параметр схемы сочетаний n заменить на определенный в п. 2.1 n^* и все виды исходов схемы сочетаний пересчитать в них по п. 2.1 в виды исходов схемы сочетаний с повторением и схемы домино.

2.3. Моделирование исходов схемы сочетаний с повторением и схемы домино

В [8] предложены разные способы моделирования исходов схемы сочетаний, лучшим из которых в связи с решением для нее прямой задачи нумерации является «быстрое» моделирование. Все эти способы годятся и для схемы сочетаний с повторением с заменой параметра n в схеме сочетаний на определенный в п. 2.1 параметр n^* .

Замечание 3. Сравнение приведенных двух способов анализа схемы сочетаний с повторением не дает явного преимущества ни одному из них, т. к. оба способа приводят к результатам одного уровня, но первый способ более нагляден с точки зрения понимания структуры графа перечисления исходов схемы и дает готовые результаты, не требующие дополнительных пересчетов, хотя полученные формулы анализа схемы сочетаний с повторением несколько сложнее, чем для схемы сочетаний, а краткость приведенного второго способа анализа схемы по сравнению с первым подразумевает достаточно объемную работу по осмыслению и пересчету приведенных в [8] результатов для нашей схемы сочетаний с повторением в терминах обобщенного домино.

3. АНАЛИЗ СХЕМЫ ДОМИНО С ФИКСИРОВАННОЙ МИНИМАЛЬНОЙ ЦИФРОЙ НА ФИШКЕ

Пусть при прежних параметрах схемы n и r заданная минимальная цифра на фишке домино есть m . Будем анализировать схему по тем же направлениям, что и общую схему сочетаний с повторением с использованием полученных для нее результатов.

3.1 Число исходов и их перечисление в схеме домино с фиксированной минимальной цифрой на фишке

Как следует из пп. 2.1 и 2.2 число исходов и их перечисление в схемах перестановок с повторением и домино совпадают при аналогичных ограничениях, поэтому исследования будем проводить в терминах обеих схем, называя их схемой. Число исходов схемы

$$N_1^* = N^*(n - m, r) = C_{n+r-m-1}^r, \quad (8)$$

они составляют часть подряд идущих исходов общей схемы сочетаний с повторением, которые, как видно из рисунков 1 и 2, имеют номера с W_1 до W_2 следующего вида:

$$W_1 = \sum_{j=0}^{m-1} N^*(n-1, r-j)+1 = \sum_{j=0}^{m-1} C_{n+r-j-2}^{r-m}+1; \quad (9)$$

$$W_2 = \sum_{j=0}^{m-1} N^*(n-1, r-m) = W_1 + N_1^* - 1. \quad (10)$$

Проверим эти формулы на численном примере.

Пример 6. Пусть, как в примере 1б, $n = 4, r = 3, m = 1$. Тогда по рисунку 2 $N_1^* = 6, W_1 = 11, W_2 = 16$. Вычислим эти значения по формулам (8)–(10):

$N_1^* = C_{4+3-1-2}^2 = C_4^2 = 6; W_1 = N^*(4 - 1, 3 - 1) = C_5^2 + 1 = 11; W_2 = 11 + 6 - 1 = 16$. Результаты совпали.

3.2. Задача нумерации для исходов схемы

Задача нумерации в прямой и обратной постановках решена в пп. 1 и 2 для схемы сочетаний с повторениями, значит, на основании (8) она решена и для нашей схемы с заменой в ее решении параметров n, r на параметры $n - 1, r - m$.

3.3. Вероятностное распределение исходов схемы

В схеме сочетаний с повторением без ограничений все исходы равновероятны, каждый с вероятностью $p = 1/C_{n+r-1}^r$, а вероятность того, что в исходах минимальный номер равен

m , есть $p_1 = N_1^*/N^* = C_{n+r-m-1}^{r-1}/C_{n+r-1}^r$, откуда по теореме умножения исходы нашей схемы равновероятны с вероятностью $P = p \cdot p_1 = 1/C_{n+r-m-1}^{r-1}$.

3.4. Моделирование исходов схемы

По результату прямой задачи нумерации производим «быстрое» моделирование исхода схемы, разыгрывая по одному случайному числу его номер, из которого следует его искомый вид, т. е. заполнение фишки домино.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Виленкин Н. Я.* Комбинаторика. М.: Наука, 1969. 323 с.
2. *Риордан Дж.* Введение в комбинаторный анализ. Пер. с англ. М.: Изд-во иностран. лит-ры., 1963. 288 с.
3. *Рыбников К. А.* Введение в комбинаторный анализ. М.: Изд. моск. ун-та, 1985. 308 с.
4. *Сачков В. Н.* Комбинаторные методы в дискретной математике. М.: Наука, 1977. 320 с.
5. *Сачков В. Н.* Введение в комбинаторные методы дискретной математики. М.: Наука, 1982. 384 с.
6. *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. М.: Мир, 1967.
7. *Энатская Н. Ю., Хакимуллин Е. Р.* Стохастическое моделирование. М.: МИЭМ, 2012. 185 с.
8. *Энатская Н. Ю.* Комбинаторный анализ схемы сочетаний // Промышленные АСУ и контроллеры. 2015. Вып. 8. С. 35–40.

Поступила в редакцию 27.12.2016

REFERENCES

1. *Vilenkin N. Ya.* Kombinatorika [Combinatorics]. Moscow: Nauka, 1969. 323 p.
2. *Riordan Dzh.* Vvedenie v kombinatoryni analiz. Per. s angl. [An introduction to combinatorial analysis. Tr. from Eng.]. Moscow: Foreign Literature Publ., 1963. 288 p.
3. *Rybnikov K. A.* Vvedenie v kombinatoryni analiz [An introduction to combinatorial analysis]. Moscow: MSU Publishing House, 1985. 308 p.
4. *Sachkov V. N.* Kombinatornye metody v diskretnoi matematike [Combinatorics in discrete mathematics]. Moscow: Nauka, 1977. 320 p.
5. *Sachkov V. N.* Vvedenie v kombinatoryne metody diskretnoi matematiki [An introduction to

combinatorial methods in discrete mathematics]. Moscow: Nauka, 1982. 384 p.

6. *Feller V.* Vvedenie v teoriyu veroyatnostei i ee prilozheniya [An introduction to probability theory and its application]. Moscow: Mir, 1970. 528 p.

7. *Enatskaya N. Yu., Khakimullin E. R.* Stokhasticheskoe modelirovanie [Stochastic modelling]. Moscow: MIEM, 2012. 185 p.

8. *Enatskaya N. Yu.* Kombinatornyi analiz skhemy sochetanii [The analysis of the combination scheme]. Promyshlennye ASU i kontrollery [Industrial ACS and Controllers]. 2015. No. 8. P. 35–40.

Received December 27, 2016

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

Энатская Наталия Юрьевна
доцент Департамента прикладной
математики, к. ф.-м. н.
Московский институт электроники и математики
Национального исследовательского университета
«Высшая школа экономики»
ул. Таллинская, 34, Москва, Россия, 123458
эл. почта: nat1943@mail.ru
тел.: 89037411345

CONTRIBUTOR:

Enatskaya, Natalia
Moscow Institute of Electronics and Mathematics,
National Research University
Higher School of Economics
34 Tallinskaya St., 123458 Moscow, Russia
e-mail: nat1943@mail.ru
tel.: +79037411345

УДК 519.115:519.2

АНАЛИЗ СХЕМЫ РАЗМЕЩЕНИЯ С ОГРАНИЧЕННЫМИ СТЕПАМИ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ РАССЕЙЯНИЯ ПОДСТАНОВКИ

Н. Ю. Энатская

*Московский институт электроники и математики
Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики»*

Рассматриваются разные процедуры перечисления всех исходов схемы размещения с заданным ограничением, устанавливается взаимно-однозначное соответствие между ними и их номерами, приводится моделирование возможных значений реализаций схемы. Тогда из проведенного анализа могут быть получены результаты по тем же направлениям для подстановок любой цикловой структуры с ограниченным тем же числом рассеянием, что и ступи в нашей схеме при интерпретации размещений как последовательных отображений в ее циклах.

Ключевые слова: схема размещений с ограниченными ступями; перечисление исходов; задача нумерации; моделирование; рассеяние подстановок.

N. Yu. Enatskaya. ANALYSIS OF AN ALLOCATION SCHEME WITH LIMITED STEPS AND ITS APPLICATION FOR THE STUDY OF PERMUTATION DISPERSION

The various procedures of enumerating all outcomes of an allocation scheme with a given constraint are considered; one-to-one correspondence between the outcomes and their numbers is established; possible values of the scheme's implementation are simulated. Proceeding from this analysis, results can then be obtained for permutations of any cycle structure with dispersion constrained by the same number as the steps in our scheme if the allocations are interpreted as consecutive mappings in its cycles.

