

Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр
Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук»
(ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН)

ТРУДЫ НИИСИ РАН

ТОМ 9 № 2

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СЛОЖНЫХ СИСТЕМ:**

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ПРИКЛАДНЫЕ АСПЕКТЫ

МОСКВА
2019

Редакционный совет ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН:

В.Б. Бетелин (председатель),
Е.П. Велихов, В.А. Галатенко, В.Б. Демидович (отв. секретарь),
Ю.В.Кузнецов (отв. секретарь), Б.В. Крыжановский, А.Г. Кушниренко,
А.Г. Мадера, М.В. Михайлюк, В.Я. Панченко, В.П. Платонов, В.Н. Решетников

Главный редактор журнала:

В.Б. Бетелин

Научный редактор номера:

А.Г. Мадера

Тематика номера:

Исследование физических процессов и их моделирование, информационные и компьютерные технологии, математические исследования.

Журнал публикует оригинальные статьи по следующим областям исследований: математическое и компьютерное моделирование, обработка изображений, визуализация, системный анализ, методы обработки сигналов, информационная безопасность, информационные технологии, высокопроизводительные вычисления, оптико-нейронные технологии, микро- и нанoeлектроника, математические исследования и вопросы численного анализа, история науки и техники.

The topic of the issue:

Research and modeling of physical processes, Information and computer technologies, Mathematical research.

The Journal publishes novel articles on the following research areas: mathematical and computer modeling, image processing, visualization, system analysis, signal processing, information security, information technologies, high-performance computing, optical-neural technologies, micro- and nanoelectronics, mathematical researches and problems of numerical analysis, history of science and of technique.

Заведующий редакцией: Ю.Н.Штейников

Издатель: ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН,
117218, Москва, Нахимовский проспект 36, к. 1

СОДЕРЖАНИЕ

I. ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ИХ МОДЕЛИРОВАНИЕ

<i>И.В. Афанаскин, С.Г. Вольпин, А.В. Родителев, А.А. Колеватов.</i> Модель двойной проницаемости для анализа разработки карбонатных коллекторов на базе концепции суперэлементов.....	4
<i>В.В. Привезенцев, А.Н. Палагушкин, Е.П. Кириленко, А.В. Горячев, О.С. Зилова, А.А. Бурмистров, А.А. Батраков.</i> Структура и состав кремния, легированного ионами $^{64}\text{Zn}^+$ в условиях горячей имплантации и отожженного в кислороде при повышенных температурах.....	12
<i>В.В. Привезенцев, А.Н. Палагушкин, Э.А. Штейнман, А.Н. Терещенко, Н.Н. Колесников, А.В. Макунин, С.В.Ксенич.</i> Изменение структуры и свойств кварца, последовательно имплантированного ионами Zn и F, в процессе термических отжигов.....	24
<i>К.Д. Ашмян, А.К. Пономарев, О.В. Ковалева.</i> Формирование базы данных для новой методики учета фазовых состояний парафинистых нефтей	32
<i>А.А. Воробьев, А.Г. Мадера.</i> Компьютерное моделирование гибкого кондуктивного теплоотвода для охлаждения мощных микросхем	36
<i>А.Г. Мадера.</i> Обобщенная математическая модель нелинейных стохастических тепловых процессов в сложных электронных системах.....	40
<i>М.Ж. Акжолов.</i> Численное исследование температурного поля воздуха при нагревании от теплового источника с учетом и без учета теплопроводности.....	46

II. ИНФОРМАЦИОННЫЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

<i>А.Б. Бетелин, А.А. Прилипко, Г.А. Прилипко, С.Г. Романюк, Д.В. Самборский.</i> DRBD как средство для создания устройств хранения данных в среде ОС GNU Linux.....	50
<i>А.В. Мальцев, Д.В. Омельченко.</i> Технологии и методы погружения оператора в трехмерную виртуальную среду.....	59

III. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

<i>Д.В. Гулуа, Е.В. Гулуа.</i> Алгоритм расщепления трёхслойных полудискретных схем для эволюционного уравнения и оценка погрешности приближённого решения.....	64
<i>А.В. Горшков.</i> Спектральное представление функции ротора внешней задачи Стокса в цилиндрических областях.....	71
<i>Е.К. Гребенникова.</i> Применение псевдообратной матрицы для моделирования процессов различной физической природы: обзор существующей литературы.....	75

Модель двойной проницаемости для анализа разработки карбонатных коллекторов на базе концепции суперэлементов

И.В. Афанаскин¹, С.Г. Вольпин², А.В. Родителей³, А.А. Колеватов⁴

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва, Россия

E-mail's: ¹ivan@afanaskin.ru, ²sergovlpin@gmail.com, ³avrod_94@mail.ru, ⁴sanych1980@gmail.com

Аннотация. В работе предложена методика численного моделирования разработки нефтяных месторождений в карбонатных трещиновато-поровых коллекторах. Фильтрация предполагается двухфазной. Используется концепция двойной проницаемости. Численная схема полностью явная, аппроксимация по пространству построена на сетке суперэлементов, что позволяет существенно увеличить скорость вычислений. Для корректных расчетов необходима адаптация на историю разработки. На примере модели реального месторождения предлагаемая методика сравнивается с расчетами на симуляторе Rubis Карра Engineering. Получено хорошее совпадение результатов прогнозных расчетов.

Ключевые слова: моделирование разработки нефтяных месторождений, двухфазная фильтрация, карбонатный коллектор, трещиновато-поровый коллектор, модель двойной проницаемости, суперэлементы.

Введение

Трещиновато-пористые карбонатные коллектора характеризуются большой неоднородностью фильтрационно-емкостных свойств, что обуславливает их меньшую нефтеотдачу по сравнению с другими традиционными коллекторами. Поэтому при принятии любых решений о разработке таких коллекторов обязательно использовать компьютерное моделирование.

При задании свойств и визуализации результатов трещиновато-поровых коллекторов считается, что пласт содержит в два раза больше ячеек ($2N$). Тогда считается, что первая половина сетки (ячейки с 1-ой по N -ую) описывает матрицу, а вторая половина сетки (ячейки с $N+1$ -ой по $2N$ -ую) описывает трещины. Каждой ячейке матрицы должна соответствовать своя активная ячейка трещины. Поэтому актуально использование технологий, позволяющих ускорить моделирование даже для средних по размерам месторождений. Одной из таких технологий является использование суперэлементной вычислительной сетки. Поэтому данная работа посвящена модели двойной проницаемости для анализа разработки карбонатных коллекторов на базе концепции суперэлементов.

1. Математическая модель

Рассмотрим математическую модель фильтрации карбонатном пласте в следующих условиях:

1. Фильтрация двухфазная (нефть и вода), пластовое давление выше давления насыщения нефти газом. Жидкости несмешивающиеся.
2. Жидкости слабосжимаемые, пласт упругий.
3. Пласт карбонатный, пустотное пространство представлено порами и трещинами.
4. Трещины характеризуются высокой проницаемостью и низкой пустотностью (пористостью).
5. Поры (так называемая «матрица») характеризуются низкой проницаемостью и высокой пористостью.
6. В каждом элементарном объеме пласта одновременно присутствуют поры и трещины. Блоки матрицы пересекаются трещинами регулярным образом.
7. В скважину работают как трещины, так и матрица. Внутри матрицы возможен переток жидкости между различными точками пласта. Эти два предположения вместе называются моделью «двойной проницаемости».
8. Трещины и поровая матрица обмениваются между собой

жидкостью, переток псевдоустановившийся.

При таких условиях фильтрация может быть описана двумя системами уравнений сохранения объемов фаз в стандартных условиях и обобщенного закона Дарси, записанных отдельно для двух сред: пористой матрицы и для трещин [1, 4, 5]. Между собой эти системы уравнений связываются источниками слагаемыми, описывающими перетоки фаз между средами с различными видами пустотности.

Уравнения сохранения объемов нефти и воды в трещинах:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi_f S_{o,f}}{B_{o,f}} \right) + \nabla \left(\frac{\vec{W}_{o,f}}{B_{o,f}} \right) = -\bar{q}_{o,f} + \bar{q}_{o,mf}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi_f S_{w,f}}{B_{w,f}} \right) + \nabla \left(\frac{\vec{W}_{w,f}}{B_{w,f}} \right) = -\bar{q}_{w,f} + \bar{q}_{w,mf} + \bar{q}_{a,f}, \quad (2)$$

обобщенный закон Дарси в трещинах

$$\vec{W}_{o,f} = -\frac{k_f k_{ro,f}}{\mu_o} [\nabla(P_{o,f}) - \rho_{o,f} g \nabla(D_f)], \quad (3)$$

$$\vec{W}_{w,f} = -\frac{k_f k_{rw,f}}{\mu_w} [\nabla(P_{w,f}) - \rho_{w,f} g \nabla(D_f)], \quad (4)$$

где ϕ_f и k_f - пористость и абсолютная проницаемость трещин; $S_{o,f}$ и $S_{w,f}$, $B_{o,f}$ и $B_{w,f}$, $\vec{W}_{o,f}$ и $\vec{W}_{w,f}$, $\bar{q}_{o,f}$ и $\bar{q}_{w,f}$, $k_{ro,f}$ и $k_{rw,f}$, $P_{o,f}$ и $P_{w,f}$, $\rho_{o,f}$ и $\rho_{w,f}$ - насыщенность, объемный коэффициент, вектор скорости фильтрации, плотность источника (стока), моделирующего работу скважины, относительная фазовая проницаемость, давление и плотность в пластовых условиях нефти и воды в трещинах; $\bar{q}_{o,mf}$ и $\bar{q}_{w,mf}$ - плотность перетока нефти и воды из матрицы в трещины; μ_o и μ_w - вязкость нефти и воды; $\bar{q}_{a,f}$ - плотность источника (стока), моделирующего приток воды из законтурной области в трещины; D_f - глубина залегания трещины по вертикали; g - ускорение свободного падения.

Система уравнений (1)-(4) дополняется следующими замыкающими соотношениями:

$$S_{o,f} + S_{w,f} = 1, \quad (5)$$

$$\phi_f = \phi_{f,0} [1 + C_{r,f} (P_f - P_{f,0})], \quad (6)$$

$$B_\alpha = B_{\alpha,0} [1 - C_\alpha (P - P_0)], \quad \alpha = o, w, \quad (7)$$

$$\rho_\alpha = \rho_{\alpha,STC} / B_\alpha, \quad \alpha = o, w, \quad (8)$$

$$P_{o,f} - P_{w,f} = P_{c,f} (S_{w,f}), \quad (9)$$

где $\phi_{0,f}$ - пористость трещин при начальном пластовом давлении; $B_{\alpha,0}$, $\alpha = o, w$ - объемный коэффициент фазы α при начальном пластовом давлении; $C_{r,f}$, $C_{o,f}$ и $C_{w,f}$ - сжимаемость трещин, нефти и воды; ρ_α , $\alpha = o, w$ - плотность фазы α ; $\rho_{\alpha,STC}$, $\alpha = o, w$ - плотность фазы α в стандартных условиях; $P_{c,f}$ - капиллярное давление в системе нефть-вода.

Систему уравнений (1)-(4) с учетом соотношений (5)-(9) принимая $S_f \equiv S_{w,f}$ и $P_f \equiv P_{o,f}$, а также используя подход, изложенный в [6], можно преобразовать к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} & \frac{\phi_{f,0}}{B_{w,0}} [C_{r,f} + (C_w - C_o) S_f + C_o] \frac{\partial P_f}{\partial t} + \\ & + \frac{B_{o0}}{B_{w,0}} \nabla \left(\frac{\vec{W}_{o,f}}{B_{o,f}} \right) + \nabla \left(\frac{\vec{W}_{w,f}}{B_{w,f}} \right) = \\ & = -\frac{B_{o0}}{B_{w,0}} [\bar{q}_{o,f} - \bar{q}_{o,mf}] - \bar{q}_{w,f} + \bar{q}_{w,mf} + \bar{q}_{a,f} \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\phi_{f,0}}{B_{w,0}} \left[\frac{\partial S_f}{\partial t} + (C_{r,f} + C_w) S_f \frac{\partial P_f}{\partial t} \right] + \\ & + \nabla \left(\frac{\vec{W}_{w,f}}{B_{w,f}} \right) = -\bar{q}_{w,f} + \bar{q}_{w,mf} + \bar{q}_{a,f} \end{aligned} \quad (11)$$

$$\vec{W}_{o,f} = -\frac{k_f k_{ro,f}}{\mu_o} [\nabla(P_f) - \rho_{o,f} g \nabla(D_f)], \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \vec{W}_{w,f} = -\frac{k_f k_{rw,f}}{\mu_w} [\nabla(P_f) - \nabla(P_{c,f}) - \\ & - \rho_{w,f} g \nabla(D_f)] \end{aligned} \quad (13)$$

Система уравнений (10)-(13) дополняется следующими начальными условиями:

$$P_f = P_f(x, y, z, t = 0), \quad S_f = S_f(x, y, z, t = 0) \quad (14)$$

и граничными условиями непротекания на внешних границах. Приток воды в трещины из законтурной области (как уже говорилось ранее) учитывается с помощью слагаемого $\bar{q}_{a,f}$, а внутренние граничные условия на скважинах учитываются с помощью слагаемых $\bar{q}_{o,f}$ и $\bar{q}_{w,f}$.

Аналогично системе уравнений (10)-(13) для трещин получаем систему уравнений для пористой матрицы:

$$\frac{\phi_{m,0}}{B_{w,0}} [C_{r,m} + (C_w - C_o)S_m + C_o] \frac{\partial P_m}{\partial t} + \frac{B_{o,0}}{B_{w,0}} \nabla \left(\frac{\vec{W}_{o,m}}{B_{o,m}} \right) + \nabla \left(\frac{\vec{W}_{w,m}}{B_{w,m}} \right) = \quad (15)$$

$$= -\frac{B_{o,0}}{B_{w,0}} [\bar{q}_{o,m} + \bar{q}_{o,mf}] - \bar{q}_{w,m} - \bar{q}_{w,mf} + \bar{q}_{a,m}$$

$$\frac{\phi_{m,0}}{B_{w,0}} \left[\frac{\partial S_m}{\partial t} + (C_{r,m} + C_w)S_m \frac{\partial P_m}{\partial t} \right] + \nabla \left(\frac{\vec{W}_{w,m}}{B_{w,m}} \right) = -\bar{q}_{w,m} - \bar{q}_{w,mf} + \bar{q}_{a,m} \quad (16)$$

$$\vec{W}_{o,m} = -\frac{k_m k_{ro,m}}{\mu_o} [\nabla(P_m) - \rho_{o,m} g \nabla(D_m)], \quad (17)$$

$$\vec{W}_{w,m} = -\frac{k_m k_{rw,m}}{\mu_w} [\nabla(P_m) - \nabla(P_{c,m}) - \rho_{w,m} g \nabla(D_m)] \quad (18)$$

где все обозначения аналогичны приведенным в комментариях к формулам (1)-(4) и (5)-(9) с той только разницей, что нижний индекс «m» означает пористую матрицу.

Аналогичным образом система уравнений (15)-(18) дополняется начальными условиями:

$$P_m = P_m(x, y, z, t = 0), \quad S_m = S_m(x, y, z, t = 0) \quad (19)$$

и граничными условиями непротекания на внешних границах. Приток воды в пористую матрицу из законтурной области учитывается с помощью слагаемого $\bar{q}_{a,m}$, а внутренние граничные условия на скважинах учитываются с помощью слагаемых $\bar{q}_{o,m}$ и $\bar{q}_{w,m}$.

Перетоки нефти и воды между трещинами и пористой матрицей учитываются с помощью слагаемых $\bar{q}_{o,mf}$ и $\bar{q}_{w,mf}$. Эти слагаемые связывают системы уравнений (10)-(13) и (15)-(18).

2. Численная схема

В качестве расчетной сетки примем сетку суперэлементов [3, 7]. Это такая сетка, размер ячеек которой сопоставим с расстоянием между скважинами (300-500 м), а количество ячеек в одном горизонтальном слое примерно равно количеству скважин. В качестве центров ячеек используются сами скважины. В неохваченных бурением площадях для построения сетки используются фиктивные скважины. Форма ячеек сетки соответствует сетке Вороного. Такая вычислительная сетка благодаря малому количеству ячеек позволяет проводить расчеты с высокой скоростью, что особенно актуально при решении задач оптимизации разработки и автоматической (полуавтоматической) адаптации моделей.

Сетка суперэлементов в плане близка по своему виду к разбиению залежи на зоны дренирования по методу А.П. Крылова [8]. Можно выделить следующие основные этапы построения суперэлементной сетки в плане:

1. Отображение на карте границ залежи и скважин.
2. Объединение внешних скважин и построение по ним выпуклой оболочки.
3. Проведение триангуляции Делоне по скважинам.
4. Отображение элементов Вороного, опуская перпендикуляры из середин ребер построенной триангуляции.

Для построения 3D суперэлементной сетки слой 2D копируется со смещением по вертикальной оси. При этом толщина и глубина залегания ячеек в пределах одного слоя может быть переменной, но слои должны залегать один над другим, без разрывов между ними.

Запишем 2D плоскую полностью явную схему (по давлению и насыщенности) для уравнений (10), (11), (15), (16):

$$\begin{aligned} & \frac{(\phi_{f,0})_i}{B_{w,0}} [C_{r,f} + (C_w - C_o)(S_f)_i^n + C_o] \times \\ & \times \frac{(P_f)_i^{n+1} - (P_f)_i^n}{\Delta t^{n+1}} + \sum_{j=1}^{N_i} \left\{ A_{ij} h_{ij} \left[\left(\frac{W_{w,f}}{B_{w,f}} \right)_{ij}^n + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{B_{o,0}}{B_{w,0}} \left(\frac{W_{w,f}}{B_{w,f}} \right)_{ij}^n \right] \right\} = -\frac{B_{o,0}}{B_{w,0}} [(q_{o,f})_i^n - \\ & - (q_{o,mf})_i^n] - (q_{w,f})_i^n + (q_{w,mf})_i^n + (q_{a,f})_i^n \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} & \frac{(\phi_{f,0})_i}{B_{w,0}} \left[\frac{(S_f)_i^{n+1} - (S_f)_i^n}{\Delta t^{n+1}} + (C_{r,f} + C_w)(S_f)_i^n \times \right. \\ & \times \left. \frac{(P_f)_i^{n+1} - (P_f)_i^n}{\Delta t^{n+1}} \right] + \sum_{j=1}^{N_i} \left[A_{ij} h_{ij} \left(\frac{W_{w,f}}{B_{w,f}} \right)_{ij}^n \right] = \\ & = -(q_{w,f})_i^n + (q_{w,mf})_i^n + (q_{a,f})_i^n \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} & \frac{(\phi_{m,0})_i}{B_{w,0}} [C_{r,m} + (C_w - C_o)(S_m)_i^n + C_o] \times \\ & \times \frac{(P_m)_i^{n+1} - (P_m)_i^n}{\Delta t^{n+1}} + \sum_{j=1}^{N_i} \left\{ A_{ij} h_{ij} \left[\left(\frac{W_{w,m}}{B_{w,m}} \right)_{ij}^n + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{B_{o,0}}{B_{w,0}} \left(\frac{W_{w,m}}{B_{w,m}} \right)_{ij}^n \right] \right\} = -\frac{B_{o,0}}{B_{w,0}} [(q_{o,m})_i^n + \\ & + (q_{o,mf})_i^n] - (q_{w,m})_i^n - (q_{w,mf})_i^n + (q_{a,m})_i^n \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} & \frac{(\phi_{m,0})_i}{B_{w,0}} \left[\frac{(S_m)_i^{n+1} - (S_m)_i^n}{\Delta t^{n+1}} + (C_{r,m} + C_w)(S_m)_i^n \times \right. \\ & \times \left. \frac{(P_m)_i^{n+1} - (P_m)_i^n}{\Delta t^{n+1}} \right] + \sum_{j=1}^{N_i} \left[A_{ij} h_{ij} \left(\frac{W_{w,m}}{B_{w,m}} \right)_{ij}^n \right] = \\ & = -(q_{w,m})_i^n - (q_{w,mf})_i^n + (q_{a,m})_i^n \end{aligned} \quad (23)$$

где нижний индекс i - номер ячейки; верхний индекс n - номер шага по времени; нижний индекс ij - переток из ячейки i в ячейку j ; A_{ij} - длина совместного ядра ячеек i и j ; h_{ij} - средняя между ячейками i и j толщина пласта; N_i - количество соседей для ячейки i ; Δt^{n+1} - переменный шаг по времени, задаваемый таким образом, чтобы максимальное по всем ячейкам сетки изменение за один временной шаг насыщенности и давления не превышало заданного предела [1].

Из уравнений (20)-(23) легко в явном виде выражаются неизвестные $(P_f)_i^{n+1}$, $(S_f)_i^{n+1}$, $(P_m)_i^{n+1}$, $(S_m)_i^{n+1}$.

Использование полностью явной схемы оправдано благодаря большим размерам ячеек. Получение 3D схемы не составляет труда и опущено здесь для экономии места и времени.

Приток нефти и воды в скважины вычисляется следующим образом:

$$(q_{\alpha,\beta})_i^n = (PI_{\alpha,\beta})_i^n [(P_\beta)_i^n - (P_{well})_i^n], \quad \alpha = o, w, \quad \beta = f, m, \quad (24)$$

$$(PI_{\alpha,\beta})_i^n = \frac{2\pi(k_\beta)_i h_i}{\ln \left[\frac{(R_c)_i}{(r_w)_i} \right] + Skin_i^n} \cdot \frac{(k_{r\alpha,\beta})_i^n}{\mu_\alpha (B_{\alpha,\beta})_i^n},$$

$$\alpha = o, w, \quad \beta = f, m, \quad (R_c)_i^n = 0,14\sqrt{2F_i}, \quad (25)$$

где $(PI_{\alpha,\beta})_i^n$ - коэффициент продуктивности скважины в блоке сетки i по фазе $\alpha = o, w$ в среде $\beta = f, m$ на шаге по времени n ; $(P_{well})_i^n$ - давление на забое скважины; k_β - абсолютная проницаемость в среде $\beta = f, m$; h_i - эффективная толщина пласта-коллектора; R_c - радиус контура питания; r_w - радиус скважины; $Skin_i^n$ - скин-фактор скважины (характеризует состояние околоскважинной зоны пласта); F_i - площадь i -ой ячейки сетки.

Забойное давление вычисляется как:

$$(P_{well})_i^n = \frac{(PI_f)_i^n (P_f)_i^n + (PI_m)_i^n (P_m)_i^n - (q_l)_i^n}{(PI_f)_i^n + (PI_m)_i^n}, \quad (26)$$

$$(PI_\beta)_i^n = (PI_{o,\beta})_i^n + (PI_{w,\beta})_i^n, \quad \beta = f, m, \quad (27)$$

$$(q_l)_i^n = (q_o)_i^n + (q_w)_i^n,$$

$$(q_\alpha)_i^n = (q_{\alpha,f})_i^n + (q_{\alpha,m})_i^n, \quad \alpha = o, w, \quad (28)$$

где $(q_l)_i^n$ - дебит скважины по жидкости.

Скорости фильтрации $(W_{o,f})_{ij}^n$ и $(W_{w,f})_{ij}^n$, $(W_{o,m})_{ij}^n$ и $(W_{w,m})_{ij}^n$, а также перетоки между трещинами и пористой матрицей $(q_{o,mf})_i^n$ и $(q_{w,mf})_i^n$ вычисляются аналогично [2].

3. Моделирование реального месторождения

Рассмотрим применение предлагаемого подхода к моделированию разработки месторождений нефти в карбонатном трещиновато-пористом коллекторе при использовании концепции двойной проницаемости и суперэлементной расчетной сетки на примере одного из месторождений

Западно-Сибирской нефтегазоносной провинции.

Продуктивный пласт представлен трещиновато-пористыми карбонатными породами мелового периода. Залежь нефти пластового типа, литологически ограниченная. Основные геолого-физические параметры пласта:

1. Эффективная нефтенасыщенная толщина - 12,5 м.
2. Проницаемость трещин 531 мД.
3. Пористость трещин 0,5 %.
4. Проницаемость поровой матрицы - 1,5 мД
5. Пористость матрицы - 22 %
6. Начальное пластовое давление - 197 бар
7. Вязкость нефти в пластовых условиях 1,24 мПа·с; объемный коэффициент

нефти $1,176 \text{ м}^3/\text{м}^3$; сжимаемость нефти $9,3 \cdot 10^{-5} \text{ 1/бар}$; плотность нефти в стандартных условиях 863 кг/м^3 ; растворимость газа в нефти $70 \text{ м}^3/\text{м}^3$; давление насыщения нефти газом 70 бар.

8. Вязкость воды в пластовых условиях 0,36 мПа·с; объемный коэффициент воды $1,01 \text{ м}^3/\text{м}^3$; сжимаемость воды $4,7 \cdot 10^{-5} \text{ 1/бар}$; плотность воды в стандартных условиях 1018 кг/м^3 .

Относительные фазовые проницаемости и капиллярные давления в системе нефть-вода приведены на рис. 1 и 2.

Всего в разработке перебывало 28 скважин, из них 9 нагнетательных и 19 добывающих. Имена скважин изменены.

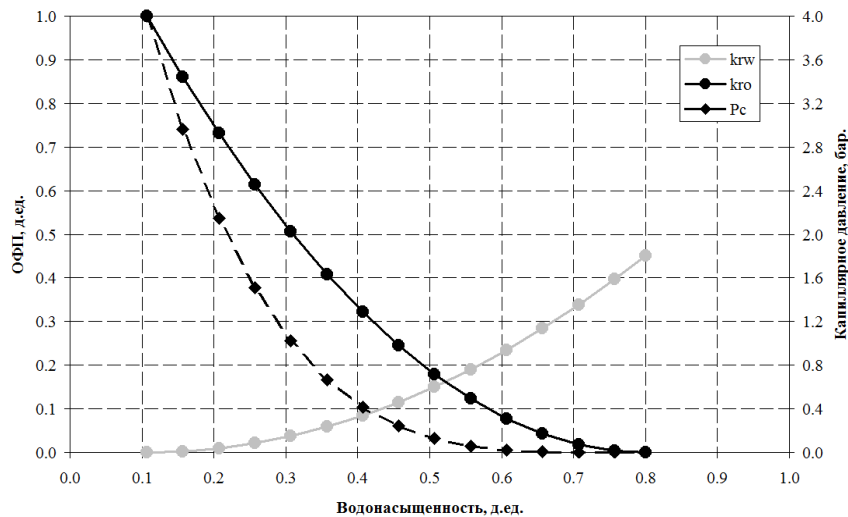


Рис. 1. Относительные фазовые проницаемости (ОФП) для нефти (kro) и воды (krw), а также капиллярное давление (Pc) в системе нефть-вода для трещин

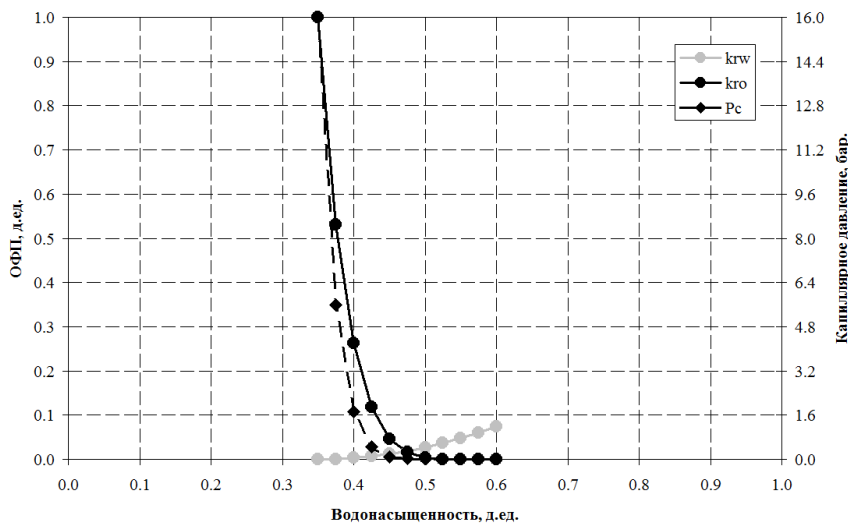


Рис. 2. Относительные фазовые проницаемости (ОФП) для нефти (kro) и воды (krw), а также капиллярное давление (Pc) в системе нефть-вода для пор

Для оценки применимости предлагаемой расчетной методики были созданы две гидродинамические модели - одна по предлагаемой методике, а вторая с помощью симулятора Rubis Карра Engineering [9]. Расчетные сетки приведены на рис. 3 и 4. Модель в симуляторе Rubis адаптировалась к фактическим показателям разработки, было получено хорошее совмещение. Модель,

рассчитанная по предлагаемой методике, адаптировалась к модели Rubis на протяжении 22 лет истории, а затем рассчитывался прогноз на 5 лет. Получено хорошее совмещение показателей разработки, рассчитанных с помощью Rubis и по предлагаемой методике, рис. 5, 6.

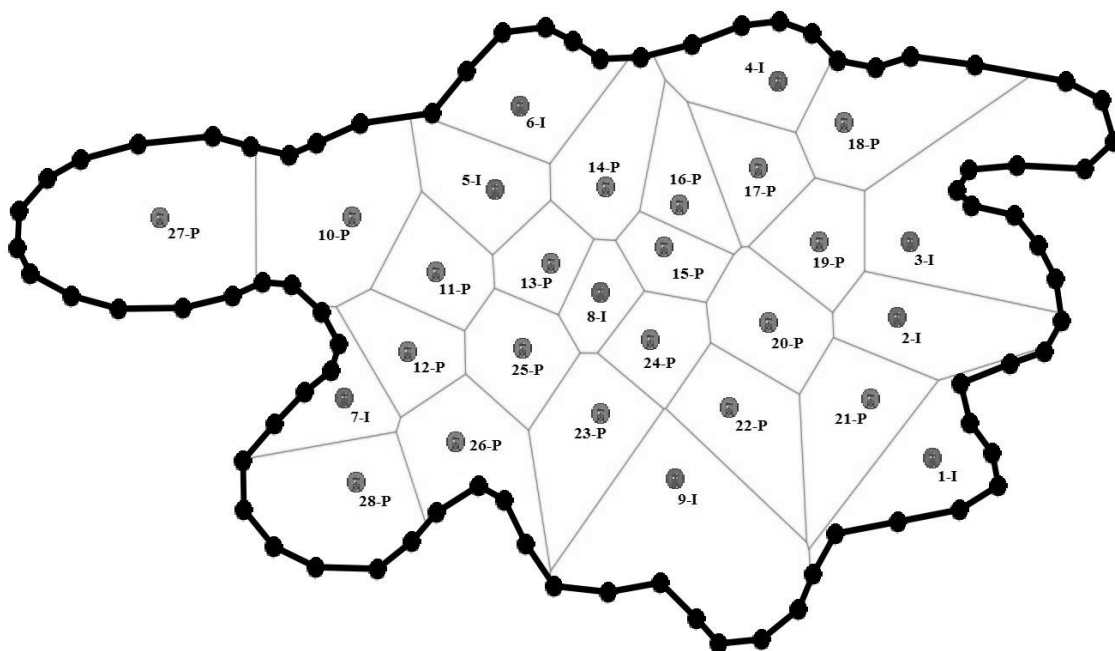


Рис. 3. Расчетная сетка суперэлементов

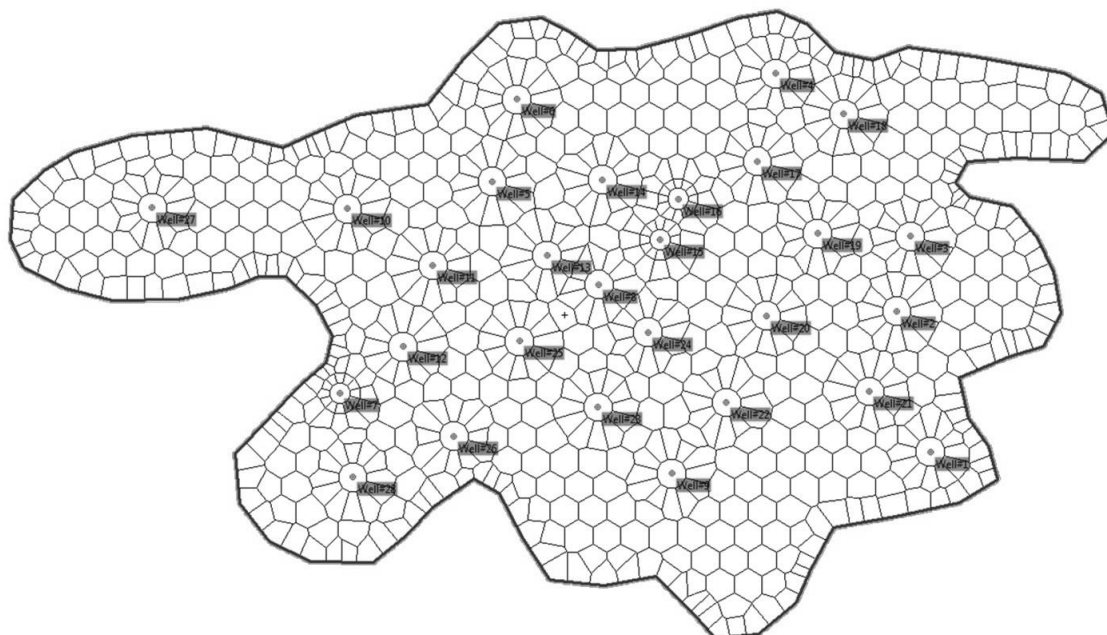


Рис. 4. Расчетная сетка в программе Rubis Карра Engineering

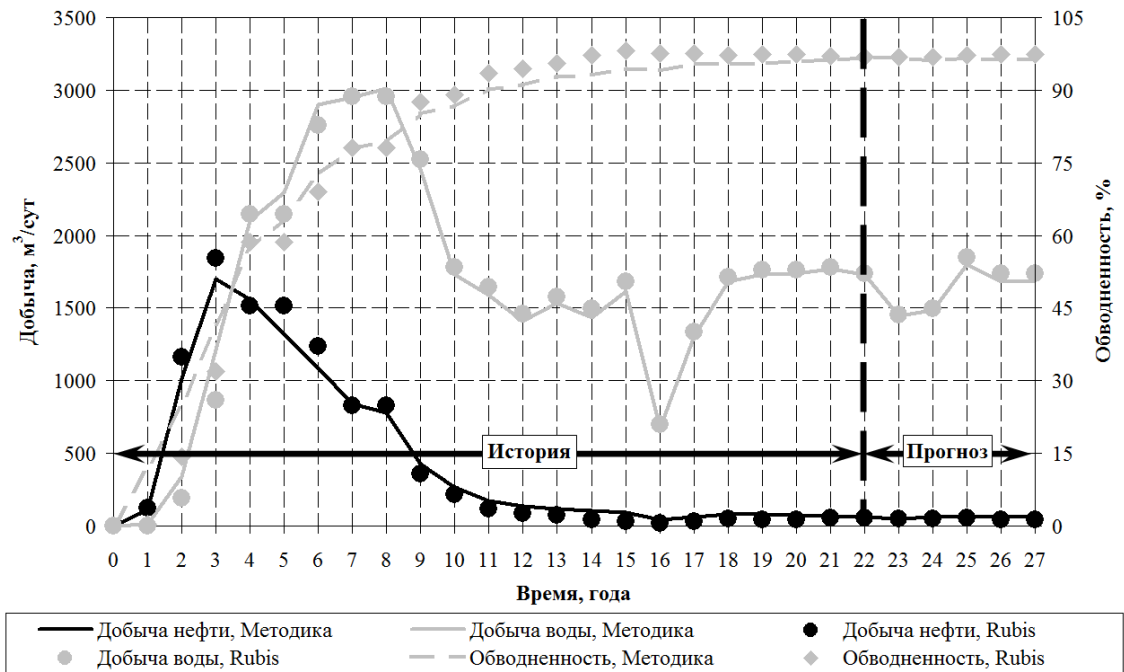


Рис. 5. Годовые показатели разработки

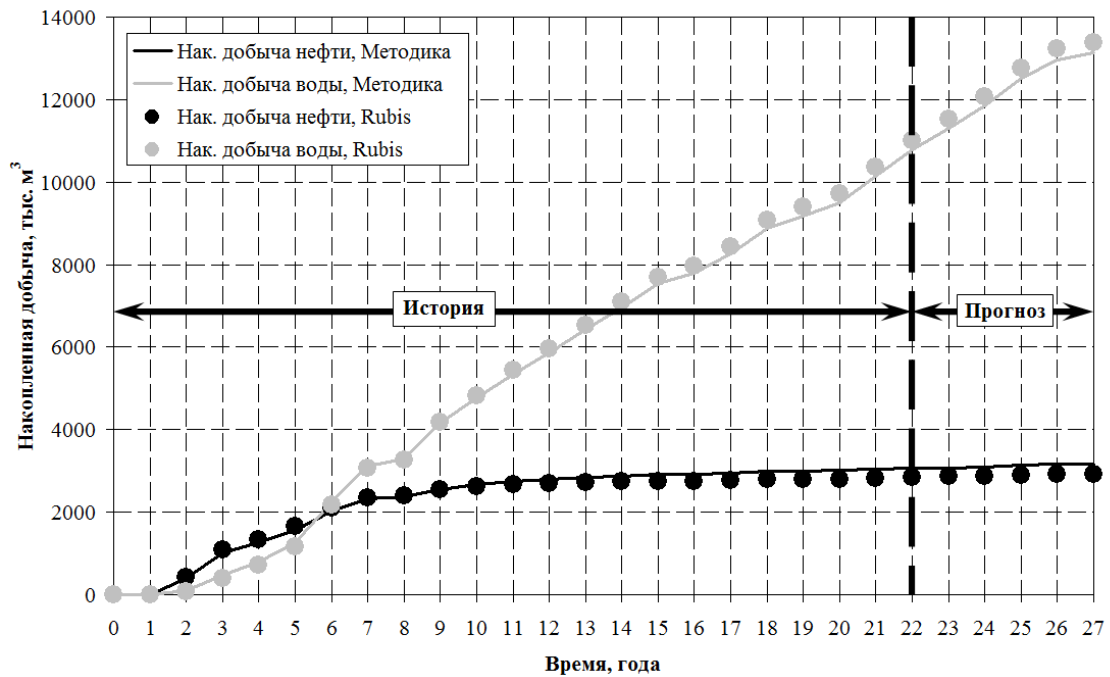


Рис. 6. Накопленные показатели разработки

Заключение

В работе описана модель двойной проницаемости для анализа разработки карбонатных коллекторов на базе концепции суперэлементов. Модель учитывает фильтрацию жидкости как в трещинах, так и в порах, перетоки осуществляются в псевдоустановившемся режиме, в скважину

работают как трещины, так и поры. Предложена оригинальная численная схема, полностью явная как по давлению, так и по насыщенности. Предложен упрощенный подход для моделирования законтурной водоносной области. Форма ячеек сетки соответствует сетке Вороного. Такая вычислительная сетка благодаря малому количеству ячеек позволяет проводить расчеты с высокой скоростью, что особенно актуально

при решении задач оптимизации разработки и автоматической (полуавтоматической) адаптации моделей. Предлагаемая методика апробирована на модели реального месторождения и показала хорошую сходимость с результатами расчетов на коммерческом симуляторе Rubis Kappa

Engineering при условии наличия исторических данных для адаптации модели.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 16–29–15135 офи_м.