Key words: allocation scheme with restricted steps; enumeration of outcomes; enumeration problem; simulation; dispersion of permutations.

ВВЕДЕНИЕ

Схема размещений возникает при выборе r элементов из n различных (нумерованных) элементов с учетом их порядка или при размещении r различных частиц по одной по n различным ячейкам (при неограниченном числе частиц в ячейке имеем схему размещений с повторениями) и является одной из наиболее

распространенных комбинаторных схем, широко используемой в теории и практике, т. к. участвует во многих важных распространенных математических формулах и в выражениях для чисел исходов многих комбинаторных схем. Число исходов схемы размещений есть $A_n^r = n!/(n-r)! = r!C_n^r$, где C_n^r – число исходов схемы сочетаний, а $r!$ – число исходов схемы перестановок, которые по указанным в анно-

тации направлениям для данной схемы исследованы в работах [1], [2] и [3]. Под размахом R исхода схемы сочетаний по [4] понимается максимальная абсолютная разность пар номеров входящих в ее исход элементов.

Исходы схемы размещения представляют собой наборы r значений номеров выбранных элементов в полученном порядке: $\bar{a} = (a_1, \dots, a_r)$. В изучаемой схеме вводится верхнее ограничение на абсолютные разности соседних элементов в исходах схемы размещений, называемые далее СТЕПАМИ и обозначаемые вектором $\bar{s} = (s_1, \dots, s_{r-1})$, где $s_i = |a_{i+1} - a_i|$. Тогда данное ограничение состоит в условии $\max_i s_i \leq S$. Это ограничение путем отбраковки из всех исходов схемы размещений можно учесть по результатам непосредственного подсчета степеней каждого его исхода при численном анализе схемы. Но тогда для перечисления требуемых исходов придется проводить перебор лишних исходов и глобальный просчет степеней во всех исходах общей схемы размещений с теми же параметрами без ограничений. Во избежание этого и с целью выявления закономерностей структуры перебора исходов предлагается строить процедуру прямого их перечисления.

По анализу схемы предлагается получить результаты по тем же направлениям для схемы случайных подстановок с ограниченным сверху той же константой S РАССЕЯНИЕМ (рассмотренной в [5]), под которым в матричной записи подстановки понимается максимальная абсолютная разность между элементами ее столбцов, или в записи последовательных отображений в каждом ее цикле в виде изучаемых здесь размещений со степенями с данным ограничением.

1. Вид исходов, число исходов схемы и их прямое перечисление

Все исходы схемы отличаются друг от друга составом и порядком выбранных r из n элементов с заданным ограничением на ступи и задаются, как и в общей схеме размещений [3], наборами номеров выбранных r из n элементов в полученном порядке $\bar{a} = (a_1, \dots, a_r)$.

Заметим, что при ограниченном числе S размахе R выборки исходов в соответствующей схеме сочетаний все перестановки их элементов дают часть требуемых исходов нашей схемы. Остальные же ее исходы получаются из исходов схемы сочетаний с $R > S$ из диапазона

$$S < R \leq \min((r-1)S, n-1) = L \quad (1)$$

его значений для возможности реализации нашей схемы допустимой (с точки зрения данно-

го ограничения в ней) перестановкой их элементов, каждый из которых определяется соответствующим конкретным исходом схемы сочетаний.

Прямое перечисление исходов нашей схемы производим в ДВА ЭТАПА: на ПЕРВОМ этапе перечисляем все исходы схемы сочетаний с ограниченным размахом S , изученной в [4], с полученным там общим числом исходов

$$N(S) = C_{S+1}^r + (n - S - 1)C_S^{r-1} \quad (2)$$

с $r!$ перестановками по [1] входящих в него номеров элементов (в результате получаем часть всех исходов нашей схемы), а на ВТОРОМ этапе строим остальные исходы нашей схемы из каждого исхода схемы сочетаний с $R > S$ из (1) $\bar{n} = (n_1, \dots, n_r)$, где $n_1 < \dots < n_r$, $(n_1, \dots, n_r) \in (1, 2, \dots, n)$ с определенным ограничением на перестановки ее элементов. Для этого определяем выборку (n_1, \dots, n_k) максимальной длины k с размахом $\leq S$ и производим все $k!$ перестановок ее элементов. Оставшиеся элементы добавляем по одному в порядке их перечисления в исходе схемы сочетаний к исходам перестановок из первых k элементов (по правилам перечисления исходов перестановок [1]) с предварительным запретом не отвечающих требованию нашей схемы позиций добавляемого элемента относительно уже имеющихся в исходе.

Порядок нумерации исходов всех шагов описанного перечисления определяется соответствующими порядками исследованных перечислений исходов схем [2] и [1].

Из вышесказанного следует, что по способу перечисления и вычисления численностей частей исходов нашей схемы все их предсостояния – исходы схемы сочетаний, порождающие исходы нашей схемы, при определенной перестановке их элементов делятся на две части разного размаха выборки $R \leq S$ и $S < R \leq L$.

Для первой части предсостояний с $R \leq S$ процедура перечисления исходов нашей схемы дана выше, а число исходов

$$M_1 = (C_{S+1}^r + (n - S - 1)C_S^{r-1})r! \quad (3)$$

Для анализа остальных исходов нашей схемы с предсостояниями с $S < R \leq L$ представим пошаговый АЛГОРИТМ 1 перечисления и числа исходов нашей схемы из ОДНОГО такого t -го предсостояния $t = 1, N^{(*)}$, соответствующего конкретному набору \bar{n} , где $N^{(*)}$ – число всех сочетаний с заданным диапазоном размаха и вычисляемое из равенства

$$N^{(*)} = N(L) - N(S). \quad (4)$$

Шаги АЛГОРИТМА 1:

1) из \bar{n} находим последовательность максимальной длины n_1, \dots, n_k с размахом $R \leq S$;

2) в результате п. 1) производим все перестановки по [1];

3) в каждом результате п. 2) отмечаем * запретные места (ЗМ) добавления следующего i -го в порядке роста отброшенного в п. 1) элемента $i = \overline{k+1, r}$ и считаем их число (ЧЗМ) – Z_{ij} , т. е. ЧЗМ добавления i -го элемента в j -м исходе п. 2);

4) добавляем n_i всеми вариантами на все не ЗМ (левее, правее и между имеющимися) в п. 3);

5) заменяя результат п. 2) в п. 3) на результаты п. 4, производим выполнение п. 3 и п. 4 до достижения i значения r ;

6) в результате п. 5) получаем все исходы нашей схемы (множество N_t), порожденные данным t -м исходом схемы сочетаний с данным ограничением и для всех $i = \overline{k+1, r}$ наборы чисел ЧЗМ $\bar{Z} = (Z_{i1}, \dots, Z_{i, r-k})$ или $\bar{a} = (a_{i1}, \dots, a_{i, r-k})$ – допустимых мест добавления элементов в п. 4), где $a_{ij} = k + i - Z_{ij}$.

(Виды этих исходов нашей схемы зависят от ЗМ добавлений среди предшествующих элементов исхода схемы сочетаний, а их численность – от числа ЗМ на каждом шаге добавлений до r элементов);

7) число исходов $N^{(t)}$ п. 6) считается по их перечислению или по очевидной формуле

$$N^{(t)} = \sum_{i=1}^{A_{r-k-1}} a_{r-k-1, i}, \quad (5)$$

где $A_i = \sum_{i=1}^{A_{i-1}} a_{i, A_{i-1}}$ – число исходов нашей схемы из данного t -го предстояния при i -м добавлении элемента (на i -м шаге, $A_0 = k!$, $A_{r-k} = N^{(t)}$).

Теперь представим АЛГОРИТМ 2 перечисления ВСЕХ исходов нашей схемы с вычислением их числа.

Шаги АЛГОРИТМА 2:

1) по [4] получаем все исходы схемы сочетаний из n по r с ограниченным размахом $R \leq (r-1)S$ численностью $N((r-1)S)$;

2) по [4] получаем все исходы схемы сочетаний из n по r с ограниченным размахом $R \leq S$ численностью $N(S)$;

3) в каждом результате п. 2) по [1] производим все $r!$ перестановок входящих в него элементов, объединяя которые, получаем первую часть исходов нашей схемы и по (3) ее численность M_1 ;

4) по результатам п. 1 и п. 2 (вычитанием множеств) получаем остальные исходы схемы

сочетаний с $S < R \leq (r-1)S$ в количестве $N^{(*)}$ по (3), называемые далее исходами схемы;

5) для каждого t -го исхода п. 4) по АЛГОРИТМУ 1 находим все N_t порожденные им исходы нашей схемы и по (5) их численность $N^{(t)}$;

6) объединяя множества N_t по всем $t = \overline{1, N^{(*)}}$, получаем все исходы второй части исходов нашей схемы численностью

$$M_2 = \sum_{t=1}^{N^{(*)}} N^{(t)}; \quad (6)$$

7) объединяя множества исходов пп. 3) и 6) и суммируя их численности, получаем перечисление всех исходов нашей схемы численностью $N = M_1 + M_2$.

Продемонстрируем работу алгоритмов перечисления исходов и определения числа исходов нашей схемы на числовых примерах.

Пример 1. Пусть $n = 5$, $r = 3$, $S = 2$.

Все исходы схемы сочетаний имеют размах $R \leq 2$ по [4] или визуальным перебором из номеров 1, 2, 3, 4, 5 легко перечисляются и есть 123, 124, 134, 135, 234, 235, 245, 345. Из них исходы 123, 234 и 345 имеют разброс $R = S = 2$, остальные – $R > 2$. Поэтому первая часть исходов нашей схемы получается из всех перестановок $3! = 6$ трех цифр исходов 123, 234, 345 по [1]: 321, 231, 213, 312, 132, 123; 432, 342, 324, 423, 243, 234; 543, 453, 435, 534, 354, 345 и $M_1 = 18$.

Вторая часть исходов получается по АЛГОРИТМУ 1 из остальных пяти исходов схемы сочетаний 124, 134, 135, 235, 245. Для примера подробно рассмотрим исход 124 по шагам алгоритма (при $t = 1$): 1) $k = 2$; 2) 21; 12; 3) $2*1^*$; $*1*2$; 4)–6) 421; 124; $Z_{11} = Z_{12} = 2$; $a_{11} = a_{12} = 1$; 7) $N^{(1)} = a_{11} + a_{12} = 2$. Аналогичные вычисления для остальных исходов приводят к результатам исходов нашей схемы 431, 134; 531, 135; 542, 245; 532, 235 соответственно численностями $N^{(2)} = N^{(3)} = N^{(4)} = N^{(5)} = 2$ – всего $M_2 = 10$. Отсюда по АЛГОРИТМУ 2 объединением исходов первой и второй частей получаем все исходы нашей схемы в количестве $N = 18 + 10 = 28$.

Проиллюстрируем работу алгоритмов графом перечисления исходов схемы примера 1 на рисунке 1.

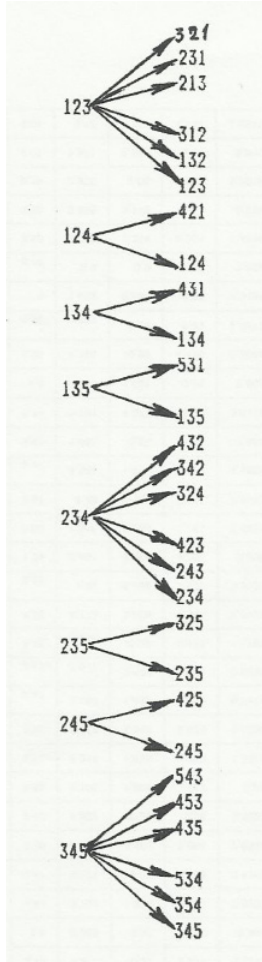


Рис. 1. Граф перечисления исходов схемы в примере 1

Пример 2. Пусть $n = 5$, $r = 4$, $S = 2$.

Все исходы схемы сочетаний с размахом $R > 2$ по [4] или визуальным перебором из номеров 1, 2, 3, 4, 5 легко перечисляются и есть 1234, 1235, 1245, 2345, 1345. Из них исходы 1234, 2345 имеют размах $R = S = 3$, остальные – $R = 4$, т. е. все исходы имеют размах $R > S$, поэтому первой части исходов нашей схемы нет и $M_1 = 0$.

Вторая часть исходов получается по АЛГОРИТМУ 1 из всех пяти перечисленных выше исходов схемы сочетаний. Для примера подробно рассмотрим один из них, 1234, при $t = 1$: 1) $k = 3$; 2) 321, 231, 213, 312, 132, 123; 3) $32*1^*$, $23*1^*$, $2*1*3$, $3*1*2$, $*1*32$, $*1*23$; 4)–6) 4321, 3421; 4231, 2431; 4213, 2143; 4312, 3124; 1342, 1324; 1243, 1234; $Z_{11} = Z_{12} = Z_{13} = Z_{14} = Z_{15} = Z_{16} = 2$; $a_{11} = a_{12} = a_{13} = a_{14} = a_{15} = a_{16} = 2$; 7) $N_1 = 12$ (рис. 2).

Представим это в виде фрагмента общего графа перечисления исходов из данного предсостояния.

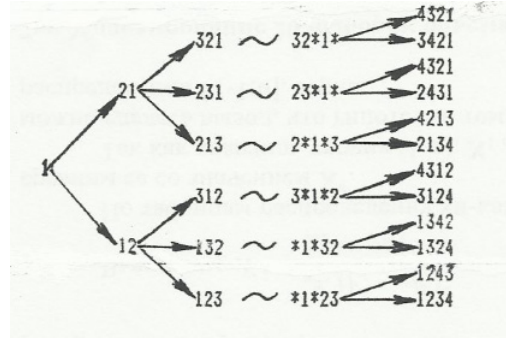


Рис. 2. Фрагмент графа перечисления исходов схемы в примере 2

Аналогичные вычисления для остальных исходов (предсостояний) приводят к получению видов исходов нашей схемы с определением их численностей и суммарной численностью M_2 , которые совпадают (т. к. $M_1 = 0$) со всеми исходами нашей схемы в количестве $N = M_2$.

2. ЗАДАЧА НУМЕРАЦИИ (ЗН)

Установление полноты перебора всех исходов схемы и удобство дальнейшего ее использования требует решения прямой и обратной ЗН, т. е. нахождения взаимно-однозначного соответствия видов исходов схемы R^* и их номеров N^* . Далее для краткости под элементами будем понимать их номера.

Решение ЗН будет следовать из процедуры перечисления и порядка нумерации исходов схемы по данным в п. 1 этапам соответственно с $R \leq S$ и $S < R \leq (r - 1)S$ для предсостояний исходов нашей схемы.

Для первого этапа ЗН решим аналитически, а для второго этапа с громоздко формализуемыми закономерностями будем считать ЗН алгоритмически решенной найденным в п. 1 табличным соответствием видов и номеров исходов схемы при их перечислении. Поэтому ниже следующее решение ЗН будет относиться к исходам первого этапа перечисления исходов нашей схемы. Перечисление его исходов производим (по п. 1) ДВУМЯ последовательными ДЕЙСТВИЯМИ: перечислением всех $N(S)$ исходов схемы сочетаний с $R \leq S$ и $r!$ перестановками элементов в них, исследованных в работах [4] и [1] с аналитически решенной для них ЗН, на результаты которой и будем ссылаться с обозначениями через R_1^* и N_1^* , соответствующие видам и исходам первого действия, а через $R_2^* = R^*$ и N_2^* – второго действия.

В прямой ЗН для схемы требуется по данному номеру N^* исхода схемы найти его вид $R^* = (a_1, \dots, a_r)$.

Шаги решения:

1)

$$N_1^* = \left\lfloor \frac{N^* + r! - 1}{r!} \right\rfloor;$$

2) по решенной прямой ЗН в [4] из N_1^* получаем R_1^* ;

3) $j = N^* \bmod r!$; $N_2^* = j + C_{n-j}^n r!$, (здесь N_2^* – номер исхода в пучке в схеме перестановок элементов a_1, \dots, a_r);

4) по решенной прямой ЗН в [1] из N_2^* получаем стандартный вид перестановки из r элемента с нумерацией подряд от 1 $R_s = (a_{(1)}, \dots, a_{(r)})$, т. е. $a_{(i)}$ задает место элемента a_i в R^* ;

5) из R_s получаем $R^* = (a_1, \dots, a_r)$, где искомый вид исхода пересчитывается из R_1^* , полученной в 1) с перестановкой ее элементов по R_s из 4).

Для иллюстрации работы алгоритма решения прямой задачи по данным шагам приведем числовой пример.

Пример 3. Пусть $n = 5$, $r = 3$, $S = 3$ и требуется найти вид исхода схемы R^* с номером $N^* = 16$. Для наглядности и визуальной проверки решения ЗН приведем граф перечисления исходов схемы в данном примере.

По графу для исхода схемы с номером 16 получаем вид $R^* = (413)$. Теперь найдем R^* по алгоритму.

Решение по шагам алгоритма:

1) $N_1^* = \lfloor (16 + 3! - 1) / 3! \rfloor = 3$;

2) $N_1^* = 3 \Rightarrow R_1^* = (134)$;

3) $j = 16 \bmod 6 = 4$; $N_2^* = 4 + C_{n-j}^n 3! = 4$;

4) $N_2^* = 4 \Rightarrow R_s = (312)$;

5) из R_1^* и $R_s \Rightarrow R^* = (413)$, что совпало с результатом по рисунку 3.