Dual Permeability Model for Carbonate Reservoir Development Analysis Based on Super-Elements Concept

I.V. Afanaskin, S.G. Volpin, A.V. Roditelev, A.A. Kolevatov

Abstract: Article describes numerical simulation methodology of oil fields development in carbonate fractured reservoirs development. Two-phase filtration model in dual-permeability oil saturated reservoir is assumed. Numerical scheme is explicit and spacial approximation based on super-elements grid, that increase calculation speed. For correct results history matching is required. Based on real field example simulation compared to calculation results of Rubis Kappa Engineering software. Forecasted results of both calculation variants are in good match.

Key words: oil field development simulation, two-phase filtration, carbonate reservoir, porous-fractured reservoir, dual-permeability filtration mechanism, super-elements.

Литература

1. Азиз Х., Сеттари Э. Математическое моделирование пластовых систем. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. – 416 с.
2. Афанаскин И.В., Вольпин С.Г., Родителей А.В., Ефимова Н.П., Ломакина О.В. Модель двойной пористости для расчета показателей разработки трещиновато-пористых коллекторов на базе концепции суперэлементов // Вестник кибернетики, 2019, № 2.
3. Булыгин Д.В., Мазо А.Б., Поташев К.А., Калинин Е.И. Геолого-технические аспекты суперэлементной фильтрационной модели нефтяных месторождений // Научно-технический журнал «Георесурсы», 2013, № 3(53). - С. 31-35.
4. Голф-Рахт Т.Д. Основы нефтепромысловой геологии и разработки трещиноватых коллекторов. М.: Недра, 1986. - 608 с.
5. Каневская Р.Д. Математическое моделирование гидродинамических процессов разработки месторождений углеводородов. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. – 140 с.
6. Кац Р.М., Волгин Е.Р., Афанаскин И.В. Численное моделирование двухфазной фильтрации нефти и воды // Труды НИИСИ РАН, том 4, № 2, 2014. – с. 141-148.
7. Мазо А.Б., Булыгин Д.В. Суперэлементы. Новый подход к моделированию разработки нефтяных месторождений // Научно-технический журнал «Нефть. Газ. Новации», 2011, № 11. – С. 6-8.
8. Хисамутдинов Н.И., Хасанов М.М., Телин А.Г. и др. Разработка нефтяных месторождений. Издание в 4 т. – Т. 1. Разработка нефтяных месторождений на поздней стадии. М.: ВНИИОЭНГ, 1994. – 240 с.
9. Olivier Houze, Didier Viturat, Ole S. Fjaere. Dynamic Data Analysis. V 5.20.01. Kappa Engineering, 2018. – 757 p.

Структура и состав кремния, легированного ионами $^{64}\text{Zn}^+$ в условиях горячей имплантации и отожженного в кислороде при повышенных температурах

В.В. Привезенцев^{1,2*}, А.Н. Палагушкин¹, Е.П. Кириленко³, А.В. Горячев³,
О.С. Зилова⁴, А.А. Бурмистров⁴, А.А. Батраков⁴

¹ НИИСИ РАН, 117218 Москва, Россия, v.privezentsev@mail.ru

² Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН, 117218 Москва, Россия

³ Институт нанотехнологий и микроэлектроники РАН, 115487 Москва, Россия

⁴ Национальный исследовательский университет «МЭИ», 111250, Москва, Россия
E-mail's: ¹v.privezentsev@mail.ru

Аннотация. Исследовано образование примесных кластеров в подложках Si, легированных ионами $^{64}\text{Zn}^+$ в условиях горячей имплантации и затем термически обработанных в кислороде. После имплантации на поверхности образца образовались металлические кластеры Zn со средним размером около 200 нм, а в его приповерхностном слое кластеры Zn с размером около 20 нм. После отжига при 700°C на поверхности образца произошло изменение состава кластеров: фаза металлического Zn превратилась в его оксидную и силицидную формы и так, что кластер приобрел структуру ZnO(ядро)/Zn₂SiO₄(оболочка), а в теле образца сохранилась металлическая фаза Zn кластеров. Мы объясняем это явление температурной зависимостью диффузии молекул кислорода из атмосферы в теле кремния и движением атомов цинка в противоположном направлении к поверхности образца во время отжига.

Ключевые слова. Кремний, цинк, оксид цинка, ионная имплантация, термический отжиг, наночастицы

1. Введение

В настоящее время свойства наночастиц (НЧ) металлов и их оксидов в полупроводниковых и прозрачных диэлектрических матрицах всесторонне изучены, ввиду их возможного применения в опто- и микроэлектронных устройствах [1]. В частности, НЧ из оксида цинка играют важную роль, поскольку ZnO является прямозонным материалом и с шириной запрещенной зоны 3,37эВ и имеет большую энергию выхода экситона, равную 60мэВ. Следует отметить, что по последнему параметру ближайшие конкуренты этого материала имеют следующие параметры: ZnSe 21-23мэВ [...], а GaN 23-25мэВ [...]. Поэтому эти НЧ можно использовать в источниках ультрафиолетового излучения [2] и в электролюминесцентных дисплеях [3]. В соответствии с особыми свойствами ZnO следует отметить их другие возможные применения, например, в солнечных элементах [4], в газовых и биосенсорах [5], в устройствах памяти нового поколения (мемристорах) [6] и в спинтронике, поскольку наночастицы ZnO имеют ферромагнетизм даже при комнатной температуре [7]. Так как Si до сих пор широко

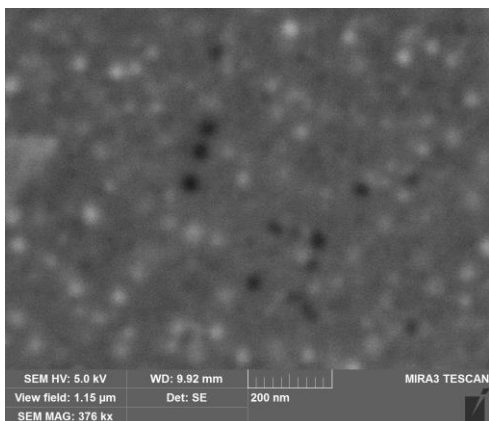
используется в микроэлектронике, то наночастицы Zn и ZnO в Si подложке могут играть важную роль, так как устройство обработки первичного сигнала может быть сформировано на одной микросхеме с источником сигнала. Например, газовый датчик и устройство обработки его сигнала могут быть на одном Si чипе, поскольку их технологии совместимы. Кремний, имплантированный Zn, был исследован ранее, в нескольких работах [8-12]. Здесь мы представляем исследование образования НЧ в Si, легированном ионами $^{64}\text{Zn}^+$ в условиях горячей имплантации с последующим отжигом в атмосфере кислорода при повышенных температурах. Краткое содержание этой работы было заявлено в [13].

2. Экспериментальная часть

Коммерческие монокристаллические подложки, выращенные по Чохральскому, n-типа с ориентацией (100) были имплантированы ионами $^{64}\text{Zn}^+$ с дозой 5×10^{16} см⁻² и энергией 50кэВ. Перед имплантацией была проведена стандартная химическая очистка поверхности в органических растворителях в ультразвуковой ванне. Пучок

ионов Zn^{+} падал на поверхность Si по нормали. Во время имплантации температура подложки Si составляла около $350^{\circ}C$. Далее образцы были изохронно в течение 1 часа отожжены в атмосфере O_2 при температурах от 600 до $1000^{\circ}C$ с шагом $100^{\circ}C$. Во время отжига в атмосфере кислорода Si также будет окисляться, и пленка оксида кремния растет на поверхности кремниевой подложки. Оптимальная температура отжига для образования фазы ZnO , как показали проведенные исследования, составляла около $700^{\circ}C$.

а)



б)

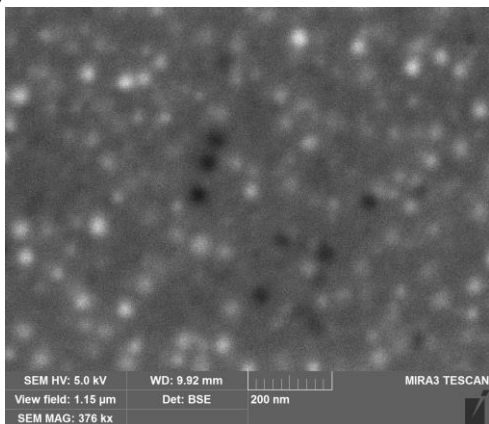


Рис 1. РЭМ-ВЭ изображение (а) и РЭМ-ОРЭ изображение (б) поверхности образца Si после имплантации Zn.

Поверхность образцов исследовали с использованием растрового электронного микроскопа (РЭМ) MIRA3 (TESCAN) в режимах вторичной эмиссии (ВЭ) электронов и обратно рассеянных электронов (ОРЭ), а также использовали с энерго-дисперсионную спектроскопию (ЭДС) и оборудованием для картирования элементов.

Примеси и их состав по глубине были исследованы методом время-пролетной вторичной ионной масс-спектрометрии (ВП ВИМС) с использованием прибора SIMS-5 (Ion

TOF GmbH). Травление кратера размером $300 \times 300 \mu m$ было выполнено пучками ионов Cs^{+} и O^{-} с энергией 1 кэВ . Анализ проводился с помощью пучка ионов Bi^{+} с энергией 30 кэВ и током $1,2 \text{ пА}$, размеры анализируемого раstra составляли $100 \times 100 \mu m$. Размеры кратера ионного травления измеряли с помощью стилусного профилометра Alpha Step D-120 (KLA-Tencor).

Визуализация и идеализация преципитатов с контролем по глубине осуществлялась сканирующим оже-спектрометром РНІ-670xi (Physical Electronics). Электронная пушка с термополевой эмиссией (катод Шоттки) имела следующие параметры: ускоряющее напряжение 5 кВ , при регистрации спектров первичный ток составлял 10 нА , а для получения изображения в режимах ВЭ и в Оже-электронах ток был 1 нА , диаметр электронного пучка составлял $50-100 \text{ нм}$. Спектрометр имел ионную пушку с дифференциальной накачкой («лампового типа») для очистки поверхности от загрязнений и травления при анализе Оже-профиля. Параметры ионной пушки: ускоряющее напряжение 2 кВ , ток ионного пучка $0,5 \text{ мкА}$, наклон пучка 10° при полировочном травлении, диаметр ионного пучка был менее $500 \mu m$.

Химическое состояние элементов выявлено методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) с возбуждением при освещении анодом $MgK\alpha$ с энергией $1253,6 \text{ эВ}$ с использованием высоковакуумного модуля на основе платформы Nanofab 25 (NT-MDT). Энергетическое разрешение детектора спектрометра SPECS Phoibos 225 по линии $Ag 3d_{5/2}$ для немонохроматического рентгеновского облучения $MgK\alpha$ составляло $0,78 \text{ эВ}$. Спектры РФЭС анализировались по глубине образца. Поверхность травилась ионным пучком Ar^{+} с энергией 3 кэВ и диаметром $0,7 \text{ мм}$. Пучок ионов Ar^{+} падал относительно нормали к поверхности образца под углом 50° . Скорость травления составляла около 1 нм/мин , а размеры кратера травления составляли $2,8 \times 4,0 \text{ мм}$.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Исследование образца РЭМ

На рис.1 представлены изображения поверхности имплантированного образца в режимах РЭМ-ВЭ (топологический контраст) и РЭМ-ОРЭ (Z-контраст). На рисунке (а)

видны яркие пятна со средним размером 20-50nm. Они являются бугорками на поверхности кремния, также на нем можно различить темные пятна примерно такого же размера. Они являются поверхностными порами (кратерами). По изображению в режиме Z-контраста (б) можно сказать, что яркие пятна являются Zn-содержащими

кремния. Это могут быть углеводородные загрязнения. Эти выводы подтверждаются ЭДС-спектроскопией, которая показала, что помимо пика Si-Ka1 в матрице кремния представлены только пики от имплантированного цинка Zn-L1_2 и углеродные загрязнения C-Ka1_2 (см. ЭДС-спектр на рис.2). Все погрешности вкладов от

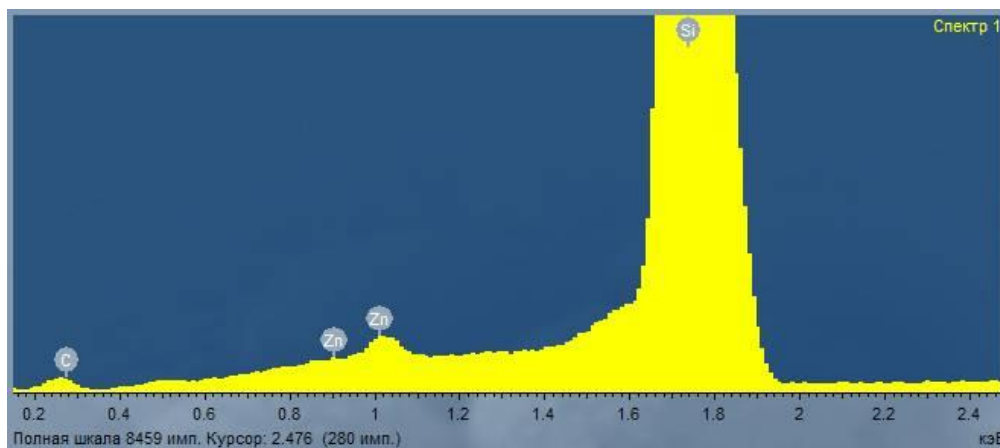


Рис.2. ЭДС-спектр поверхности кремния после имплантации цинка.

кластерами. Черные контрастные пятна могут о наличии элементов, легче, чем матрица

этих элементов связаны с техническими характеристиками используемого ЭДС-

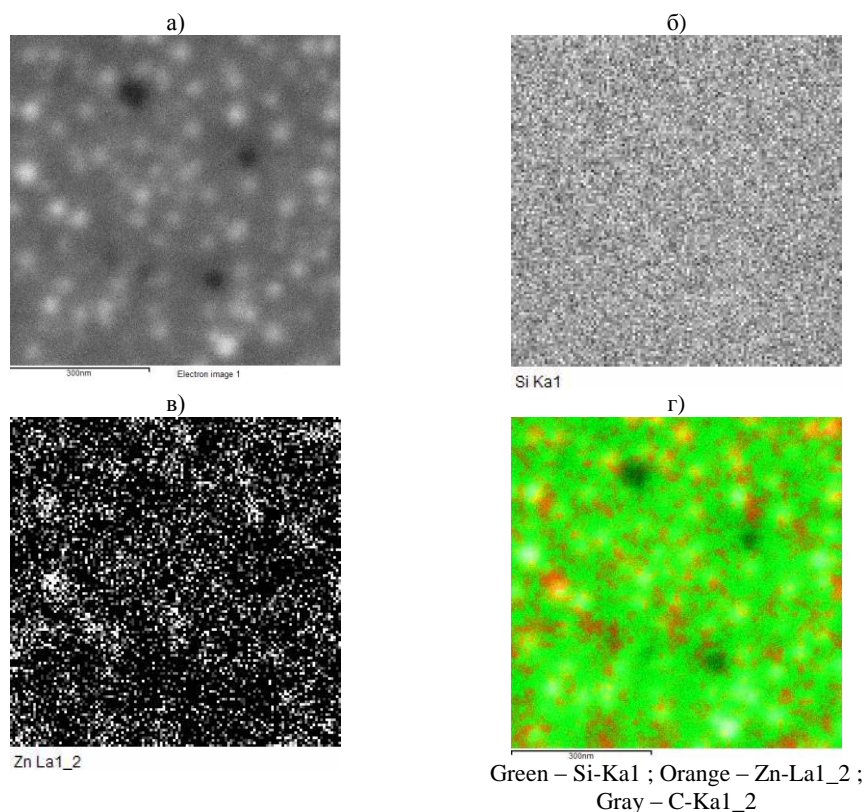


Рис.3. Изображения РЭМ-ВЭ (а) и ЭДС-карты для: Si-Ka1 (б), Zn-La1_2 (в) и соответствующее наложение ЭДС-карт: Si-Ka1, Zn-La1_2 и C-Ka1_2 (не показаны отдельно) для имплантированного образца.

оборудования. На рис.3, а приведено РЭМ-ВЭ (электронное) изображение поверхности образца после имплантации цинка и наложение ЭДС-карт для элементов Si (б), Zn (в) и С (г). Эта данные являются еще одним подтверждением наших выводов о составе наночастиц кластеров, расположенных на поверхности кремния после имплантации цинка.