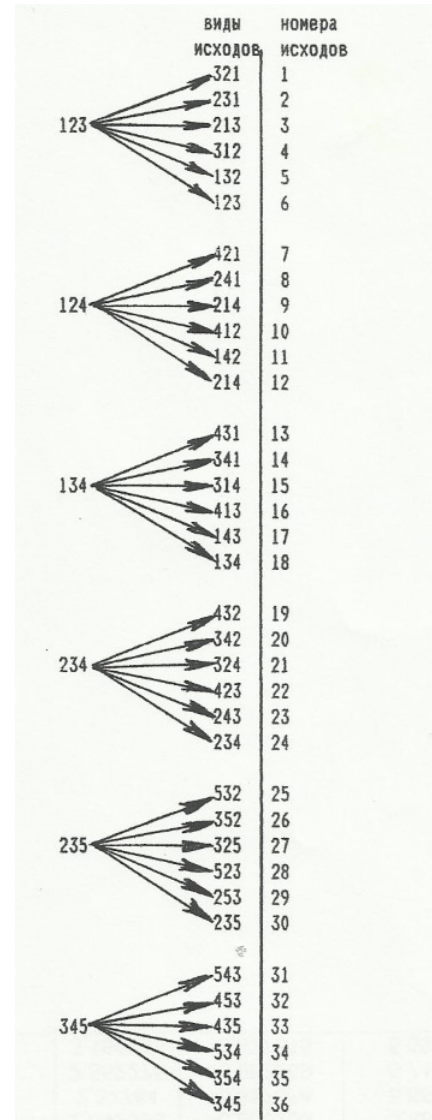


Рис. 3. Граф перечисления исходов схемы в примере 3

В обратной ЗН для схемы требуется по данному исходу $R^* = (a_1, \dots, a_r)$ найти его номер N^* .

Шаги решения:

1) из данного вида исхода R^* , упорядочив элементы по возрастанию, получим R_1^* ;

2) по решенной обратной ЗН в [4] из R_1^* получим N_1^* ;

3) заменив элементы номерами их порядковых статистик среди чисел a_1, \dots, a_r , получим R_s ;

4) по решенной обратной ЗН в [1] из R_s получаем N_2^* – номер исхода в пучке перестановок;

5) тогда в соответствии с процедурой перечисления исходов схемы $N^* = (N_1^* - 1)r! + N_2^*$.

Для наглядности работы алгоритма решения обратной задачи по данным шагам приведем числовой пример.

Пример 4. Пусть, как в примере 3, $n = 5$, $r = 3$, $S = 3$ и требуется найти номер N^* исхода схемы вида R^* .

По графу (рисунок 3) для исхода схемы с номером 16 получаем вид $R^* = (413)$. Теперь найдем N^* по алгоритму.

Решение по шагам алгоритма:

1) $R^* \Rightarrow R_1^* = (134)$;

2) $R_1^* \Rightarrow N_1^* = 3$;

3) $R^* \Rightarrow R_s = (312)$;

4) $R_s = R_2^* \Rightarrow N_2^* = 4$;

5) $N^* = (3 - 1)3! + 4 = 16$, что совпало с результатом по рисунку 3.

3. ВЕРОЯТНОСТНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИСХОДОВ СХЕМЫ

В силу равновероятности исходов схем сочетаний и перестановок, представляющих этапы прямого перечисления исходов нашей схемы, вероятностное распределение ее исходов будет тоже равновероятным с вероятностью каждого исхода $p = 1/N$, где число $N = M_1 + M_2$ (M_1 дано в (3), а M_2 определено перечислением второй части исходов схемы), а вероятность первой части среди всех исходов схемы есть $p_1 = M_1/N$.

4. МОДЕЛИРОВАНИЯ ИСХОДА СХЕМЫ

Число первой части исходов схемы M_1 дано в (3), а число второй части M_2 находится по их перечислению, т. е. известно общее число исходов схемы N . Тогда с вероятностью p_1 сначала разыгрываем часть, к которой относится исход схемы, а далее производим «быстрое» моделирование исхода по результатам решения прямой ЗН соответствующей части исходов (аналитическое для первой части и табличное – для второй) путем разыгрывания случайного номера данной части исходов по одному случайному числу с известным из п. 3 распределением методом маркировки (см. [6]).

5. ПРИБЛИЖЕННОЕ ОЦЕНИВАНИЕ ЧИСЛА ИСХОДОВ СХЕМЫ

Моделируем по [6] или [3] большое число N_A исходов схемы размещений из n различных элементов по r с учетом их порядка из A_n^r . Для каждого исхода вычисляем его степ и определяем среди смоделированных число M исходов со степенями $< S$. Тогда искомое число

исходов нашей схемы приближенно определяется методом пропорций по формуле

$$N \approx \frac{MA_n^r}{N_A}$$

6. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЯ СХЕМЫ ДЛЯ АНАЛИЗА РАССЕЙЯНИЯ ПОДСТАНОВОК

При непосредственном исследовании рассеяния случайных подстановок в [5] была построена процедура прямого перечисления исходов, выявлены закономерности, принципиально позволяющие выписывать аналитическую формулу числа исходов схемы и проводить исследования по направлениям, определенным для основной рассматриваемой здесь схемы. Однако формула для числа исходов схемы оказалась достаточно громоздкой для удобства ее практического использования при растущих параметрах схемы. Поэтому в [5] для основного вопроса исследования о числе исходов схемы аналитические формулы выписаны для нескольких небольших значений параметров и для его нахождения и решения ЗН построен численный алгоритм. Оказалось, что исследованная здесь схема дает возможность проще получать отдельные результаты анализа подстановок:

1) при $n = r$ в нашей схеме в интерпретации последовательных отображений в подстановке все результаты нашей схемы переносятся на все одноцикловые подстановки размера n с рассеянием, ограниченным числом S ;

2) при любых заданных составах циклов подстановки можно перечислить все порядки отображений в них с требуемыми ограничениями на рассеяния в циклах, совпадающими с допустимыми условиями (1) на ступи;

3) если в п. 2) в ограничениях сверху на рассеяния во всех циклах есть общие значения, то максимальное среди них даст значение рассеяния подстановки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Колчин А. В., Энатская Н. Ю. Комбинаторный анализ схемы перестановок // Труды КарНЦ РАН. 2014. № 4. С. 80–86.
2. Энатская Н. Ю. Комбинаторный анализ схемы сочетаний // Промышленные АСУ и контроллеры. 2015. № 9. С. 33–38.
3. Энатская Н. Ю. Комбинаторный анализ схемы размещений // Промышленные АСУ и контроллеры. 2015. № 8. С. 34–39.

4. Энатская Н. Ю. Комбинаторный анализ схемы сочетаний с ограниченным размахом // Промышленные АСУ и контроллеры. 2015. № 10. С. 28–31.

5. Энатская Н. Ю. Анализ случайных подстановок фиксированного размера с ограничен-

ным рассеянием // Промышленные АСУ и контроллеры. 2016. № 7. С. 32–36.

6. Энатская Н. Ю., Хакимуллин Е. Р. Стохастическое моделирование. М.: МИЭМ, 2012. С. 185.

Поступила в редакцию 27.12.2016

REFERENCES

1. Kolchin A. V., Enatskaya N. Yu. Kombinatornyi analiz skhemy perestанovok [Combinatorial analysis of a permutation scheme]. *Trudy KarNTs RAN [Trans. KarRC RAS]*. 2014. No. 4. P. 80–86.

2. Enatskaya N. Yu. Kombinatornyi analiz skhemy sochetanii [The analysis of the combination scheme]. *Promyshlennye ASU i kontroллery [Industrial ACS and Controllers]*. 2015. No. 9. P. 33–38.

3. Enatskaya N. Yu. Kombinatornyi analiz skhemy razmeshchenii [Combinatorial analysis of an allocation scheme]. *Promyshlennye ASU i kontroллery [Industrial ACS and Controllers]*. 2015. No. 8. P. 34–39.

4. Enatskaya N. Yu. Kombinatornyi analiz skhemy sochetanii s ogranichennym razmakhom [The analysis of the combination scheme with a limited range]. *Promyshlennye ASU i kontroллery [Industrial ACS and Controllers]*. 2015. No. 10. P. 28–31.

5. Enatskaya N. Yu. Analiz sluchajnykh podstavovok fiksirovannogo razmera s ogranichennym rassejaniem [The Analysis of Random Permutations of a Fixed Size with a Limited Dispersion)]. *Promyshlennye ASU i kontroллery [Industrial ACS and Controllers]*. 2016. No. 7. P. 32–36.

6. Enatskaya N. Yu., Khakimullin E. R. Stokhasticheskoe modelirovanie [Stochastic modeling]. Moscow: MIEM, 2012. P. 185.

Received December 27, 2016

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

Энатская Наталия Юрьевна
доцент Департамента прикладной математики, к. ф.-м. н.
Московский институт электроники и математики
Национального исследовательского университета
«Высшая школа экономики»
ул. Таллинская, 34, Москва, Россия, 123458
эл. почта: nat1943@mail.ru
тел.: 89037411345

CONTRIBUTOR:

Enatskaya, Natalia
Moscow Institute of Electronics and Mathematics,
National Research University
Higher School of Economics
34 Tallinskaya St., 123458 Moscow, Russia
e-mail: nat1943@mail.ru
tel.: +79037411345

ХРОНИКА

XI МЕЖДУНАРОДНАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ И СПЕЦИАЛИСТОВ ИМЕНИ А. А. КУРДЮМОВА «ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА С КОНСТРУКЦИОННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ: ЭКСПЕРИМЕНТ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ» (IHISM'16) (Петрозаводск, 27 июня – 3 июля 2016 г.)

Летом 2016 года Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН провел XI Международную школу-конференцию молодых ученых и специалистов «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами: эксперимент и математическое моделирование» на базе учебно-оздоровительного центра «Урозера» Петрозаводского государственного университета.

Организаторами Школы выступили ИПМИ, ПетрГУ, НИЦ «Курчатовский институт», Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров), Госкорпорация «Росатом». Конференция была поддержана грантом РФФИ. Сопредседателями Международного научно-организационного комитета являлись Р. И. Илькаев (академик РАН, РФЯЦ-ВНИИЭФ), А. В. Воронин (д. т. н., ректор ПетрГУ) и М. В. Ковальчук (член-корр. РАН, НИЦ «Курчатовский институт»). Заместители: Ю. В. Заика (д. ф.-м. н., КарНЦ РАН), А. А. Юхимчук (д. т. н., РФЯЦ-ВНИИЭФ).

XI Школа является продолжением традиционных Международных конференций «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами» (IHISM). Первый семинар IHISM прошел в 2001 году в г. Сарове. Семинар приобрел статус Международной конференции в 2004 году на основании решения международного и программного организационного комитета IHISM'04. Следующим решением IHISM'04, которое удалось реализовать, является организация и проведение по темати-

ке конференции Международной школы для молодых ученых и специалистов.

С момента проведения первой Школы в 2005 году в Петрозаводске на базе ИПМИ и ПетрГУ это мероприятие стало традиционным и проходило ежегодно в различных городах России: Петрозаводск, Санкт-Петербург, Нижний Новгород, Саров, Воронеж, Звенигород, Москва. Особое место в организации Школы принадлежит Санкт-Петербургскому университету, в котором работал один из вдохновителей идеи Школы Александр Александрович Курдюмов, профессор СПбГУ, ведущий ученый в области изучения проблем взаимодействия водорода с конструкционными материалами. Предыдущая, X Школа была проведена в НИЦ «Курчатовский институт» в 2015 году совместно с РФЯЦ-ВНИИЭФ и Физическим факультетом СПбГУ.

На XI Школе-конференции были представлены лекции ведущих специалистов и доклады молодых ученых по широкому кругу вопросов: кинетика и термодинамика взаимодействия изотопов водорода с твердыми телами; гидриды и гидридные превращения; структурно-фазовые превращения и механические свойства; аппаратура и методы исследования. Возрастающая потребность в корректной математической обработке экспериментальных данных и актуальные задачи вычислительного материаловедения привели к заметному расширению спектра исследований, включая применение современных методов математического моделирования на основе технологий высокопроизводительных вычислений.

В работе Школы приняла участие и группа ученых из ИПМИ. В КарНЦ РАН исследова-

ния по математическому моделированию взаимодействия изотопов водорода с конструкционными материалами ведутся в соответствии с программой фундаментальных исследований ОМН РАН «Современные вычислительные и

информационные технологии решения больших задач» и при поддержке РФФИ (грант 15-01-00744 «Нелинейные модели термодесорбции и водородопроницаемости конструкционных материалов», 2015–2017 гг.).



Решение IHISM'04 (г. Саров): организовать проведение Международной школы для молодых ученых и специалистов в Петрозаводске



Участники конференции IHISM'16 в учебно-оздоровительном центре «Урозеро»

Отметим лишь некоторые доклады, вызвавшие оживленную дискуссию.

Казалось бы, история развития тематики Школы хорошо известна. Но в своей лекции «История и проблемы водородной энер-

гетики» Е. А. Денисову (СПбГУ) удалось представить исторические факты и подробный анализ развития научных идей и тенденций, которые были известны широкому кругу молодых специалистов лишь в общих

чертах. В лекциях А. С. Кукушкина (НИЦ КИ) «Взаимодействие водорода с поверхностью конструкционных материалов в реакторах», Л. Б. Беграмбекова (МИФИ) «Взаимодействие ионов и атомов водорода с оксидным слоем на поверхности металлов», И. И. Чернова (МИФИ) «Влияние химического состава на удержание водорода в ванадиевых сплавах», В. Х. Алимova (ИФХЭ) «Удержание дейтерия в радиационно-поврежденном вольфраме», А. Н. Морозова (Харьковский ФТИ) «Удержание дейтерия в аустенитной нержавеющей стали, имплантированной при разных температурах», М. А. Мурзиновой (Уфа, РАН) «Влияние водорода на энергию межфазных бета/альфа границ в титане», А. В. Звягинцевой (Воронежский ГТУ) «Поведение водорода в наноструктурных материалах», Е. Н. Любименко (Донецкий НТУ) «Индукцированное водородом формоизменение пластины из сплава α -PdNi при ее дополнительном насыщении», Е. В. Семенова (НИЦ КИ) «Исследования физических механизмов эрозии и накопления изотопов водорода под действием стационарной плазмы в облученном и необлученном вольфраме — материале, предлагаемом для термоядерных исследований», А. Б. Сивака (НИЦ КИ) «Влияние нейтронного облучения на свойства материалов термоядерных реакторов», И. Е. Габиса (СПбГУ) «Кинетика разложения бинарных металлгидридов», О. В. Нецкиной (Новосибирск, РАН) «Гидридный синтез наноматериалов», Н. И. Родченковой (КарНЦ РАН) «Моделирование гидрирования циркониевого сплава: краевая задача со свободной границей фазового перехода», А. А. Юхимчука (Саров) «Научно-экспериментальные комплексы для безопасного обращения с тритием и его соединениями», А. С. Хапова (ВНИИ автоматики) «Технологическая ловушка для хранения трития», С. С. Ананьева (НИЦ КИ) «Топливная система токамака ДЕМО-ТИН с тритий-воспроизводящим бланкетом» были проанализированы актуальные фундаментальные научные проблемы по тематике Школы.

Оргкомитет особо отметил Почетными грамотами молодых участников, доклады которых соответствовали самым высоким стандартам «взрослых» научных конференций: Е. К. Костиковой (КарНЦ РАН) «Аппроксимация краевой задачи термодесорбции системой ОДУ невысокого порядка», А. С. Романенкова (ВНИИ автоматики) «Моделирование работы мишени нейтронного генератора», Е. Ю. Передистова (Санкт-Петербург) «Температурная зависимость коэффициента диффузии водорода в сплавах V-Pd», Е. Д. Мер-

сона (Тольятти) «Влияние плотности тока электролитического наводороживания на повреждения и концентрацию диффузионно-подвижного водорода в сталях разного уровня прочности», А. С. Ивановой (РХТУ) «Получение экспериментальных данных для моделирования каталитического узла окисления трития», И. П. Максимкина (Саров) «Устройство для обратимого хранения изотопов водорода с корпусом из алюмооксидной керамики», Е. В. Жилкина (Саров) «Исследование процессов, протекающих при гидрировании металлического титана, методом акустической эмиссии», Н. Е. Гурина (Саров) «Автоматизация измерений проницаемости изотопов водорода через конструкционные материалы».

В широком контексте тематика и научный уровень докладов соответствуют Приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники в Российской Федерации и Перечню критических технологий Российской Федерации. По результатам работы Школы приняты следующие решения: издать сборник докладов участников мероприятия (РФЯЦ-ВНИИЭФ), начать подготовку к организации XII Школы в Институте физики высоких энергий НИЦ «Курчатовский институт» (г. Протвино).