3.2. Исследование спектров и профилей ВП-ВИМС

На рис.4 приведены спектры изотопов цинка, кислорода и их соединений в имплантированном состоянии (а) и после отжига (б). На этом рисунке представлен естественный изотопный состав (черный) и

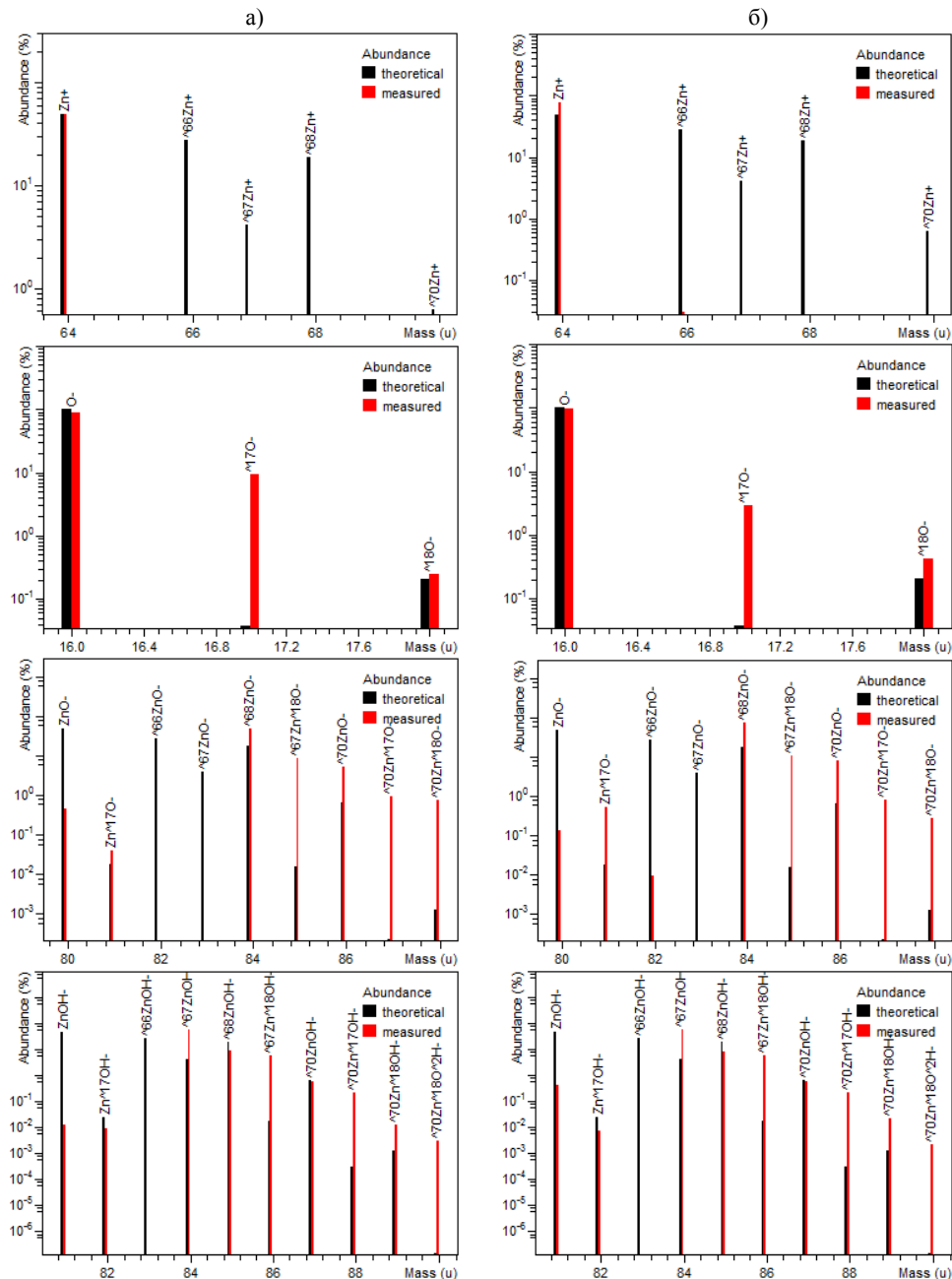


Рис. 4. Спектры изотопов Z^+ , O^- , ZnO^- и $ZnOH^+$; а) имплантированный образец б) образец после отжига.

экспериментальный изотопный состав (красный). На рисунке 4,а видно, что поскольку во время имплантации мы использовали метод разделения по массе, то изотоп цинка ^{64}Zn присутствовал во всех образцах. Из рис.4 следует, что поскольку во время отжига использовалась кислородная атмосфера, то во всех образцах были представлены два изотопа кислорода: изотоп ^{16}O (как правило) и изотоп ^{18}O (меньше). Присутствие изотопа кислорода ^{17}O незначительно. Кислородные соединения, а именно SiO^{2-} , SiO^- и ZnO^- , повторяют форму распределения O^- и действительно располагаются вблизи поверхности подложки по глубине до значения около 10нм. Все эти соединения имеют свои максимумы профиля на поверхности образца.

На рис.4 также видно, что, вообще говоря, в имплантированном состоянии мы можем обнаружить 9 изотопов ZnO - (теоретических) и получить 7 изотопов ZnO - (экспериментальных). Но на самом деле мы получили как ZnO - с массой обычно $80 = 64 (\text{Zn}) + 16 (\text{O})$ аму, так и менее $82 = 64(\text{Zn}) + 18(\text{O})$ аму (после отжига). Кроме того, в масс-спектре мы находим изотопы ZnO с массами 84, 85, 86 и 88 аму. Но мы должны отметить, что эта ситуация не связана с изменениями масс изотопа Zn и O , а связана с присутствием водорода в наших образцах и образованием радикала OH в образце. Можно сравнить измеренные спектры для ZnO - и ZnOH - и увидеть, что они практически равны друг другу с разницей массы в 1 аму только по массе атома водорода, а не по массе атома изотопа Zn (теоретический, черный), как и предсказывает программа, прилагаемая к используемому устройству SIMS-5. Эта ситуация не нова и известна в литературе [14-16].

На Рис.5 представлены профили TOF-SIMS, которые имеют качественный характер помимо Zn^+ , который имеет количественное значение, потому что мы точно знаем, что дозу

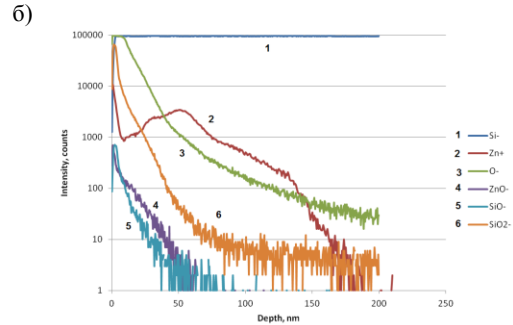
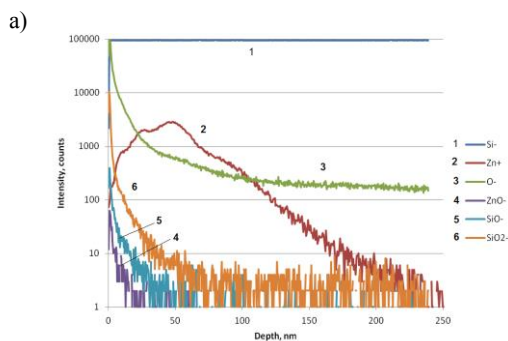


Рис.5. ВП ВИМС профили имплантированного Zn и его соединений по глубине: имплантированный образец (а) [13] и отожженный при 700°C (б).

имплантированного Zn (как имплантированный образец). Из исследований ВП ВИМС TOF-SIMS (рис.5,а) следует, что в имплантированном состоянии распределение концентрации Zn (кривая 2) распространялось по глубине подложки вплоть до 200нм с максимумом около $R_p = 50\text{нм}$ (что согласуется с расчетом по программе SRIM [17]). Ионы соединений кислорода, а, именно, SiO^{2-} (кривая 6), SiO^- (кривая 5) и ZnO^- (кривая 4) повторяют форму распределения O^- (кривая 3) и действительно расположены вблизи поверхности подложки по глубине до значения около 10нм. Все эти соединения имеют на профилях свои максимумы на поверхности образца.

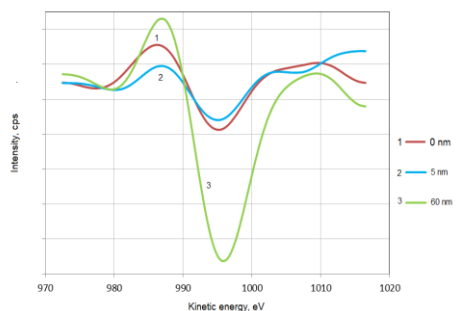
После отжига при 700°C на профиле распределения цинка (рис.5.б, кривая 2) можно увидеть некоторое смещение на главном пике концентрации Zn^+ на глубину 60нм и обнаружить еще один пик концентрации Zn^+ на поверхности образца. Из-за диффузии молекул O_2 из атмосферы в глубину подложки профиль O (рис.5, кривая 3) смещается в более глубокое положение. И все профили оксидных ионов, а, именно, SiO^{2-} (кривая 6) SiO^- (кривая 5) и ZnO^- (кривая 4) тоже перемещаются глубже из своего положения в имплантированном образце [18]. Они уже простираются в тело подложки на глубину до 50нм (а не 10нм, как в имплантированном образце). Итак, из исследований методом ВП ВИМС следует, что после термической обработки в кислороде в приповерхностном слое на глубине до 50нм зарегистрирована микстура фазы оксида кремния в виде смеси $\text{SiO} \cdot \text{SiO}_2$ и цинка в виде смеси фаз $\text{Zn} \cdot \text{ZnO}$. Отметим, что используемым методом ионы Zn_2SiO_4 обнаружены не были.

3.3. Оже-спектры и картирование по элементам

На рис.5 представлены ОЭС данные для Zn для имплантированного образца (а) и для образца, отожженного при 700°C (б). Для имплантированного образца (рис.5,а) видно, что на спектре ОЭС для Zn минимум находится при энергетическом положении 996эВ и увеличивается по величине с глубиной травления от поверхности до глубины 60нм. А энергетическое положение этого минимума, а именно 996еV, не изменяется. Из этого следует, что по глубине профилирования атом Zn находился в одном и том же нейтральном металлическом состоянии.

После отжига при температуре 700°C значение спектра ОЭС для Zn имеет 2 максимума (рис.6,б):

а)



б)

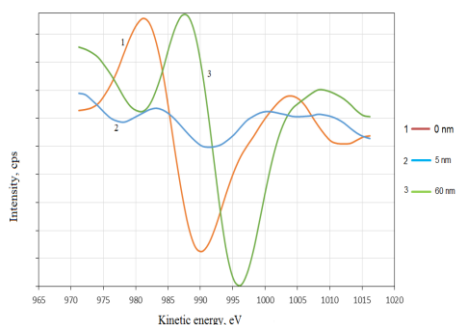


Рис.6. Спектры ОЭС для Zn для образца: имплантированные (а) и отожженные в O₂ при 700°C (б); глубина, нм: 1-0, 2 -5 и 3 -60.

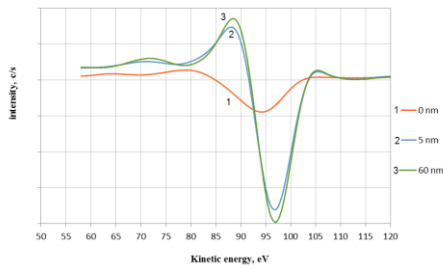
на поверхности образца (кривая 1) и в глубине образца на глубине 69нм (кривая 3). С другой стороны, энергетическое положение минимума Оже-спектра для Zn изменяется от 990эВ на поверхности образца (кривая 1) до 996 эВ на глубине 60нм (кривая 3). Это свидетельствует о том, что на поверхности образца Zn имеет положительный заряд, а на глубине 60нм он находился в нейтральном металлическом состоянии. Т.е. на поверхности образца присутствует фаза ZnO, и степень

окисления Zn непрерывно уменьшается по мере переходе вглубь образца от положительного на поверхности до нейтрального состояния на глубине 60нм.

На рис.7 представлены Оже-спектры для Si после имплантации цинком (а) и после отжига в кислороде при 700°C (б). Из спектров для образца после имплантации Zn следует, что на поверхности подложки (рис.7,а, спектр 1) минимум кинетической энергии находится при 94эВ и величина самого сигнала небольшая. Это означает, что атом кремния находится в соединении с атомом другого происхождения (кислородом) и частично ионизован, т.е. на поверхности подложки расположена пленка оксида кремния преимущественного состава SiO. Иначе говоря, кремний в ней находится в зарядовом состоянии 2⁺. На глубинах 5нм (спектр 2) и 60 нм (спектр 3) величина сигнала значительно увеличивается (атом кремния находится в соединении с другими такими же атомами в кристаллической решетке) и положение минимума кинетической энергии увеличивается по сравнению с его значением на поверхности подложки и составляет 97эВ, что соответствует нейтральному атому кремния Si⁰. Таким образом, можно заключить, что после имплантации цинка на поверхности кремниевой подложки расположена оксидная пленка с толщиной <5нм состава SiO.

Из рис. 7,б следует, что для образца после отжига в кислороде при 700°C на поверхности подложки (спектр 1) минимум кинетической энергии находится при величине 84эВ и величина самого сигнала небольшая. Это означает, что атом кремния полностью ионизован, т.е. на поверхности подложки расположена пленка оксида кремния преимущественного состава SiO₂, в которой кремний находится в зарядовом состоянии 4⁺. На глубине 5нм (рис.7,б, спектр 2) положение минимума энергии составляет величину 94эВ, что соответствует положительно заряженному атому кремния в состоянии Si²⁺ и оксидной пленке состава SiO. И далее, на глубине 60нм (рис.7,б, спектр 3) сигнал значительно увеличивается и положение минимума энергии составляет величину 97эВ, что соответствует нейтральному атому Si⁰. Таким образом, можно заключить, что после отжига образца, имплантированного Zn, при 700°C в кислороде, на поверхности кремниевой подложки расположена оксидная пленка с толщиной >5нм преимущественного состава SiO₂ на поверхности и SiO в глубине подложки.

a)



б)

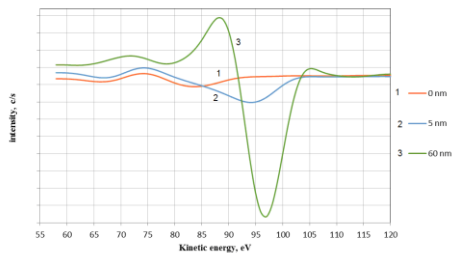
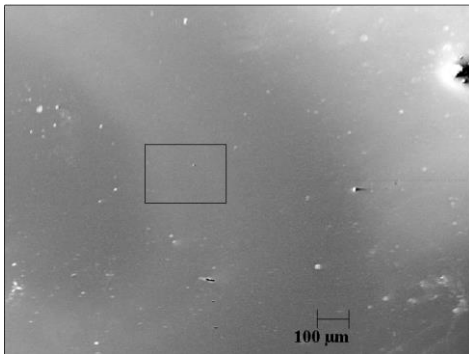


Рис.7. ОЭС-спектры для Si для образцов: имплантированный (а) и отожженный в O_2 при $700^\circ C$ (б); глубина, нм: 1-0, 2-5 и 3-60.

На рис. 8 представлено РЭМ-ВЭ

a)



б)

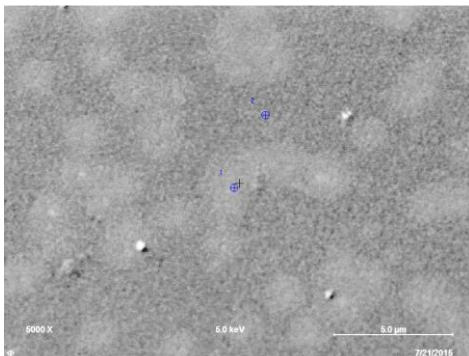
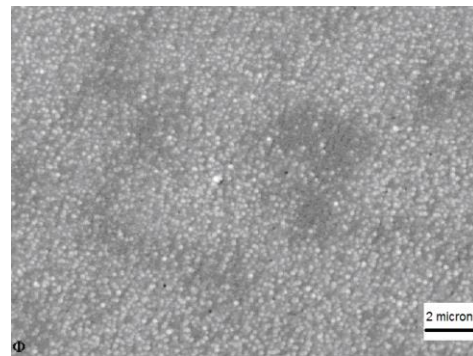


Рис.8. Изображение РЭМ-ВЭ, полученное непосредственно в Оже-спектрометре для образца, имплантированного Zn, на стенке кратера травления на глубине 50 нм при двух увеличениях: (низком -а) и (высоком-б).

изображение для имплантированного образца на глубине 50нм. На этом изображении виден слабый контраст между яркими пятнами на сером фоне матрицы Si. Несмотря на различную контрастность ВЭ, концентрации Zn в точках 1 и 2 на рис 8,б отличаются незначительно друг от друга: $(4,2\pm 0,05)\text{at}\%$ и $(3,85\pm 0,05)\text{at}\%$ соответственно в соответствие с погрешностями использованного измерительного оборудования. Поэтому при картировании распределения Zn в Оже-электронах разница между точками 1 и 2 практически не обнаруживается. Снижение коэффициента эмиссии ВЭ в серых пятнах бугорков может быть вызвано разницей в концентрации других элементов, например, кислорода или углерода, которые мы не можем обнаружить из-за их низкой концентрации с помощью Оже-электронной спектроскопии.

На рис. 9 приведено РЭМ-ВЭ

a)



б)

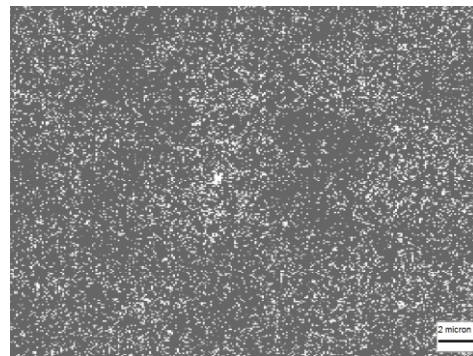


Рис.9. Изображения РЭМ-ВЭ (а) на склоне кратера ионного травления на глубине 50нм в месте максимальной концентрации Zn и в Оже-электронах карта распределения Zn для той же области образца, отожженного при $700^\circ C$ (б).

изображение (а) и ЭДС-карта для распределения Zn (б) для образца после отжига при $700^\circ C$ в кислороде на склоне кратера ионного травления на глубине 50нм в

месте максимальной концентрации Zn. В этом случае удалось получить слабый контраст в распределении. Необходимо отметить, что расчет концентраций проводился по коэффициентам обратной элементной чувствительности, предложенным фирмой Physical Electronics для использованного прибора РНИ-670xi. При этом доза на обоих образцах получилась примерно $1 \times 10^{16} / \text{см}^2$.