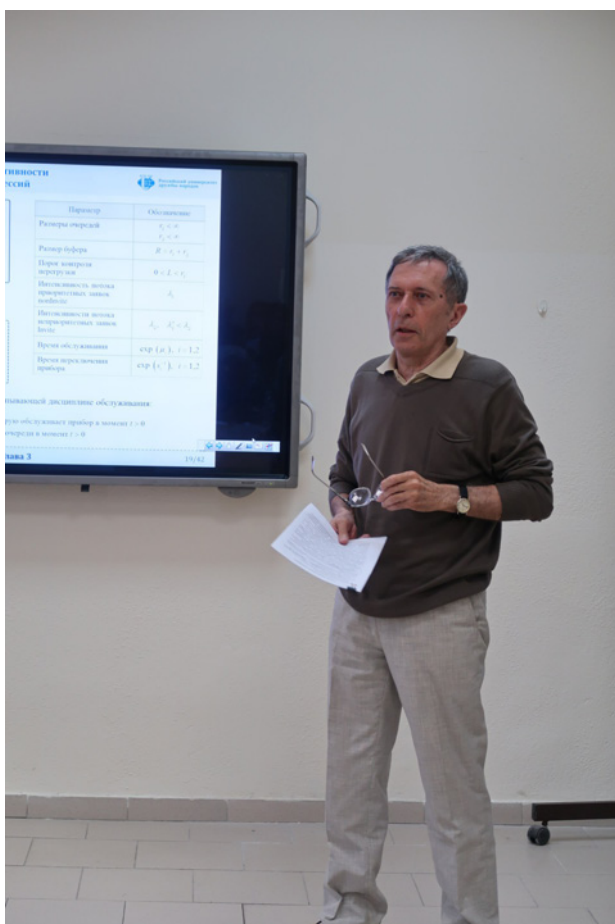
Открытие «второго десятка» этого традиционного мероприятия на родине (I и II Школы проводились в Петрозаводске) показало принципиальную значимость идеи Школы для профессионального роста и конкурентоспособности молодых ученых (экспериментаторов и теоретиков). Многие из тех аспирантов, которые были слушателями первых Школ, на одиннадцатой уже выступали как видные специалисты, лидеры коллективов в профильных организациях по тематике Школы. Как показал десятилетний опыт Школы, лекции ведущих ученых являются не столько «отчетом о проделанной работе», сколько формируют представления молодых специалистов о перспективах развития фундаментальной науки и материализуются в докладах аспирантов на последующих Школах, обеспечивая необходимую преемственность научных поколений.

Трудно переоценить успехи Школы за уже истекший десятилетний период в деле подготовки специалистов высокой квалификации и «кумулятивный» эффект от обсуждения результатов работы в кругу коллег из научных организаций Российской Федерации, которые занимают лидирующие позиции на мировом уровне по научной тематике Школы.

Ю. В. Заика, Н. И. Родченкова

ЮБИЛЕИ И ДАТЫ

ЕВСЕЙ ВИКТОРОВИЧ МОРОЗОВ (к 70-летию со дня рождения)



Евсей Викторович Морозов родился 3 октября 1947 г. в Ленинграде. В 1971 г. окончил физико-математический факультет Петрозаводского государственного университета им. О. В. Куусинена. С 1971 по 1985 г. работал в НИИ экономики и экономико-математических методов планирования Госплана БССР (г. Минск), в 1977 г. окончил заочную аспирантуру при НИИ, а в 1979 г. защитил кандидатскую диссертацию в Институте кибернетики АН УССР (г. Киев) по спе-

циальности «математическая кибернетика». С 1986 г. работает в Петрозаводском государственном университете, сначала в должности старшего преподавателя, затем в должности доцента (с 1992 г.) и профессора (с 1996 г.). До 1996 г. являлся заместителем декана математического факультета по научной работе, принимал активное участие в открытии магистратуры на факультете. В 1996 г. защитил докторскую диссертацию в Институте проблем управления РАН (г. Москва) по специальности «управление в технических системах». С 2000 г. работает в должности ведущего научного сотрудника лаборатории математической кибернетики Института прикладных математических исследований КарНЦ РАН.

Е. В. Морозов является ведущим специалистом в области теории вероятностей и теории массового обслуживания. Основной областью научных интересов Е. В. Морозова является исследование условий стационарности систем массового обслуживания. Им был разработан универсальный метод, основанный на теории регенеративных процессов, позволяющий проводить такого рода анализ при достаточном общих ограничениях на распределения входного потока и время обслуживания. На основе данного метода были получены условия стационарности для широкого класса систем обслуживания, включая системы с повторными вызовами, системы, зависящие от состояния, системы с оптическими буферами. Помимо этого исследования Е. В. Морозова затрагивают следующие важные направления: развитие методов слабой и квазирегенерации, свойства монотонности процессов обслуживания, асимптотические методы анализа систем массового обслуживания, ускоренное оценивание характеристик систем массового обслуживания.

Е. В. Морозов был и является руководителем грантов Российского фонда фундаментальных исследований (2001–2003, 2004–2006, 2007–2009, 2010–2012, 2015–2017 годов), Международного научного фонда ИНТАС, Со-

вета Министров Северных стран и Шведского института. Под руководством и при участии Е. В. Морозова были проведены такие значимые научные мероприятия, как Семинар «Queueing Theory» (Петрозаводск, 1987), Международный семинар «Coupling and regeneration» (Петрозаводск, 1992), Международная конференция «RAREEVENTS'99» (Рига, Латвия, 1999), Международный семинар «Applied Stochastic Models and Information Processes», посвященный 60-летию профессора Владимира Вячеславовича Калашникова (Петрозаводск, 2002), 5th Saint-Petersburg Workshop on Simulation (Санкт-Петербург, 2005), Российско-Скандинавский симпозиум «Probability Theory and Applied Probability» (Петрозаводск, 2006), Международная конференция «VALUETOOLS» в 2006–2009 годах, Международный семинар «Networking Games and Management» (Петрозаводск, 2013). Евсей Викторович был членом оргкомитета и председателем секций на многих международных конференциях и семинарах по проблемам теории массового обслуживания, телекоммуникационных сетей, стохастического моделирования, прикладной теории вероятностей. Е. В. Морозов состоит в редколлегии журнала «Проблемы анализа», а также был приглашенным редактором специального выпуска журнала «Queueing Systems: Theory and Applications» Vol. 46 (2004), посвященного памяти В. В. Калашникова. Под руководством Евсея Викторовича в ИПМИ КарНЦ РАН проходит еженедельный семинар «Вероятностные модели коммуникационных систем».

Научную работу Е. В. Морозов успешно сочетает с преподавательской деятельностью: ведет ряд курсов и спецкурсов в Петрозаводском государственном университете, руководит выпускными работами бакалавров и магистерскими диссертациями, осуществляет научное руководство аспирантами. Особая манера преподавания уже много лет делает Евсея Викторовича одним из наиболее любимых студентами лекторов Института математики и информационных технологий ПетрГУ. Под руководством Е. В. Морозова были защищены следующие кандидатские диссертации:

1. Аминова И. В. «Моделирование сетей обслуживания методом слабой регенерации» (2003, Петрозаводск)
2. Бородина А. В. «Регенеративная модификация метода расщепления для оценивания вероятности перегрузки в системах обслуживания» (2008, Петрозаводск)

3. Лукашенко О. В. «Асимптотический анализ и оценивание качества обслуживания систем с гауссовским входным потоком» (2012, Петрозаводск)
4. Некрасова Р. С. «Регенеративное оценивание и его применение к системам с конечным буфером» (2012, Петрозаводск)
5. Румянцев А. С. «Вероятностный анализ процесса нагрузки вычислительного кластера» (2012, Петрозаводск)
6. Потахина Л. В. «Анализ стационарности стохастических моделей телекоммуникационных систем методами теории восстановления» (2015, Петрозаводск).

Студенты и аспиранты, обучавшиеся под руководством Е. В. Морозова, поощрялись стипендиями Республики Карелия, повышенными стипендиями за особые успехи в учебно-исследовательской деятельности, как молодые ученые были отмечены грантами РФФИ, Президента РФ. Е. В. Морозов является членом Ученого совета ИПМИ КарНЦ РАН, членом диссертационных советов по защите кандидатских и докторских диссертаций в ПетрГУ.

Ученый с мировым именем, Евсей Викторович неоднократно выступает с приглашенными докладами и интенсивными курсами лекций, а также посещает с исследовательским визитом ведущие научные центры (Айзу, Япония; Лилль, Марне-ла-Валле, Антиб, София-Антиполис, Франция; Наварра, Сарагоса, Барселона, Памплона, Малага, Мадрид, Испания; Куопио, Оулу, Хельсинки, Финляндия; Гент, Бельгия; Тель-Авив, Хайфа, Израиль; Уорик, Великобритания; Пиза, Италия; Ольборг, Чалмерс, Лунд, Упсала, Умео, Стокгольм, Швеция; Гливице, Краков, Польша; Эйндховен, Нидерланды). В частности, Е. В. Морозов выступал с докладами на следующих международных конференциях: Symposium on stochastic modelling in communication networks (Лунд, Швеция, 1998); 2nd Nordic–Russian symposium on stochastic analysis (Бейтостолен, Норвегия, 1999); «Modern Problems in Applied Probability» (Новосибирск, 2000); 4th Saint-Petersburg Workshop on Simulation (Санкт-Петербург, 2001); семинар «A mathematical perspective on queueing and teletraffic modeling» (Стокгольм, Швеция, 2004); Euro-FGI Workshop on «New Trends in Modelling, Quantative Methods and Measurements» (Гент, Бельгия, 2007); «Mathematical methods for analysis and optimization of information telecommunication networks» (Минск, Белоруссия, 2009); «Теория

вероятностей и ее приложения», посвященная 100-летию со дня рождения Б. В. Гнеденко (Москва, 2012); Conference on Man-Machine Interactions (Гливице, Польша, 2013); 1st European Conference on Queueing Theory (Бельгия, Гент, 2014).

Результаты исследований Е. В. Морозова представлены в более чем 150 печатных работах. Евсей Викторович является автором и соавтором шести монографий. За последние пять лет им опубликовано более 50 работ, в том числе четыре монографии.

За успешную научную, научно-организационную и педагогическую деятельность Е. В. Морозов награжден:

- Почетной грамотой Министерства образования и науки Российской Федерации (2000),
- Почетной грамотой г. Петрозаводска (2008),
- Почетной грамотой ПетрГУ (2015).

Коллеги знают Евсея Викторовича как человека незаурядного и творческого, ценителя живописи, художественного слова, человека неиссякаемого трудолюбия. Ученики ценят его за отеческую заботу и отзывчивость, внимательное отношение и душевную теплоту общения. Е. В. Морозов ведет активный образ жизни, любит лыжный спорт и бег, с удовольствием путешествует.

Коллектив сотрудников ИПМИ КарНЦ РАН сердечно поздравляет юбиляра и желает ему крепкого здоровья, творческих успехов в научной деятельности, интересных путешествий и встреч с коллегами.

Ученики Евсея Викторовича Морозова

СПИСОК ОСНОВНЫХ НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ Е. В. МОРОЗОВА

1985. Некоторые результаты для системы массового обслуживания GI/GI/m с неидентичными каналами и потерями из очереди // Известия АН СССР. Сер. Техническая кибернетика. № 2.

1988. Критерий стационарности одного класса непуассоновских сетей массового обслуживания // Известия АН СССР. Сер. Техническая кибернетика. № 3.

1993. A comparison theorem for queueing system with non-identical channels // Lecture Notes in Mathematics. Vol. 1546.

1994. Wide sense regenerative processes with applications to multi-channel queues and networks // Acta Applicandae Mathematicae. Vol. 34.

1997. The stability of non-homogeneous queueing system with regenerative input // Journal of Mathematical Sciences. Vol. 89.

The tightness in the ergodic analysis of regenerative queueing processes // Queueing Systems. Vol. 27.

1998. Elements of Queueing Theory (Учебное пособие по теории массового обслуживания по специальности «прикладная математика», на английском языке). Petrozavodsk: University Press. 60 p.

2004. Communications systems: rare event simulation and effective bandwidths // Universidad Publica de Navarra. 68 p.

2013. Coupling and stochastic monotonicity of queueing process. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ. 72 с.

Введение в гауссовские системы обслуживания. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ. 80 с. (Соавт. Лукашенко О. В.)

Распределения с тяжелыми хвостами и их применения. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ. 68 с. (Соавт. Румянцев А. С.)

Регенеративный метод и его применение в анализе систем обслуживания. Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ. 76 с. (Соавт. Некрасова Р. С.)

Stability analysis of a two-station cascade queueing network // Annals of Operations Research. Vol. 202(1). (Соавт. В. Steyaert)

2014. Stability analysis of cascade networks via fluid limits // Performance Evaluation. Vol. 82. (Соавт. R. Delgado)

2015. Sufficient stability conditions for multi-class constant retrial rate systems // Queueing Systems. Vol. 81. (Соавт. K. Avrachenkov, B. Steyaert)

2017. Stability criterion of a multiserver model with simultaneous service // Annals of Operations Research. Vol. 252(1). (Соавт. А. С. Румянцев)

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Серия «Математическое моделирование и информационные технологии»

(требования к работам, представляемым к публикации
в «Трудах Карельского научного центра Российской академии наук», с 2015 г.)

«Труды Карельского научного центра Российской академии наук» (далее – Труды КарНЦ РАН) публикуют результаты завершенных оригинальных исследований в различных областях современной науки: теоретические и обзорные статьи, сообщения, материалы о научных мероприятиях (симпозиумах, конференциях и др.), персоналии (юбилеи и даты, потери науки), статьи по истории науки. Представляемые работы должны содержать новые, ранее не публиковавшиеся данные.

Статьи проходят обязательное рецензирование. Решение о публикации принимается редакционной коллегией серии или тематического выпуска Трудов КарНЦ РАН после рецензирования, с учетом научной значимости и актуальности представленных материалов. Редколлегия серий и отдельных выпусков Трудов КарНЦ РАН оставляет за собой право возвращать без регистрации рукописи, не отвечающие настоящим правилам.

При получении редакцией рукопись регистрируется (в случае выполнения авторами основных правил ее оформления) и направляется на отзыв рецензентам. Отзыв состоит из ответов на типовые вопросы «Анкеты» и может содержать дополнительные расширенные комментарии. Кроме того, рецензент может вносить замечания и правки в текст рукописи. Авторам высылаются электронная версия «Анкеты» и комментарии рецензентов. Доработанный экземпляр автор должен вернуть в редакцию вместе с первоначальным экземпляром и ответом на все вопросы рецензента не позднее, чем через месяц после получения рецензии.

Журнал имеет полноценную электронную версию на базе Open Journal System (OJS), позволяющую перевести предоставление и редактирование рукописи, общение автора с редколлегиями серий и рецензентами в электронный формат и обеспечивающую прозрачность процесса рецензирования при сохранении анонимности рецензентов (<http://journals.krc.karelia.ru/>).

Редационный совет журнала «Труды Карельского научного центра РАН» (Труды КарНЦ РАН) определил для себя в качестве одного из приоритетов полную открытость издания. Это означает, что пользователям на условиях свободного доступа разрешается: читать, скачивать, копировать, распространять, печатать, искать или находить полные тексты статей журнала по ссылке без предварительного разрешения от издателя и автора. Учредители журнала берут на себя все расходы по редакционно-издательской подготовке статей и их опубликованию.

Содержание номеров Трудов КарНЦ РАН, аннотации и полнотекстовые электронные варианты статей, а также другая полезная информация, включая настоящие Правила, доступны на сайтах – <http://transactions.krc.karelia.ru>; <http://journals.krc.karelia.ru>

Почтовый адрес редакции: 185910, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11, КарНЦ РАН, редакция Трудов КарНЦ РАН. Телефон: (8142) 762018.

ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ РУКОПИСИ

Статьи публикуются на русском или английском языке. Рукописи должны быть тщательно выверены и отредактированы авторами.

Статьи должны быть подписаны всеми авторами.

Объем рукописи (включая таблицы, список литературы, подписи к рисункам, рисунки) не должен превышать: для обзорных статей – 30 страниц, для оригинальных – 25, для сообщений – 15, для хроники и рецензий – 5–6. Объем рисунков не должен превышать 1/4 объема статьи. Рукописи большего объема (в исключительных случаях) принимаются при достаточном обосновании по согласованию с ответственным редактором.

Рукописи присылаются в электронном виде, а также в двух экземплярах, напечатанных на одной стороне листа формата А4. Все страницы, включая список литературы и подписи к рисункам, должны иметь сплошную нумерацию в нижнем правом углу. Страницы с рисунками не нумеруются.

ОБЩИЙ ПОРЯДОК РАСПОЛОЖЕНИЯ ЧАСТЕЙ СТАТЬИ

Элементы статьи должны располагаться в следующем порядке: *УДК* курсивом на первой странице, в левом верхнем углу; заглавие статьи на русском языке заглавными буквами полужирным шрифтом; инициалы, фамилии всех авторов на русском языке полужирным шрифтом; полное название организации – место работы каждого автора в именительном падеже на русском языке курсивом (если авторов несколько и работают они в разных учреждениях, то следует отметить арабскими цифрами соответствие фамилий авторов учреждениям, в которых они работают; если все авторы статьи работают в одном учреждении, можно не указывать место работы каждого автора отдельно); аннотация на русском языке; ключевые слова на русском языке; инициалы, фамилии всех авторов на английском языке полужирным шрифтом; название статьи на английском языке заглавными буквами полужирным шрифтом; аннотация на английском языке; ключевые слова на английском языке; текст статьи (статьи экспериментального характера, как правило, должны иметь разделы: ВВЕДЕНИЕ. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ. ВЫВОДЫ. ЛИТЕРАТУРА); благодарности; литература (с новой страницы).