Как обычно, светлые области на РЭМ-ВЭ изображении (топологический контраст) (рис.9,а) представляют из себя выпуклые области на поверхности образца (бугорки), а темные – впадины (кратеры). Из сравнения этих изображений РЭМ-ВЭ и ЭДС-карты для Zn картирования в оже-электронах следует, на обоих изображениях присутствуют Zn-содержащие преципитаты светлые по фону (топологический контраст) с пространственными размерами порядка субмикрона. Это могут быть как металлическая фаза Zn, так и его оксидные фазы типа ZnO или виллемит Zn_2SiO_4 .

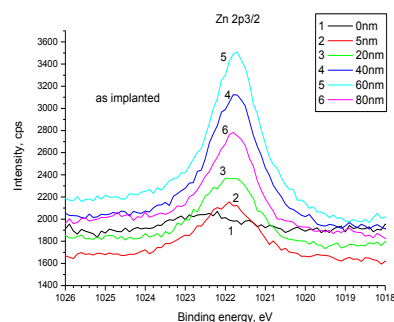
3.4. РФЭС спектры с профилированием по глубине

На рис.10 представлены РФЭС спектры для состояния Zn 2p_{3/2} с профилированием по глубине. Для имплантированного образца из РФЭС спектров (фиг.9,а, кривая 1) видно, что сигнал для Zn 2p_{3/2} на поверхности очень мал и плохо детектируется с максимумом 1022,4эВ. Последнее значение свидетельствует о металлической фазе Zn^0 и некоторой загрязненности поверхности. С увеличением глубины анализа сигнал РФЭС для Zn 2p_{3/2} при энергии 1021,8 эВ вначале увеличивается до глубины 5нм. Затем он начинает увеличиваться и достигает максимума на глубине 60 нм практически при той же значении энергии 1022,4эВ. Наконец, пик РФЭС сигнала для Zn2p_{3/2} XPS уменьшается на глубине 80нм при той же энергии 1021,8 эВ, что соответствует объединению нейтральных атомов Zn^0 в наночастицы и свидетельствует о существовании металлической фазы Zn [19, 20], то есть НЧ металлического Zn образовались образце сразу после имплантации.

РФЭС Спектры для цинка Zn2p_{3/2} для образца, отожженного при 700°C, представлены на фиг.10,б. Эта температура была выбрана потому, что при 800°C начинается переход от фазы оксида цинка ZnO

к фазе виллемита Zn_2SiO_4 . Из приведенных спектров следует, что на поверхности РФЭС

а)



б)

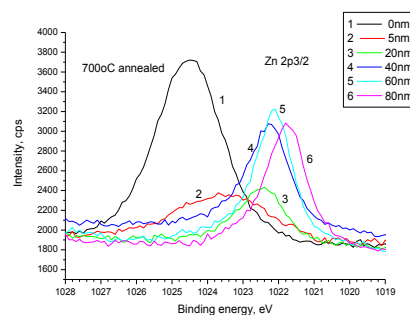


Рис.10. РФЭС спектры для Zn 2p_{3/2} с глубинным профилированием по глубине, образцы: имплантированный (а) и отожженный при 700°C (б) [13].

пик для Zn2p_{3/2} расположен при энергии 1024,5 эВ, что соответствует соединению химического состояния Zn^+ с поверхностными загрязнениями (в основном, углеводородами). Этот пик особенно уширен. Такое уширение обычно указывает на присутствие различных форм Zn в образце или это иногда связано с эффектами дифференциальной зарядки и спектральными артефактами. Пиковое значение энергии связи 1023,6–1022,0 эВ (кривые 2–8) может свидетельствовать о существовании в подповерхностном слое двух фаз Zn, а, именно, ZnOи Zn_2SiO_4 , т.е. о наличии наночастиц со структурой ZnO(ядро)• Zn_2SiO_4 (оболочка) в отожженном образце. При увеличении глубины анализа сигнал РФЭС вначале уменьшается, и даже на глубине 5нм с энергетическим сдвигом до энергии связи 1023,6 эВ, а затем начинает увеличиваться и достигает максимума на глубине 60нм при энергии связи 1022,6 эВ, а затем уменьшается на глубине 80нм при энергии связи 1021,8 эВ [21-22]. Во время этого профильного анализа наблюдается

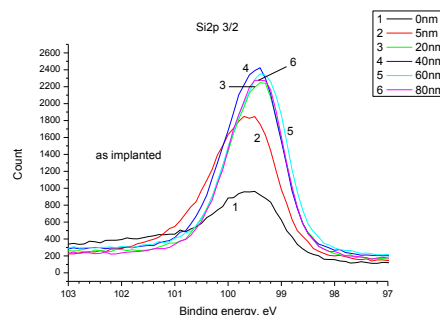
постоянное смещение РФЭС пика в область с меньшей энергией связи. В этом случае положение РФЭС пика на глубине 80нм составляет величину 1021,8эВ, что соответствует нейтральному атому Zn^0 . Другими словами, в глубине образца наблюдается металлическая фаза Zn.

На рис.11 представлены РФЭС спектры для состояния Si 2p3/2 с профилированием по глубине. Для имплантированного образца из РФЭС спектров (фиг.11,а, кривая 1) видно, что сигнал для Si2p3/2 на поверхности детектируется с максимумом при 99.6эВ. Последнее значение свидетельствует о некотором окислении атома Si до состояния Si^{2+} . С увеличением глубины анализа сигнал РФЭС для состояния Si2p3/2 при энергии 99.6эВ увеличивается до глубины 5нм. Затем он начинает увеличиваться и достигает максимума на глубине 20нм при значении энергии 99.4эВ. Далее пик РФЭС сигнала для Si2p3/2 не изменяется как по величине, так и по значению энергии до глубины 80нм. Это означает, что при таких глубинах анализа мы имеем объединение нейтральных атомов Si^0 в кристаллической решетке подложки.

Спектры РФЭС для состояния Si2p3/2 для образца, отожженного при 700°C в кислороде, представлены на рис.11,б (о выборе этой температуры отжига было сказано выше). Из приведенных спектров следует, что на поверхности (рис.11,б. кривая 1) РФЭС пик для состояния Si2p3/2 расположен при энергии 100.5эВ. Во-первых, этот пик уменьшился по величине и сдвинулся в сторону больших значений энергии связи по сравнению с состоянием после имплантации цинка. Все это может означать как загрязнение поверхности, в частности, углеводородами, при отжиге, и уменьшение атомов кремния в анализируемом слое, так и полное окисление кремния на поверхности подложки до значений Si^{4+} . На глубине 5нм пик РФЭС значительно увеличивается, что указывает на увеличение атомов Si в анализируемом слое, причем этот пик значительно уширен. Такое уширение обычно указывает на присутствие различных форм Si в образце или это иногда связано с эффектами дифференциальной зарядки и спектральными артефактами. После глубины 20нм величина сигнала практически не изменяется, т.е. различного химического окружения вокруг атомов кремния в значительных пропорциях практически нет. Постепенное смещение положения максимума сигнала в сторону меньших значений энергии связи свидетельствует о постепенном же изменении зарядового состояния атома

кремния от 4^+ в пленке SiO_2 или вилемите Zn_2SiO_4 до нейтрального Si^0 в глубине безпримесной матрицы кремния (80нм, кривая 6, рис. 11,б).

а)



б)

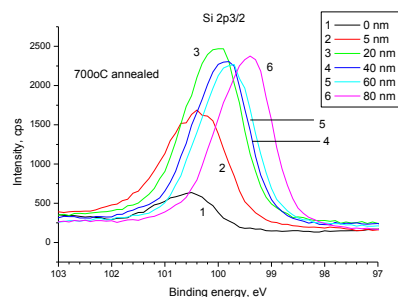
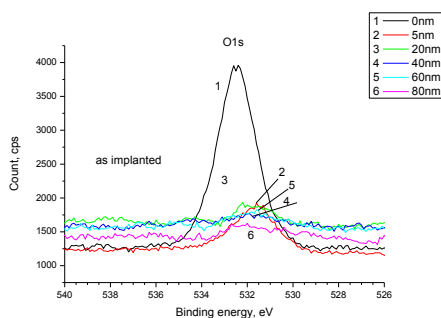


Рис.11. РФЭС спектры для Si 2p3/2 при профильном анализе для образцов: имплантированного (а) и отожженного при 700°C (б).

На рис.12 представлены РФЭС спектры для состояния кислорода O1s с профилированием по глубине. Для имплантированного образца из РФЭС спектров (фиг.12,а, кривая 1) видно, что сигнал для O1s имеет значительную величину (большое число атомов кислорода на поверхности) и имеет максимум при 532.5эВ. Последнее значение свидетельствует об отрицательном заряде атомов кислорода, предпочтительно 1^- . С увеличением глубины анализа сигнал РФЭС для O1s значительно уменьшается по величине (уменьшение атомов кислорода) и перемещается по шкале энергий до значения 532.0эВ (при глубине 5нм, кривая 2, рис. 12,а). Смещение по энергии в сторону меньших значений обусловлено уменьшением отрицательного заряда на атомах кислорода. При дальнейшем увеличении глубины анализа вплоть до 80нм (кривая 6, рис.12, а) величина сигнала РФЭС постепенно, но слабо, уменьшается при практически той же величине энергии 532.0эВ. Приведенные выше рассуждения подтверждают сделанные нами ранее выводы из Оже-спектроскопии о

существовании на поверхности Si подложки после имплантации Zn слоя оксида кремния толщиной не более 5нм.

а)



б)

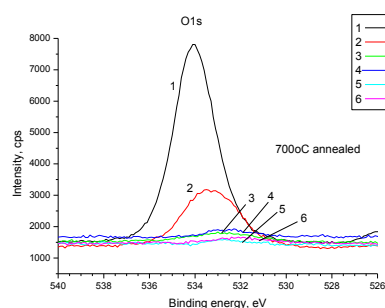


Рис.12. РФЭС спектры для состояния O1s при профильном анализе для образцов: имплантированного (а) и отожженного при 700°C (б).

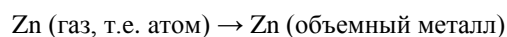
РФЭС спектры для кислорода O1s для образца, отожженного при 700°C, представлены на фиг.12,б. Из приведенных спектров следует, что на поверхности РФЭС пик для O1s имеет значительную величину по сравнению с состоянием после имплантации цинка. Его положение тоже сдвинулось в сторону больших энергий связи и равно сейчас 534.0эВ. Последнее связано с полной ионизацией атома кислорода до состояния остью 2⁺. С увеличением глубины анализа сигнал РФЭС для O1s значительно уменьшается по величине (уменьшение атомов кислорода) и перемещается по шкале энергий до значения 533.5эВ (при глубине 5нм, кривая 2, рис. 12,б). Смещение по энергии в сторону меньших значений обусловлено уменьшением отрицательного заряда на атомах кислорода. При дальнейшем увеличении глубины анализа вплоть до 80нм (кривая 6, рис.12, б) величина сигнала РФЭС слабо уменьшается при величине энергии 532.5эВ. Приведенные выше рассуждения подтверждают ранее сделанные нами выводы из Оже-спектроскопии о

существовании на поверхности Si подложки после отжига при 700°C в кислороде имплантированного Zn образца оксида кремния толщиной более 5нм.

3.4. Образование наночастиц Zn, ZnO и Zn₂SiO₄

Эволюция наночастиц ZnO при отжиге в кислороде может быть объяснена температурной зависимостью длины диффузии L молекул O₂ при их движении в подложке Si и диффузией атомов Zn к поверхности, которая является для низ неограниченным стоком. При этом согласно расчету по формуле $L = 2\sqrt{Dt}$, где D – коэффициент диффузии, а t - время отжига, здесь $D = D_0 \exp(-E/kT)$, где $D_0 = 0,025 \text{ см}^2/\text{с}$ и $E = 2,43 \text{ эВ}$ [23], значения L при температурах отжига 600 и 800°C в течение 1ч составляет соответственно 20 и 380нм. Поскольку максимум концентрации Zn расположен на глубине около 40нм, то во время отжига при температурах ниже 600°C не должно происходить какого-либо окисления наночастиц металлического Zn. Поскольку температура отжига составляет 700°C и выше, то значение L таково, что перемещающиеся к поверхности образца атомы Zn могут встретиться с молекулами O₂, которые поступают из окружающей атмосферы в подложку кремния через поверхность образца при отжиге и диффундируют в ней навстречу атомам цинка. В результате этой встречи происходит окисление наночастиц Zn и образование наночастиц со смешанной фазой ZnO•Zn₂SiO₄. Прямое подтверждение нашего вывода о структуре таких наночастиц представлено на рис. 3,б в статье [12].

Используя значения энергии Гиббса [24], можно объяснить образование наночастиц Zn

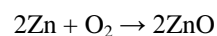


$$\Delta G \text{ (энергия Гиббса) (300K)} = -95 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G \text{ (1200K)} = +7 \text{ kJ/mol}$$

Вывод: наночастицы металлического Zn образуются при комнатной температуре (300K) при имплантации Zn и разрушаются при высоких температурах (1200K).

Для окисления цинка можно написать, что

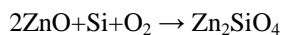


$$\Delta G \text{ (300K)} = -320 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G \text{ (1200K)} = -225 \text{ kJ/mol}$$

Вывод: наночастицы ZnO стабильны как при низких (300K), так и при высоких температурах (1200K) (сами по себе без химической среды, например, вне матрицы Si).

При окислении ZnO в среде Si происходит изменение химического состояния (фазы):



$$\Delta G(300\text{K}) = -31 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G(1200\text{K}) = -28 \text{ kJ/mol}$$

Поскольку упомянутая выше энергия Гиббса отрицательна, то процесс в присутствии молекул O₂ в среде Si самопроизвольно образует наиболее стабильную фазу, а, именно, высокотемпературную фазу силицида, содержащую Zn, то есть Zn₂SiO₄ [25]. Эта фаза преобладает над фазой ZnO после термообработки в O₂ при температурах выше 700°C в матрице Si.

Заключение

1) Si-подложки имплантировали ионом Zn с энергией 50 кэВ и флюенсом 5×10^{16} / см². Во время имплантации температура подложки составляла около 350°C. Затем был проведен последующий изохронный отжиг в течение 1 часа в O₂ в диапазоне температур 600-1000°C.

2) После имплантации на поверхности и в приповерхностном слое Si были созданы металлические кластеры Zn со средним размером на поверхности 20-50 нм и НЧ размером около 20 нм в глубине подложки.

3) После отжига при 700°C произошла трансформация металлической фазы Zn в ее оксидную форму, такую как ZnO (ядро)•Zn₂SiO₄ (оболочка) на поверхности образца и сохранение металлической фазы Zn в глубине подложки.

STRUCTURE and CONTENT of SILICON, HOT IMPLANTED by ⁶⁴Zn⁺ IONS and ANNEALED in OXYGEN at ELEVATED TEMPERATURES

V.V. Privezentsev^{1,2*}, A.N. Palagushkin², E.P. Kirilenko³, A.V. Goryachev³,
O.S. Zilova⁴, A.A. Burmistrov⁴, A.A. Batrakov⁴

Abstract: Impurity cluster formation in ⁶⁴Zn⁺ ion hot implanted and subsequently thermal oxidized Si substrates are studied. After implantation on sample surface and in sample near-surface layer the metallic Zn clusters with average size near 200nm on sample surface and clusters with size about 20nm in a sample body were created. After annealing at 700°C there was transformation from metal Zn clusters to its oxide form such as ZnO(core)/Zn₂SiO₄(shell) on a sample surface and conservation the metallic Zn phase in a sample body. We propose an explanation for this phenomenon by temperature dependence of the oxygen molecules diffusion in silicon body and zinc atom opposite moving to the sample surface during annealing.

Keywords: silicon, zinc, zinc oxide, ion implantation, thermal annealing, nanoparticles

Литература

1. M. Vaseem, A. Umar, Y.-B. Hahn. Metal Oxide Nanostructures and Their Applications, USA: American Scientific Publishers, Ch.4 (2010) 1–36.
2. Sheng Chu, Mario Olmedo, Zheng Yang, Jieying Kong, and Jianlin Liu, Electrically pumped ultraviolet ZnO diode lasers on Si, Appl. Phys. Lett., 93 (2008) 181106-3.
3. C. Li, Y. Yang, X. W. Sun, W. Lei, X. B. Zhang, B. P. Wang, J. X. Wang, B. K. Tay, J. D. Ye, G. Q. Lo., Enhanced field emission from injector-like ZnO nanostructures with minimized screening effect, Nanotechnology, 18 (2007) 135604-4.
4. G.P. Smestad, M. Gratzel, Demonstrating Electron Transfer and Nanotechnology: A Natural Dye-Sensitized Nanocrystalline Energy Converter, J. Chem. Educ. 75 (1998) 752-756.