Дополнительные сведения об авторах: фамилия, имя, отчество всех авторов полностью на русском и английском языке; полный почтовый адрес каждой организации (страна, город) на русском и английском языке; должности, научные звания, ученые степени авторов; адрес электронной почты для каждого автора; телефон для контактов с авторами статьи (можно один на всех авторов).

ЗАГЛАВИЕ СТАТЬИ должно точно отражать содержание статьи и содержать не более 8–10 значащих слов.

АННОТАЦИЯ должна быть лишена вводных фраз, содержать только главную информацию статьи, не превышать объем – 15 строк.

Отдельной строкой приводится перечень КЛЮЧЕВЫХ СЛОВ. Ключевые слова или словосочетания отделяются друг от друга точкой с запятой, в конце фразы ставится точка.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ должны содержать сведения об объекте исследования с обязательным указанием латинских названий и сводок, по которым они приводятся, авторов классификаций и пр. Транскрипция географических названий должна соответствовать атласу последнего года издания. Единицы физических величин приводятся по Международной системе СИ. Желательна статистическая обработка всех количественных данных. Необходимо возможно точнее обозначать местонахождения (в идеале – с точным указанием географических координат).

ИЗЛОЖЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ должно заключаться не в пересказе содержания таблиц и графиков, а в выявлении следующих из них закономерностей. Автор должен сравнить полученную им информацию с имеющейся в литературе и показать, в чем заключается ее новизна. Следует ссылаться на табличный и иллюстративный материал так: на рисунки, фотографии и таблицы в тексте (рис. 1, рис. 2, табл. 1, табл. 2 и т. д.), фотографии, помещаемые на вкладышах (рис. I, рис. II). Обсуждение завершается формулировкой основного вывода, которая должна содержать конкретный ответ на вопрос, поставленный во Введении. Ссылки на литературу в тексте даются номерами в квадратных скобках.

ТАБЛИЦЫ нумеруются в порядке упоминания их в тексте, каждая таблица имеет свой заголовок. Диаграммы и графики не должны дублировать таблицы. Материал таблиц должен быть понятен без дополнительного обращения к тексту. Все сокращения, использованные в таблице, должны быть пояснены в Примечании, расположенном под ней. При повторении цифр в столбцах нужно их повторять, при повторении слов – в столбцах ставить кавычки. Таблицы могут быть книжной или альбомной ориентации.

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ должны содержать достаточно полную информацию, для того чтобы приводимые данные могли быть понятны без обращения к тексту (если эта информация уже не дана в другой иллюстрации). Аббревиации расшифровываются в подрисуночных подписях.

СОКРАЩЕНИЯ. Разрешаются лишь общепринятые сокращения – названия мер, физических, химических и математических величин и терминов и т. п. Все сокращения должны быть расшифрованы, за исключением небольшого числа общепотребительных.

БЛАГОДАРНОСТИ. В этой рубрике выражается признательность частным лицам, сотрудникам учреждений и фондам, оказавшим содействие в проведении исследований и подготовке статьи, а также указываются источники финансирования работы.

ЛИТЕРАТУРА. Пристатейные ссылки и/или списки пристатейной литературы следует оформлять по ГОСТ Р 7.0.5—2008. Библиографическая ссылка. Общие требования и правила составления (http://www.bookchamber.ru/GOST_P_7.0.5.—2008). Список работ представляется в алфавитном порядке. Все ссылки даются на языке оригинала (названия на японском, китайском и других языках, использующих нелатинский шрифт, пишутся в русской транскрипции). Сначала приводится список работ на русском языке и на языках с близким алфавитом (украинский, болгарский и др.), а затем – работы на языках с латинским алфавитом. В списке литературы между инициалами ставится пробел.

ТРАНСЛИТЕРИРОВАННЫЙ СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ (References). Приводится отдельным списком, повторяя все позиции основного списка литературы. Описания русскоязычных работ указываются в латинской транслитерации, рядом в квадратных скобках помещается их перевод на английский язык. Выходные данные приводятся на английском языке (допускается транслитерация названия издательства). При наличии переводной версии источника можно указать его библиографическое описание вместо транслитерированного.

Библиографические описания прочих работ приводятся на языке оригинала. Для составления списка рекомендуется использование бесплатной программы транслитерации на сайте <http://translit.ru/>, вариант ВСІ.

Внимание! С 2015 года каждой статье, публикуемой в «Трудах Карельского научного центра РАН», редакцией присваивается уникальный идентификационный номер цифрового объекта (DOI) и статья включается в базу данных Crossref. **Обязательным условием является указание в списках литературы DOI для тех работ, у которых он есть.**

Электронные версии статей выпусков серии «Математическое моделирование и информационные технологии» принимаются в формате .tex (LaTeX 2ε) с использованием стилевого файла, который находится по адресу <http://transactions.krc.karelia.ru/section.php?id=755>.

TABLE OF CONTENTS

G. A. Borisov, T. P. Tikhomirova. PROBLEMS AND METHODS OF RESOURCE-SAVING OPTIMIZATION IN AN ELECTRIC POWER SYSTEM.....	3
V. M. Bure, O. A. Mitrofanova. AN EXPERIENCE OF USING STATISTICAL METHODS FOR THE ANALYSIS OF ECOLOGICAL DATA	12
O. A. Dymova. MODELING OF THE MESO- AND SUBMESOSCALE DYNAMIC PROCESSES IN THE BLACK SEA COASTAL ZONES	21
Yu. V. Zaika, E. K. Kostikova. INVERSE PROBLEM OF IDENTIFICATION OF HYDROGEN THERMODESORPTION SPECTRA.....	31
Yu. V. Zaika, N. I. Rodchenkova. PARAMETRIC IDENTIFICATION ALGORITHM FOR A FAST HYDROGEN PERMEABILITY MODEL	48
A. N. Kirillov, I. V. Danilova. POLTEROVICH – HENKIN MODEL WITH DEPRECIATION	60
Yu. L. Pavlov. A CASE OF LIMIT BEHAVIOUR OF VERTEX DEGREES IN CONDITIONAL CONFIGURATION GRAPHS	66
A. S. Rumyantsev, K. A. Kalinina, T. E. Morozova. STOCHASTIC MODELING OF A HIGH-PERFORMANCE CLUSTER WITH HYSTERETIC CONTROL OF SERVICE RATE.....	76
N. Yu. Enatskaya. COMBINATORIAL ANALYSIS OF THE DOMINOES SCHEME AND THE CASE OF FIXED MINIMAL FIGURE ON A DOMINO TILE	86
N. Yu. Enatskaya. ANALYSIS OF AN ALLOCATION SCHEME WITH LIMITED STEPS AND ITS APPLICATION FOR THE STUDY OF PERMUTATION DISPERSION	94
CHRONICLE	
Yu. V. Zaika, N. I. Rodchenkova. 11 th International Kurdyumov School-Conference for Young Scientists and Specialists "INTERACTION OF HYDROGEN ISOTOPES WITH STRUCTURAL MATERIALS: EXPERIMENT AND MATHEMATICAL MODELLING" (IHISM'16) (Petrozavodsk, June 27 – July 3, 2016)	101
DATES AND ANNIVERSARIES	
Evsey V. Morozov (on the 70 th anniversary).....	104
INSTRUCTIONS FOR AUTHORS	107

Научное издание

**Труды Карельского научного центра
Российской академии наук**
№ 8, 2017

Серия МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

*Печатается по решению
Президиума Карельского научного центра РАН*

Выходит 12 раз в год

Свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-65995 от 06.06.2016 г.
выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи,
информационных технологий и массовых коммуникаций

Редактор А. И. Мокеева
Компьютерная верстка Е. Н. Спектор
Стилевой файл А. С. Румянцев

Подписано в печать 23.08.2017. Дата выхода 31.08.2016. Формат 60x84^{1/8}.
Гарнитура CMR. Печать офсетная. Уч.-изд. л. 10,0. Усл. печ. л. 13,0.
Тираж 100 экз. Заказ 444. Цена свободная

Учредители: Карельский научный центр РАН; Институт биологии КарНЦ РАН;
Институт водных проблем Севера КарНЦ РАН; Институт геологии КарНЦ РАН; Институт леса КарНЦ РАН;
Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН

Издатель: Карельский научный центр РАН, 185000, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11

Оригинал-макет: Редакция научного издания «Труды КарНЦ РАН»

Типография: Редакционно-издательский отдел КарНЦ РАН
185003, г. Петрозаводск, пр. А. Невского, 50