5. S. Inbasekaran, R. Senthil, G. Ramamurthy, T.P. Sastry, Biosensor using Zinc Oxide Nanoparticles, *Intern. J. Innov. Res. Sci. Engineer. Technol.* 3 (2014) 8601-8606.
6. Cheng Li, Gareth J. Beirne, Gen Kamita, Girish Lakhwani, Jianpu Wang, Neil C. Greenham, Probing the switching mechanism in ZnO nanoparticle memristors, *J. Appl. Phys.* 116 (2014) 114501-5.
7. D. Gao, Z. Zhang, J. Fu, Y. Xu, J. Q1, D. Xue. Room temperature ferromagnetism of pure ZnO nanoparticles., *J. Appl. Phys.*, **105** (2009) 113928-4.
8. T. Makino, T. Yasuda, Y. Segawa, A. Ohtomo, K. Tamura, M. Kawasaki, H. Koinutma. Strain effects on exciton resonance energies of ZnO epitaxial layers, *Appl. Phys. Lett.* **79** (2001) 1282-1284.
9. Y.X. Liu, Y.C. Liu, C.L. Shao, R. Mu. Excitonic properties of ZnO anocrystalline films prepared by oxidation of zinc-implanted silica. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 37 (2004) 3025–3029.
10. Y.Y. Shen, X.D. Zhang, D.C. Zhang, Y.H. Xue, L.H. Zhang, C.L. Liu. Toward uniform ZnO nanoparticles embedded in SiO₂ by post Xe irradiation, *Mater. Lett.* 65 (2011) 2966-2968.
11. D. Zatsepin, A. Zatsepin, D. Boukhvalov, E. Kurmaev, Z. Pchelkina, N. Gavrilov, Electronic structure and photoluminescence properties of Zn-ion implanted silica glass before and after thermal annealing, *J. Non-Cryst. Solids*, 432 (2016) 183-188.
12. V. Privezentsev, V. Kulikauskas, E. Steinman, A. Tereshchenko, A. Bazhenov, N. Tabachkova, A. Batrakov. Properties of near-surface layer of ⁶⁴Zn⁺ ion hot-implanted Si, *phys. stat.sol. (c)* 12 (2015) 1170-1174.
13. V.V. Privezentsev, V.S. Kulikauskas, V.V. Zatekin, E.P. Kirilenko, A.V. Goryachev, A.A. Batrakov. Investigating ⁶⁴Zn⁺ Ion Doped Silicon under Conditions of Hot Implantation. *Bull. Russ. Acad. Sci.: Physics* 80 (2016) 149–155.
14. Anil Vithal Ghule, Kalyani Ghule, Chin-Yuan Chen, Wen-Yin Chen, Shin-Hwa Tzing, Hua Chang, Yong-Chien Ling, In situ thermo-TOF-SIMS study of thermal decomposition of zinc acetate hydrate, *J. Mass Spectrometry* 39 (2004) 1202–1208.
15. J. D. Ye, S. T. Tan, S. Pannirselvam, S. F. Choy, X. W. Sun, G. Q. Lo, K. L. Teo, Surfactant effect of arsenic doping on modification of ZnO (0001) growth kinetics, *Appl. Phys. Lett.* 95 (2009) 101905-101911.
16. Pei-Ling Lee, Bo-Chia Chen, Ganesh Gollavelli, Sin-Yu Shen, Yu-Sheng Yin, Shiu-Ling Lei, Cian-Ling Jhang, Woan-Ruoh Lee, Yong-Chien Ling, Development and validation of TOF-SIMS and CLSM imaging method for cytotoxicity study of ZnO nanoparticles in HaCaT cells, *J. Hazardous Maters* 277 (2014) 3–12.
17. <http://www.srim.org>.
18. . Luc Van Vaeck, Annemie Adriaens, Renaat Gijbels, and Freddy Adams, Static Secondary Ion Mass Spectrometry: (S-SIMS) Part 1. Methodology and Structural Interpretation. Part 2. Material Science Applications, *Mass Spectrometry Reviews*, 18 (1999) 1 – 81, Wilrijk, Belgium.
19. NIST X-ray Photo-electron Spectroscopy Database, version 4.1 (<http://srdata.nist.gov/xps>).
20. J.F. Moulder, W.F. Stickle, P.E. Sobol, K.D. Bomben. Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy. Perkin-Elmer, Eden Prairie, USA, 1992.
21. X.Q. Wei, B.Y. Man, M. Liu, C.S. Xue, H.Z. Zhuang, C. Yang. Blue luminescent centers and microstructural evaluation by XPS and Raman in ZnO thin films annealed in vacuum, N₂ and O₂. *Physica B: Condensed Matter*, 388 (2007) 145–152.
22. R. Al-Gaashani, S. Radiman, A.R. Daud, N. Tabet, Y. Al-Douri. XPS and optical studies of different morphologies of ZnO nanostructures prepared by microwave methods. *Ceramic international*, 39 (2013) 2283–2292.
23. Z. Jiang, R.A. Brown. Atomistic Calculation of Oxygen Diffusivity in Crystalline Silicon, *Phys. Rev. Lett.* 74 (1995) 2046-2049.
24. R. Hultgren, R. L. Orr, P. Anderson, K.K. Kelley, Selected Values of Thermodynamic Properties of Metals and Alloys, Wiley, 1963.
25. M. Takesue, H. Hayashi, R. L. Smith, Jr. Thermal and chemical methods for producing zinc silicate (willemite): A review, *Prog. Cryst. Growth Characterz. Maters*, 55 (2009) 98-124.

Изменение структуры и свойств кварца, последовательно имплантированного ионами Zn и F, в процессе термических отжигов

В.В. Привезенцев^{1,2*}, А.Н. Палагушкин¹, Э.А. Штейнман³, А.Н. Терещенко³,
Н.Н. Колесников³, А.В. Макунин⁴, С.В. Ксенич⁵

¹НИИ системных исследований РАН, 117218 Москва, Россия

²Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН, 117218 Москва, Россия

³Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка 142432, Московская обл., Россия

³НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

⁵НИТУ «МИСиС», 119049 Москва, Россия

*e-mail: v.privezentsev@mail.ru

Аннотация Изучены температурные зависимости структурных и фазовых превращений в кварце, последовательно имплантированном цинком и фтором, при отжиге в среде азота. Пластины легировали ионами $^{64}\text{Zn}^+$ дозой $5 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$ с энергией 50 кэВ, а затем той же дозой ионов $^{19}\text{F}^+$, но с энергией 17 кэВ. После имплантации на поверхности образца зафиксированы отдельные Zn-содержащие частицы размером порядка 100 нм. При отжиге эти частицы уменьшаются в размерах (на порядок после отжига при 800°C). Имплантация приводит к образованию в объеме кварца радиационных точечных дефектов и их кластеров. В процессе термообработки радиационные дефекты постепенно отжигаются, и фаза металлического цинка трансформируется сначала в его оксид (ZnO) при 600°C, а затем в виллемит (Zn_2SiO_4) при 800°C.

Ключевые слова: кварц, Zn/F имплантация, термический отжиг, ZnO, наночастицы

1. Введение

Свойства наночастиц металлов и их оксидов всесторонне изучаются из-за перспективы их применения в будущих микро- и оптоэлектронных устройствах [1]. Значительный интерес представляют наночастицы из ZnO, поскольку этот прямозонный полупроводник характеризуется широкой запрещенной зоной 3.37 эВ и большой энергией связи экситона 60 мэВ. Среди важных применений наночастиц оксида цинка в микроэлектронике отметим такие, как: УФ-источник света [2, 3]; электролюминесцентные дисплеи [4, 5]; солнечные элементы [6]; химические датчики [7]; запоминающие устройства (мемристоры) [8]; устройства спинтроники [9], поскольку в оксиде цинка в форме наночастиц наблюдается ферромагнетизм уже при комнатной температуре; приборы на основе явления пьезоэлектричества [10]; химические датчики [11], и, наконец, в медицине [12] и биологии [13]. Из плавленного кварца наночастицы ZnO можно получить путем термической обработки в окислительной атмосфере кварцевых подложек, содержащих наночастицы Zn. Эти наночастицы реализованы в кварцевых стеклах, легированных Zn, которые могут быть получены ионной имплантацией, поскольку этот процесс считается одной из самых

чистых и гибких технологий. Много было попыток создать такие наночастицы с контролируемым размером и формой в кварцевом стекле путем имплантации Zn и термического окисления имплантированных пластин [14–17]. Поэтому интересно формировать частицы ZnO, внедренные в кварцевые подложки, другим методом, например с помощью последовательной имплантации других ионов, Zn и F, поскольку фтор имеет наибольшую электроотрицательность (по практической шкале Луо–Бенсона $\chi^* = 9.915$) и может вытеснять в различных соединениях такой окислитель, как кислород ($\chi^* = 8.11$). В рассматриваемом случае атомы F заменяют атомы O в матрице SiO_2 , образуют связи Si–F и производят молекулы O_2 , которые окисляют имплантированные атомы Zn и образуют частицы ZnO [18]. Отжиг проводится не в окислительной, а в нейтральной (азот) или инертной (аргон) средах и служит только для активации перечисленных выше

химических процессов. В настоящей работе изучена температурная зависимость при отжиге в нейтрально/инертной средах структурных и фазовых превращений в кварце, последовательно имплантированном ионами Zn и F.

2. Образцы и методика эксперимента

В аморфные кварцевые пластины оптического класса (концентрация OH^- 50ppb) были имплантированы сначала ионы $^{64}\text{Zn}^+$ с энергией 50 кэВ, а затем ионы $^{19}\text{F}^+$ с энергией 17кэВ (в обоих случаях доза $5 \times 10^{16} \text{см}^{-2}$). Проекционный пробег ионов обоих типов составлял около 40нм. Во время имплантации плотность ионного тока была менее 0.5мкА/см^2 во избежание значительного перегрева кварцевых пластин по сравнению с комнатной температурой. Затем образцы подвергались изохронному в течение 1ч отжигу в нейтральной атмосфере N_2 при температурах 400, 500 и 600°C, а при температурах 700 и 800°C – в инертной атмосфере Ar.

Поверхность образца исследовали с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ) LYRA3 TESCAN в режимах вторичной эмиссии электронов (ВЭ) и регистрации обратно рассеянных электронов (ОРЭ). Используемый РЭМ был оснащен также приставкой для энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС). Топологию поверхности дополнительно изучали с помощью сканирующего туннельного микроскопа ИНТЕГРА (NT-MDT) в режиме атомно-силового микроскопа (АСМ) в полуконтактной моде. Исследование оптических свойств имплантированного кварца при термических отжигах проводили путем регистрации при комнатной температуре оптического пропускания в спектральном диапазоне волновых чисел 10000–50000 и 2000–6000 см^{-1} с помощью спектрофотометра UV-Vis Specord-M40. Для измерения спектров фотолюминесценции (ФЛ) в температурном интервале 10–300К применяли накачку с помощью He–Cd-лазера с длиной волны 325нм и мощностью 5мВт/мм^2 . В качестве детектора фотонов использовали фотоумножитель ФЭУ-79.

3. Результаты и их обсуждение

3.1 Оптическое пропускание

На рис. 1,а показаны спектры оптического пропускания в среднем ИК-диапазоне исходного образца нелегированного кварца (кривая 1), а также имплантированного Zn (кривая 2) и затем

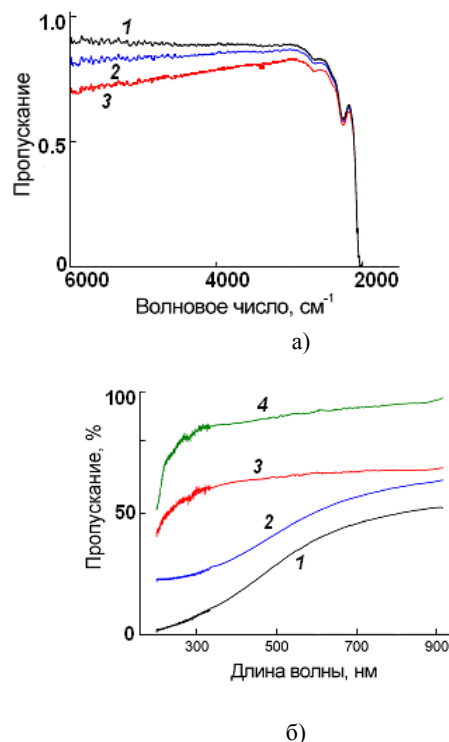


Рис. 1. Спектры оптического пропускания кварца: а – исходного образца (1), после имплантации цинка (2) и последующей за этим имплантации фтора (3); б – имплантированного цинком и фтором (1), после отжигов в нейтральной (азот) и инертной (аргон) средах при 400 (2), 600 (3) и 800°C (4).

последовательно имплантированного и F (кривая 3). Относительно кривой 1 следует сказать, что поглощение в чистом плавленном кварце в этом диапазоне велико, поскольку межатомные связи Si–O образованы разными элементами, и такая связь является частично ионной. Иначе говоря, ион кислорода имеет отрицательный заряд, а ион кремния – положительный. Поэтому из-за перераспределения электронной плотности образуется дипольный момент, обеспечивающий фотон-фононную связь. В этом случае поглощение света колебаниями кристаллической решетки – разрешенный процесс первого порядка, и он происходит с большой вероятностью [19]. Все три кривые (рис. 1,а) имеют одинаковый вид с той лишь разницей, что при переходе от кривой 1 к кривой 3 последовательно уменьшается оптическое пропускание, причем в начале среднего ИК-диапазона при $\lambda=1700 \text{нм}$ каждый раз на 10%, а в

конце этого диапазона при $\lambda = 5000$ нм оно спадает до нуля. Отметим, что в рассматриваемом случае кривая оптического пропускания исходного нелегированного кварца аналогична кривой из [19] (рис. 2.11, кривая 1).

На рис. 1,б показаны спектры оптического пропускания в диапазоне от жесткого УФ- до ближнего ИК-диапазона имплантированных (Zn + F) и отожженных образцов. После имплантации (Zn + F) в спектре (кривая 1) начиная с длины волны 200 нм и вплоть до ~ 700 нм наблюдается полоса значительного уменьшения оптического пропускания, обусловленная наличием фазы металлического Zn и связанным с этим поглощением света вследствие поверхностного плазмонного резонанса. Отжиг при 400°C (рис. 1,б, кривая 2) несколько (на 10–20%) увеличивает оптическое пропускание по сравнению с исходной кривой 1 для имплантированного образца, однако характер кривой при этом не изменяется. Просветление образца происходит за счет частичного окисления металлического цинка до фазы его оксида, которая прозрачна в этой области спектра. Отжиг при 600°C значительно увеличивает оптическое пропускание (рис. 1,б, кривая 3) – на 20–30% в синей области видимого спектра и на 5–10% в его красной области. Наблюдается сильный рост оптического пропускания в диапазоне $\lambda = 200\text{--}350$ нм, а при более длинных волнах – плавный рост с выходом на плато величиной 65% при $\lambda = 700$ нм. Одновременно с этим в спектре возникает полоса пониженного оптического пропускания в диапазоне длин волн 270–290 нм. Эту полосу можно связать с экситонным поглощением в оксиде цинка, поскольку после отжига при 600°C в образце начинает формироваться фаза ZnO и исчезать фаза металлического Zn. После отжига при температуре 800°C оптическое пропускание еще больше увеличивается (рис. 1,б, кривая 4) – на 5% в УФ-области спектра и на 20–30% в остальной его части с выходом на значение 95% при $\lambda = 900$ нм. На начальном участке спектра в интервале 200–230 нм наблюдается резкий рост оптического пропускания. При более длинных волнах характер кривой (рис. 1,б, кривая 4) не изменяется по сравнению с кривой 3. В спектре 4, так же как и на кривой 3, наблюдается полоса уменьшения оптического пропускания при длинах волн 270–300 нм, соответствующая фазе ZnO. После отжига при 800°C оптическое пропускание выходит на насыщение и стремится к 100% при 900 нм, так как полностью исчезает фаза металлического Zn, однако наряду с фазой ZnO в образце возможно образование фазы силицида цинка (виллемита) Zn_2SiO_4 . Образец почти полностью просветляется в видимой области спектра, поскольку поглощение в этой

области за счет металлической фазы Zn полностью исчезает. В имплантированных слоях отожженного при этой температуре образце металлическая фаза Zn трансформируется в прозрачные для света фазы ZnO и Zn_2SiO_4 .

Отметим, что оптическое пропускание чистого нелегированного кварца в исследованном спектральном диапазоне при уменьшении длины волны падает, поскольку с приближением к области поглощения растут показатель преломления и френелевские потери, а при $\lambda \leq 230\text{--}250$ нм заметную роль играет поглощение света [19]. Характер кривой 4 оптического пропускания самого просветленного образца (рис. 1,б) в этой области спектра такой же, как и для чистого кварца [19] (рис. 2.10)

3.2 Фотолюминесценция

На рис. 2 показаны спектры ФЛ образцов после имплантации и после отжига в атмосфере азота и аргона при повышенных температурах. После имплантации сигнал ФЛ очень слабый, с максимумом около 430 нм (рис. 2), что может быть обусловлено радиационными дефектами в кварце. Вставка на рис. 2 показывает те же спектры в увеличенном масштабе. После первого отжига при 400°C сигнал ФЛ убывает в результате отжига радиационных дефектов в кварце. После отжига при 600°C появляется гигантский максимум ФЛ на длине волны 369 нм, что связано с экситонной рекомбинацией в оксиде цинка ZnO, поскольку металлический Zn частично превратился в ZnO. Однако наблюдается слабая и широкая полоса с центром при 430 нм, обусловленная дефектами в ZnO. Соотношение интенсивностей ФЛ между экситонной линией и полосой, обусловленной дефектами, зависит от качества ZnO, и обычно эти линии сосуществуют друг с другом. Другими словами, после отжига в азоте при 600°C в течение 1 ч появляется стабильная фаза ZnO в матрице кварцевого стекла. После следующего отжига в течение 1 ч при температуре 800°C высота пика с максимумом при 369 нм сильно увеличивается, что может быть связано

с продолжением процесса формирования частиц ZnO, т.е. с увеличением их концентрации. Кроме этого, рост интенсивности линии 369нм отчасти

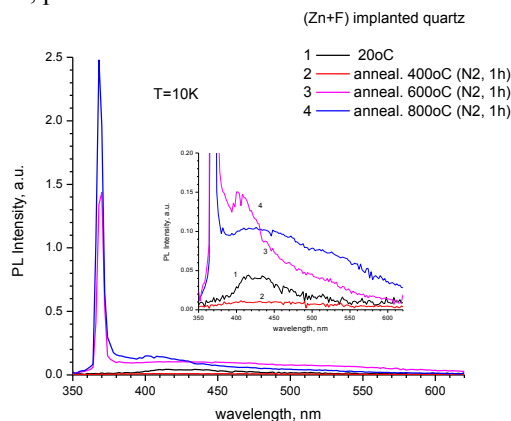
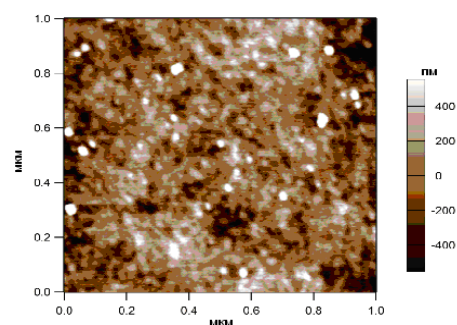


Рис. 2. Спектры ФЛ при температуре 10К образцов кварца, имплантированных последовательно ионами Zn^+ и F^+ : после имплантации (1), после отжига в течение 1 ч в инертной среде Ag при 400 (2), 600 (3) и 800°C (4).

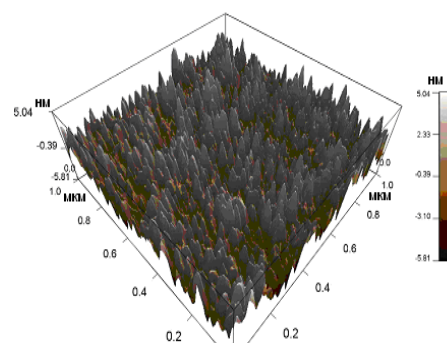
может являться результатом отжига радиационных дефектов при 800°C, вследствие которого уменьшается число центров рекомбинации (как излучательных, так и безызлучательных) в объеме кварцевой пластины. Уменьшение количества центров излучательной рекомбинации подтверждается тем, что вместе с ростом интенсивности линии 369нм после отжига при 800°C происходит значительное гашение широкой полосы люминесценции в диапазоне 430–620 нм (рис. 2, вставка).

3.3 Исследование топологии поверхности методом атомно-силовой микроскопии

На рис. 3 представлены 2D и 3D АСМ-изображения поверхности кварца после последовательной имплантации его цинком и фтором и после отжига в нейтральной среде азота при 800°C в течение 1 ч. По сравнению с исходным образцом кварца поверхность сглаживается, что является общеизвестным фактом. Это происходит из-за распыления поверхностного слоя при имплантации. Так, разброс шероховатости поверхности имплантированного кварца не превышает 1600 пм, и она состоит из отдельных бугорков и впадин. На рис. 3,б видно, что после отжига в инертной среде Ag при 800°C шероховатость поверхности значительно увеличивается. Она лежит в пределах от -5.81 нм (впадина, минимальное значение Z) до 5.04 нм (бугорок, максимальное значение Z). Поверхность состоит из бугорков и впадин со средним размером в



а)



б)

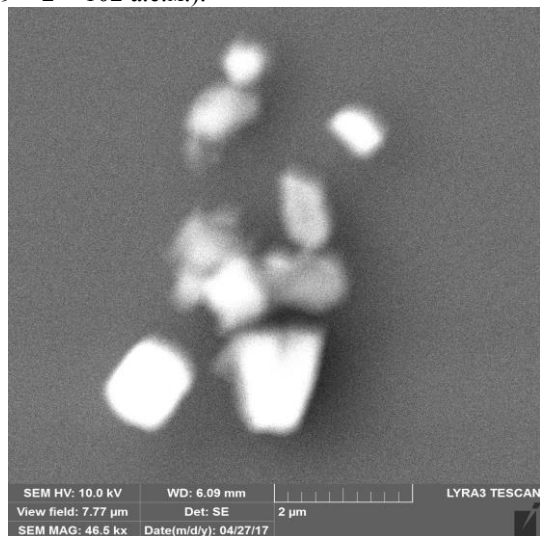
Рис. 3. АСМ-изображение поверхности образца: а – после имплантации Zn и F, б – отожженного при 800°C в инертной среде Ag.

плоскости в пределах 50–100 нм. Такое увеличение шероховатости можно связать с образованием в результате отжига под поверхностью образца наночастиц ZnO или Zn_2SiO_4 размером около 100 нм. Это и вызывает увеличение шероховатости поверхности кварца почти на порядок величины по сравнению с шероховатостью после имплантации цинка и фтора.

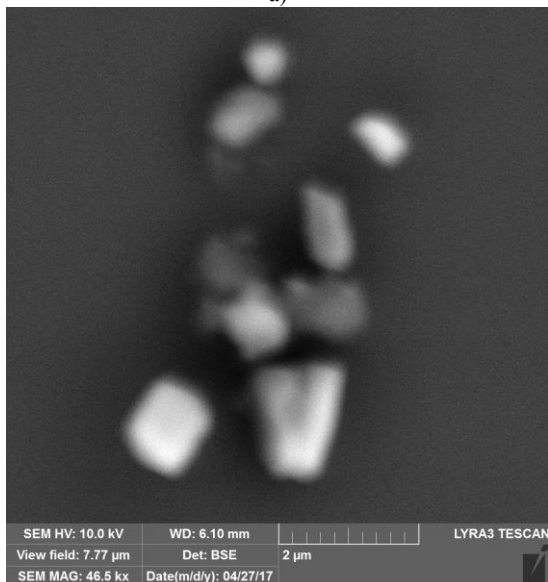
3.4 Растровая электронная микроскопия поверхности образцов

На рис. 4 представлены РЭМ-изображения образца, имплантированного Zn и F, полученные в режиме ВЭ и детектирования ОРЭ. Из рис. 4,а (РЭМ-ВЭ, топологический контраст) следует, что на поверхности кварца находятся частицы со средним размером около 1 мкм. Сравнение этого рисунка с рис. 4,б (РЭМ-ОРЭ, Z-контраст) показывает, что эти частицы состоят из материала, более тяжелого, чем молекула SiO_2 ($28 + 16 \times 2 = 60$

а.е.м.). Иначе говоря, эти частицы состоят из Zn (64 а.е.м.) или его соединения с фтором ZnF_2 ($64 + 19 \times 2 = 102$ а.е.м.).



а)



б)

Рис. 4. РЭМ-изображения образца, имплантированного Zn и F, полученные в режиме вторичной эмиссии (а) и детектирования обратно рассеянных электронов (б).

Ниже приведены данные ЭДС-анализа – качественные в виде спектра (рис. 5) и количественные (табл. 1).

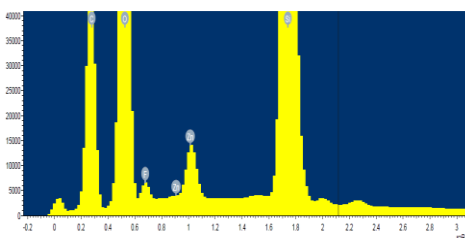


Рис. 5. ЭДС-спектр образца после имплантации Zn и F.

Из этих данных следует, что в приповерхностном слое (на глубине до 2 мкм), кроме элементов матрицы

Таблица 1. Результаты ЭДС-анализа образца кварца, имплантированного Zn и F.

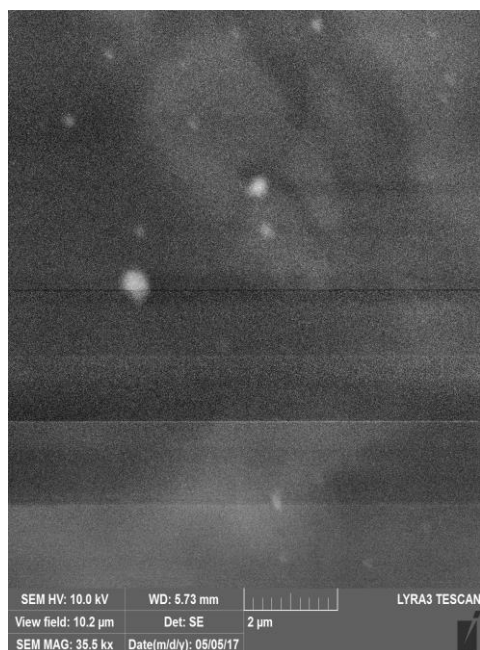
Элемент	Содержание, вес. %	Содержание, ат. %
C	32.47	44.82
O	35.89	37.19
F	1.85	1.38
Si	26.18	15.46
Zn	2.84	1.15
Итого	100.00	100.00

кварца, а именно, кремния и кислорода, присутствуют имплантированные примеси Zn и F, а также загрязнения (поверхности) углеродом С.

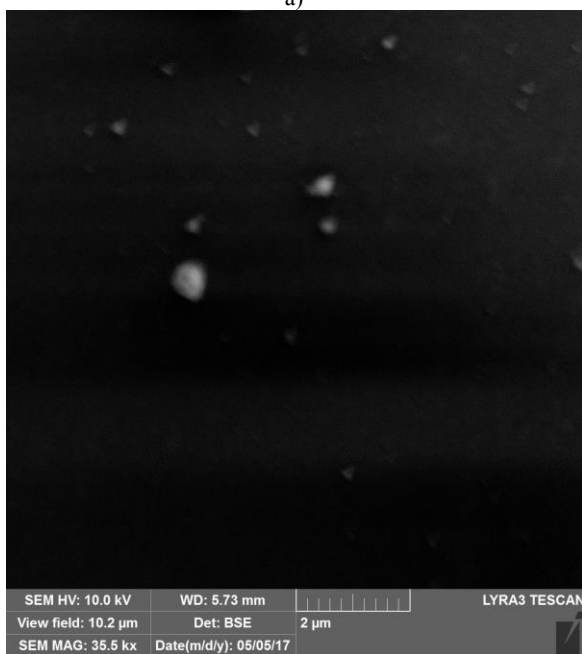
На рис. 6 представлены РЭМ-изображения образца, отожженного при температуре 800°C в инертной среде Ar. Из рис. 6,а (топологический контраст) следует, что на поверхности кварца находятся частицы со средним размером около 100 нм. Сравнение этого рисунка с рис. 6,б (Z-контраст) показывает, что эти частицы состоят из материала, более тяжелого, чем молекула SiO_2 ($28+16 \times 2=60$ а.е.м.). Иначе говоря, эти частицы состоят из Zn (64 а.е.м.) или его соединения с кислородом типа ZnO ($64 + 18 = 82$ а.е.м.) либо Zn_2SiO_4 ($64 \times 2 + 28 + 16 \times 4 = 220$ а.е.м.). Ниже приведены данные ЭДС-микроанализа – качественные в виде спектра (рис. 7) и количественные (табл. 2). Из данных следует, что в приповерхностном слое (на глубине до 2 мкм), кроме элементов матрицы кварца, а именно кремния Si и кислорода O, присутствует имплантированная примесь Zn, а также загрязнения (поверхности) углеродом С.

Отметим, что примеси имплантированного фтора F после этого отжига в образце не зафиксировано. Содержание загрязнений углеродом уменьшилось при отжигах почти вдвое. Значительно увеличилось относительное содержание кислорода, вероятно, за счет образования оксида цинка ZnO или его силицида (виллемита) Zn_2SiO_4 .

Относительное содержание кремния в приповерхностном слое уменьшилось почти втрое. Появление в спектре небольшого количества



а)



б)

Рис. 6. РЭМ-изображения образца, отожженного при температуре 800°C в инертной среде Ar, полученные в режимах ВЭ (а) и ОРЭ (б).

примеси Al может быть связано с паразитной засветкой держателя образца.

Дефекты, присутствующие на РЭМ-изображениях, полученных с использованием детекторов различных видов, обусловлены природой исследованного диэлектрического образца, изготовленного из кварца. Облучение диэлектрического образца электронным пучком приводит к постоянному накоплению на его поверхности заряда, что выражается в

постоянном изменении его светимости. Запись изображения в растре осуществляется построчно, что приводит к различной светимости в разных строках. Задачей было получение контрастного изображения поверхностных артефактов. Именно поэтому авторы не

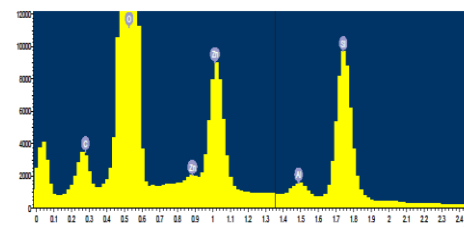


Рис. 7. ЭДС-спектр образца, отожженного при 800°C в инертной среде Ar.

сосредоточивались на равномерности картинки в целом, уделив основное внимание контрасту на границах фона и артефактов.

Различие в освещенности, полученное при использовании детекторов вторичных и ОРЭ, зависит от их энергии. Регистрация вторичных электронов, для которых общий диапазон разброса энергии составляет до 50эВ, осуществляется с использованием детектора Эверхарта–Торнли и позволяет, прежде всего, оценить морфологию объекта. Чувствительность этого детектора достаточно высока и поэтому даже незначительные колебания поверхностного заряда приводят к существенным изменениям светимости полученного изображения.

Таблица 2. Результаты ЭДС-анализа образца кварца, отожженного при 800°C в инертной среде Ar.

Элемент	Содержание, вес. %	Содержание, ат. %
C	10.42	15.58
O	66.33	74.43
Al	0.81	0.54
Si	9.03	5.77
Zn	13.41	3.68
Итого	100.00	100.00

Детектор ОРЭ изготовлен на основе кристалла иттрий-алюминиевого граната, установленного под полюсным наконечником микроскопа, он рассчитан на значительный разброс

электронов по энергии от 50эВ до исходных значений. Поэтому колебания светимости менее значительны, что видно на представленных РЭМ-изображениях. Основная информация сосредоточена на контрастном изображении светлых поверхностных артефактов, имеющих большее значение Z по сравнению с более темным фоном матрицы образца.

Наличие на изображениях горизонтальных линий связано с различием скоростей обновления картинки на экране микроскопа в разных условиях работы и особенностями физико-химических свойств исследуемого образца. При высокой скорости сканирования падает разрешение и детализация, а при низкой - возможно размывание отдельных строк. В данном случае оно вызвано низкой электропроводностью и блужданием заряда по поверхности. Это и приводит к различиям в светимости разных строк записываемой картинки. Сканирование проводится построчно и из полученных строк слагается готовое изображение аналогично телевизионному. Именно поэтому линии не вертикальные, а горизонтальные. Главное, чтобы в местах расположения значимых объектов изображение было достаточно четким.

4. Выводы

1) После имплантации цинка и фтора на поверхности кварца находятся Zn-содержащие частицы (Zn или ZnF_2) размером около 1 мкм, а после отжига в среде Ag при $800^\circ C$ – Zn-содержащие частицы (ZnO или Zn_2SiO_4) со средним размером около 100нм.

2) После имплантации поверхность кварца сглаживается из-за распыления, причем разброс шероховатости заключен в пределах 1.6нм, а после отжига при $800^\circ C$ этот разброс увеличивается на порядок, примерно до 10нм, из-за образования на поверхности и в подповерхностном слое Zn-содержащих частиц с латеральным размером около 100нм.

3) После имплантации в среднем ИК-диапазоне наблюдается последовательное уменьшение оптического пропускания по сравнению с исходным нелегированным образцом кварца, обусловленное образованием радиационных дефектов.

4) После отжига при $400^\circ C$ в спектрах оптического пропускания на длинах волн до от 200 до 700нм наблюдается значительное уменьшение пропускания из-за наличия фазы металлического Zn.

5) В процессе отжига имплантированных образцов при 600 и $800^\circ C$ в спектрах оптического пропускания зафиксировано последовательное просветление, обусловленное окислением металлического Zn до прозрачных в этом диапазоне фаз его оксида ZnO и силицида (виллемита) Zn_2SiO_4 .

5) После имплантации наблюдается слабый сигнал ФЛ с максимумом около 430нм, что может быть обусловлено радиационными дефектами в кварце. Этот сигнал пропадает после термообработки при $400^\circ C$, когда дефекты отжигаются.

6) После отжига при $600^\circ C$ в спектре ФЛ наблюдался резкий пик с максимумом при 369нм, обусловленный экситонной люминесценцией в ZnO , и широкая полоса с центром около 425нм, связанная с дефектами в оксиде цинка. Эта широкая полоса ФЛ может быть частично обусловлена и образовавшейся фазой Zn_2SiO_4 .

7) После отжига при $800^\circ C$ пик ФЛ при 369нм значительно уменьшается, а полоса ФЛ при 425нм возрастает в несколько раз. Все это обусловлено деградацией фазы ZnO и ее трансформацией в фазу Zn_2SiO_4 .

Благодарности

Авторы выражают благодарность В.Г. Плотниченко за предоставление исходных образцов кварца и В.В. Колташеву за результаты измерения оптического пропускания кварца в ИК-области.

Changes of Structure and Properties in Zn and F Ion Successively Implanted Quartz during Thermal Annealing

V.V. Privezentsev^{1, 2, *}, A.N. Palagushkin¹, E.A. Steinman³, A.N. Tereshchenko³,
N.N. Kolesnikov³, A.V. Makunin⁴, S.V. Ksenich⁵
* e-mail: v.privezentsev@mail.ru

¹Institute of System Analysis, Russian Academy of Sciences, 117218 Moscow, Russia

²Valiev Institute of Physics and Technology, Russian Academy of Sciences, 117218 Moscow, Russia

³Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Moscow district, Russia

⁴Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia

⁵National Research University "MISIS", 119049 Moscow, Russia

Abstract. The temperature dependences of structural and phase transformations in quartz successively implanted by zinc and fluorine during annealing in nitrogen have been studied. Plates were doped with $^{64}\text{Zn}^+$ ions to a dose of $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ with an energy of 50 keV and then with $^{19}\text{F}^+$ ions to the same dose but with an energy of 17 keV. After the implantation, individual Zn-containing particles about 100 nm in size were found on the sample surface. These particles decrease in size during annealing (by an order of magnitude after annealing at 800°C). The implantation leads to the formation of radiation-induced point defects and their clusters in the quartz bulk. Radiation-induced defects are gradually annealed during the heat treatment, and the phase of metallic zinc is transformed first to its zinc oxide (ZnO) at 600°C and then to willemite (Zn_2SiO_4) at 800°C.

Keywords: quartz, Zn/F implantation, thermal annealing, ZnO, nanoparticles

ЛИТЕРАТУРА

1. C.W. Litton, N.C. Collins, D.S. Reynolds. Zinc Oxide Material for Electronic and Opto-electronics Device Application. Chichester: Wiley, 2011. 363 p.
2. F.. Ren, L.Guo, Y. Shi et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 39 (2006) 488.
3. C.Y. Jiang, X.W. Sun, G.Q. Lo et al. // Appl. Phys. Lett. 90 (2007) 263501.
4. C. Li, Y. Yang, X.W. Sun et al. // Nanotechnology 18 (2007) 135604.
5. S. Chu, M. Olmedo, Zh. Yang et al. // Appl. Phys. Lett. 93 (2008) 181106.
6. G.P. Smestad, M. Gratzel // J. Chem. Educ. 75 (1998) 752.
7. H. Amekura, Y. Takeda, N. Kishimoto // Mater. Lett. 222 (2011) 96.
8. Y.Y. Shen, X.D. Zhang, D.C. Zhang et al. // Mater. Lett. 65 (2011) 2966.
9. B.B. Straumal, A.A. Mazilkin, S.G. Protasova et al. // Phys. Rev. B. 79 (2009) 205206.
10. C. Liu, H. Zhao, Y. Shen et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 326(2014) 23.
11. A. Sirelkhatim, S. Mahmud, A. Seeni et al. // Nano-Micro Lett. 7 (2015) 219.
12. K. Prashanthi, H. Zhang, R.V. Ramgopal, T. Thundat // Phys. Status Solidi. RRL 6 (2012) 77.
13. S. Inbasekaran, R. Senthil, G. Ramamurthy, T.P. Sastry // Intern. J. Innov. Res. Sci. Engin. Technol. 3 (2014) 8601.
14. H. Amekura, N. Umeda, Y. Sakuma et al. // Appl. Phys. Lett. 87 (2005) 013109.
15. Y.X. Liu, Y.C. Liu, D. Shen et al. // J. Cryst. Growth 240 (2002) 152.
16. V. Privezentsev, V. Kulikauskas, E. Steinman, A. Bazhenov // Phys. Status Solidi. C. 10 (2013) 48.
17. D. Zatsepin, A. Zatsepin, D.W. Boukhvalov et al. // J. Non-Cryst. Solids 432 (2016) 183.
18. H. Hosono // Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 110.
19. А.Н. Магунов. Лазерная термометрия твердых тел. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 224 с.

Формирование базы данных для новой методики учета фазовых состояний парафинистых нефтей

¹ К.Д. Ашмян, ² А.К. Пономарев, ³ О.В. Ковалева

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН. Москва. Россия

E-mail's: ¹kdashmyan@yandex.ru, ²akponomarev@mail.ru, ³olgakovaleva57@mail.ru

Аннотация: Контроль за фазовым состоянием высокомолекулярных парафиновых углеводородов в пластовой нефти является необходимым условием эффективной разработки месторождения. Отсутствие необходимых данных по парафинистым нефтям может быть компенсировано созданием методики расчета возможности образования твердой фазы в процессе разработки месторождения.

Ключевые слова: фазовое состояние, температура насыщения нефти парафином, смолы, асфальтены, парафин, остаточная нефть.

К числу проблем, рассматриваемых при разработке трудноизвлекаемых запасов нефти, относятся нефти, находящиеся на поздней стадии разработки заводнением. Добыча из заводненного пласта остаточных нефтей – задача сама по себе достаточно сложная, однако, именно в этих условиях по-новому проявляется фактор образования твердой фазы (АСПО), состоящей из парафина, асфальтенов, смол и др. компонентов.

Известно, что в процессе заводнения пластовая нефть постоянно находится в контакте с большим объемом пластовой воды, которая приводит к охлаждению остаточной нефти. Кроме того, за счет перераспределения компонентов между нефтью и пластовой водой происходит переход растворенных в нефти газообразных и легких компонентов из состава нефти в пластовую воду, а растворенные в воде кислород, углекислый газ, сероводород и др. компоненты вступают в окислительные реакции с углеводородами остаточной нефти. В результате такого массообмена происходит снижение пластового давления.

Таким образом, высокомолекулярные углеводороды парафинового ряда под воздействием изменившихся термобарических условий в пласте изменяют свое фазовое состояние, а именно, переходят из жидкого в твердое, т.е. происходит выпадение твердой фазы под воздействием техногенного процесса – заводнения.

Процесс выпадения твердой фазы из остаточных нефтей имеет более интенсивный характер за счет широкого охвата остаточных нефтей холодной закачиваемой водой и большой зоной контакта. При этом выпадение твердой фазы происходит быстро и не только по границе контакта остаточной нефти с пластовой водой, а практически во всем объеме контакта остаточных нефтей и пластовой воды.

Процесс образования твердой фазы в пластовой нефти более подробно описан в [1] и [2].

Отличительной особенностью выпадения твердой фазы – парафина с адсорбированными на поверхности кристаллической решетки асфальте нами и смолами, входящими в состав пластовой нефти, является то, что парафин выпадает не только из парафинистых (содержащих более 1,5%) и высокопарафинистых (более 6%), но и из малопарафинистых нефтей (менее 1,5%). Этот эффект достигается за счет того, что содержание высокомолекулярных парафинов в остаточной нефти по своему составу отличается от исходной нефти в сторону увеличения содержания компонентов с более высокой молекулярной массой..

На примере Азнакаевской и Алькеевской площадей Ромашкинского месторождения (Татарстан) установлено негативное действие заводнения при формировании остаточных нефтей,

связанное с отложениями парафинов. Так, в промытых слоях в составе нефти соотношение высокомолекулярных парафинов нормального строения и массового содержания алканов составляет 52 – 55%, а в верхних прослоях пласта количество высокомолекулярных парафиновых углеводородов увеличивается до 95%. Данный вывод получен при лабораторных исследованиях [3].

Таким образом, при использовании базы данных для контроля за выработкой остаточных запасов достаточно знания только количественных значений содержания парафина в разные периоды разработки месторождения. При создании методики [4] база данных по свойствам парафинистых нефтей по месторождениям РФ и СНГ, прежде всего, учитывала нефти, содержащие от 1,5% и выше, вплоть до высокопарафинистых, которые были получены в начальный период разработки нефтяных месторождений. Однако, в настоящее время вводится в разработку месторождения Восточной Сибири, расположенные в зоне распространения Вечномерзлых пород, т.е. с низкой пластовой температурой от (+8°C) до (+25°C). Как уже было показано в работе [5], это месторождения с преобразованными природой условиями залегания природных углеводородов (нефть, газ). Необходимость разработки большого количества обводненных месторождений, содержащих

от 35 до 70% первоначальных запасов, содержащих в количественном отношении менее 1,5% парафинов, потребует включения всех известных данных по малопарафинистым и парафинистым нефтям в базу данных для построения корреляционных зависимостей, позволяющих оценить фазовое состояние парафинов в пластовых условиях.

Заключение

Разработка заводненных месторождений с остаточными нефтями потребует проведения мониторинга изменения физико-химических свойств пластовых флюидов. Отсутствие информационной базы данных по содержанию и фазовому состоянию высокомолекулярных парафинов потребует включения данных по малопарафинистым нефтям в новую методику для возможности проведения расчетов по этому типу нефтей.

Повышение КИН (коэффициента извлечения нефти) за счет вовлечения в разработку нефтей на заводнённых месторождениях потребует применения адресных технологий МУН (методов увеличения нефтеотдачи). Контроль физико-химических свойств пластовых нефтей является необходимым условием применения этих технологий.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-07-00679А.

Formation of a database for a new method of accounting for the phase States of paraffin oils

K. D. Ashmyan, Ponomarev, A. K. Ponomarev, O.V. Kovaleva

Abstract: Control over the phase state of high-molecular paraffin hydrocarbons in reservoir oil is a necessary condition for effective field development. The lack of necessary data on paraffin oil can be compensated by the creation of a methodology for calculating the possibility of formation of a solid phase in the course of field development.

Key words: phase state, oil saturation temperature with paraffin, resins, asphaltenes, paraffin, residual oil.

Литература

1. К.Д.Ашмян, А.К.Пономарев, О.В.Ковалева. Развитие методики оценки фазового состояния парафинов в пластовых нефтях // Труды НИИСИ РАН, 2018, т. 8, №2, стр. 120 – 124.
2. К.Д.Ашмян, А.К.Пономарев, О.В.Ковалева. Учет факторов, влияющих на фазовое состояние «парафинов» в пластовых нефтях// Труды НИИСИ РАН, 2018, т. 8, № 4 , стр. 70 – 73.
3. Управление реологическими свойствами углеводородов в пластовых условиях : [монография] / Ю.А. Гуторов, А.Ю. Гуторов; Группа компаний "Недра", Региональный координационный науч.-технический центр "Нефтяная долина". - Октябрьский: РКНТЦ, 2015. - 365 с.
4. К.Д.Ашмян, О.В.Ковалева. И.Н.Никитина. Методическое руководство по выявлению залежей нефтей, насыщенных парафином, и оценке фазового состояния парафинов в пластовых нефтях // Вестник ЦКР РОСНЕДРА, № 6, 2011, с -11 – 14.
5. К.Д. Ашмян, С.Г. Вольпин, О.В. Ковалева. Разработка нефтяных месторождений в зоне распространения вечной мерзлоты. Территория НЕФТЕГАЗ, № 7 – 8. 2016,С. 102 – 107.

Компьютерное моделирование гибкого кондуктивного теплоотвода для охлаждения мощных микросхем

А.А. Воробьев, А.Г. Мадера

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва, Россия,

E-mail's: ¹ vorobiev@cs.niisi.ras.ru, ² omm@niisi.ras.ru

Аннотация. В статье рассматриваются результаты компьютерного моделирования конструкции гибкого кондуктивного теплоотвода для отвода тепла от мощных микросхем, показывающие что гибкий кондуктивный теплоотвод обладает высокими теплоотводящими свойствами и гибкостью в разных направлениях.

Ключевые слова: мощная микросхема, гибкий кондуктивный теплоотвод, контактное сопротивление

Увеличение мощности потребляемой микросхемами (МС) приводит к росту температуры кристалла МС, которая, в силу значительной зависимости от температуры важнейших характеристик МС (быстродействия, помехоустойчивости, надежности, и т.д.), существенно ограничивает возможности разработчиков МС и электронных модулей (ЭМ) по достижению заданных в ТЗ характеристик МС и ЭМ. Поэтому проектирование и разработка высокоэффективного способа отвода тепла от мощных МС, установленных в ЭМ, имеет принципиальное значение при создании конкурентоспособных электронных систем (ЭС).

В сложившейся практике конструирования ЭМ (в стандарте EU) для отвода тепла от различных МС, установленных в ЭМ, большое распространение получила конструкция теплоотвода в виде единой металлической пластины (ЕМП), выполненная из теплопроводного материала. По идее конструкторов-разработчиков ЕМП такая металлическая пластина-теплоотвод должна одновременно контактировать со всеми МС, имеющими высокую мощность потребления, тепло от которых поступает далее на ЕМП, затем растекается по ее площади и далее – достигнув торцев пластины будет отводиться к стоку тепла через клиновый механизм крепления ЭМ к охлаждаемой стенке корпуса ЭС.

Величины контактных тепловых сопротивлений, как известно, оказывают наиболее существенное влияние на уровень температуры среди многих других причин,

поэтому при тепловом проектировании к качеству контакта между теплоотводом и корпусом МС, а также между стоком тепла и стоком (клиновым механизмом), предъявляются самые жесткие требования. Между тем, различные МС, устанавливаемые на печатной плате, различаются между собой как конструкцией корпуса (высотой, площадью, неплоскостностью), так и величиной зазора между платой и корпусом МС, образованных при монтаже МС в ЭМ. В силу этого конструкция ЕМП не может обеспечить эффективный тепловой контакт одновременно со всеми МС, от которых необходимо отвести тепло. Иначе говоря, обеспечение плотного теплового контакта пластины ЕМП с одной из МС, тепловые контакты пластины ЕМП и остальными МС будут неудовлетворительными. При этом величина получающихся зазоров между различными МС и конструкцией ЕМП может достигать нескольких миллиметров, что не может быть скомпенсировано ни теплопроводными пастами, ни эластичными теплопроводными прокладками. Причем проблема качественного теплового контакта конструкции ЕМП одновременно со всеми МС не решена до сих пор. Поэтому для эффективного отвода тепла от мощных МС, тем более в условиях дефицита конструктивного пространства в ЭС, необходимо использовать иные конструкции теплоотводов, которые являются индивидуальными и не зависят от теплоотвода от остальных МС.

Одним из эффективных способов охлаждения МС в сложных конструкциях ЭМ и ЭС является кондуктивный способ отвода

тепла, который позволяет удовлетворить высокие требования, предъявляемые как к устойчивости конструкции по механическим и вибрационным воздействиям, так и

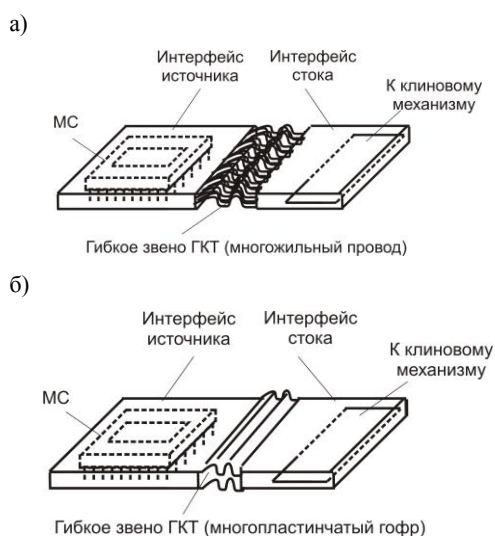


Рис. 1. Варианты исполнения гибкого кондуктивного теплоотвода, прижимаемого к корпусу МС и теплоотводу на клиновом механизме. Конструкция гибкого звена: (а) многожильный провод, (б) многопластинчатый гофр

пониженным давлениям и пониженным / повышенным температурам окружающей среды и влажности, сохраняя при этом свои высокоэффективные теплоотводящие характеристики.

Анализируемая конструкция гибкого кондуктивного теплоотвода (ГКТ), во-первых, обладает гибкостью во всех направлениях в пространстве, во-вторых, обеспечивает возможность создания индивидуального плотного теплового контакта как между конструкцией ГКТ и МС, так и одновременно между ГКТ и конструкцией стока, выполненного на клиновом механизме, и, в третьих, имеет величину теплового сопротивления сопоставимого по порядку величины с тепловым сопротивлением тепловой трубы.

Конструкция ГКТ (рис. 1, а, б) представляет собой две высокотеплопроводные пластины, выполненные из меди, одна из которых прижимается к корпусу МС (интерфейс источника), другая – к кондуктивному элементу, связанному с прижимным клиновым механизмом (интерфейс стока). Интерфейсы источника и стока соединены между собой гибким высокотеплопроводным звеном (многожильным проводом (рис. 1, а),

многопластинчатым гофром (рис. 1, б)), имеющим возможность изгиба в различных направлениях. Конструкция ГКТ позволяет обеспечить эффективную теплопередачу от корпуса МС к стоку тепла путем создания эффективного индивидуального прижима как к корпусу МС, так и к конструкции теплоотвода-стока с клиновым механизмом.

Гибкое звено в ГКТ может быть выполнено в различных вариантах:

- в виде многожильного медного провода (рис. 1, а), представляющего собой совокупность (пучок) отдельных, не скрепленных между собой, тонких медных проволочек

- в виде многопластинчатого медного гофра (рис. 1, б), представляющего собой набор не скрепленных между собой тонких медных пластин.

В обоих вариантах конструкции ГКТ, интерфейс источника / стока (рис. 1) представляет собой конструкцию, которая с одной стороны объединяет многожильное / многопластинчатое гибкое звено в единое целое и, с другой стороны, обеспечивает эффективное прижатие к источнику (микросхеме) и стоку тепла; гибкое звено соединяет интерфейсы источника и стока. Если ГКТ в виде многожильного провода обладает гибкостью во всех пространственных направлениях, то гибкость ГКТ, выполненного в виде пластинчатого гофра, хотя и имеет место, но существенно ограничена.

Инженерная оценка показывает, что при диаметре проволочек в многожильном медном проводе 0,2мм, длине гибкой связи 15мм, размерах интерфейса источника и стока равных (длина×ширина×высота, мм) 16×16×5 мм, тепловое сопротивление ГКТ составляет $R_{ГКТ} = 0,8$ К/Вт. Это означает, что, при мощности тепловыделения МС равной $P = 10$ Вт, перепад температуры по гибкому звену ГКТ, составит величину $\Delta T = R_{ГКТ} \cdot P = 0,8 \cdot 10 = 8$ °С. Для сравнения укажем, что тепловое сопротивление контурной тепловой трубы (КТТ), разработанной «Теркон», составляет 0,65 К/Вт и увеличивается с ростом мощности тепловыделения МС. В же время, тепловое сопротивление конструкции ГКТ с увеличением мощности тепловыделения МС остается неизменным. Кроме того, в то время как характеристики и работоспособность конструкции КТТ в значительной мере зависит от ее ориентации в пространстве, ускорительных перегрузок, вибраций, ударов, то конструкция ГКТ от не

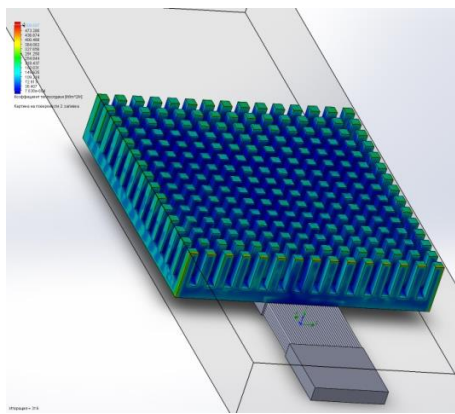


Рис. 2. Моделируемая конструкция ГКТ со штыревым радиатором

подвержена зависимости от указанных факторов.

– сечение штыря – квадрат, со стороны штыря $\delta_{шт} = a = 2 \text{ мм}$.

– высота штыря $h = 8 \text{ мм}$,

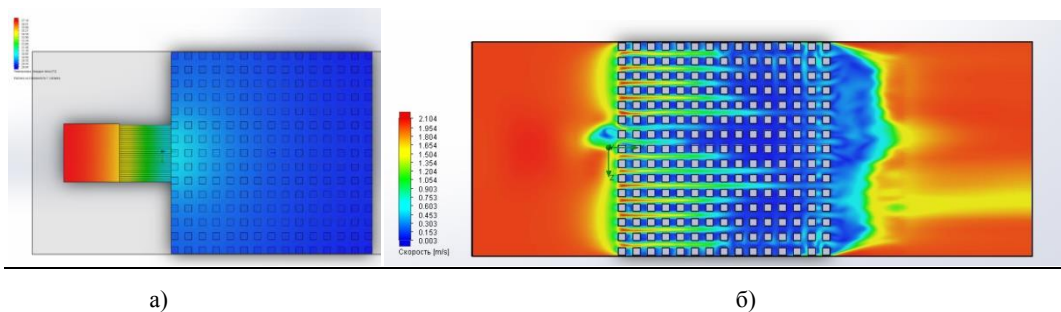
– расстояние между штырями $b = 2 \text{ мм}$.

При этих параметрах характеристики штыревого радиатора равны:

– площадь сечения штыря $S_{1,шт} = a^2 = 2^2 = 4 \text{ мм}^2$;

– периметр сечения штыря $p_{1,шт} = 4 \cdot 2 = 8 \text{ мм}$;

– количество штырей радиатора N , размещаемых на прямоугольном основании радиатора с размерами $l = 58 \text{ мм}$ ($\delta_{шт} = a$) $N = \frac{(l+a)(l+a)}{4a^2} = \frac{(58+2)(58+2)}{4 \cdot 2^2} = 225$ шт., при этом по каждой стороне укладывается по 15 штырей.



а)

б)

Рис. 3. Температурное поле конструкции ГКТ со штыревым радиатором (а) и поле скорости воздушной среды (вид сверху) ГКТ со штыревым радиатором

Компьютерное моделирование теплового режима ГКТ проводилось на 4-х ядерном PC с использованием компьютерного программного комплекса САПР SolidWorks. Параметры моделируемого ГКТ: размеры интерфейса источника $16 \times 16 \times 3 \text{ мм}$, размеры интерфейса стока $16 \times 10 \times 3 \text{ мм}$ длина гибкого звена 15 мм , диаметр проволочек $0,5 \text{ мм}$. Интерфейс источника установлен на МС, интерфейс стока – на штыревом радиаторе. Вся конструкция находится в состоянии принудительной конвекции воздушной средой, поступающей от блока вентиляторов с объемным расходом $110 \text{ м}^3/\text{час}$ и максимальной скоростью 2 м/с . Мощность тепловыделения МС составляет $P = 5 \text{ Вт}$, температура среды 22°C .

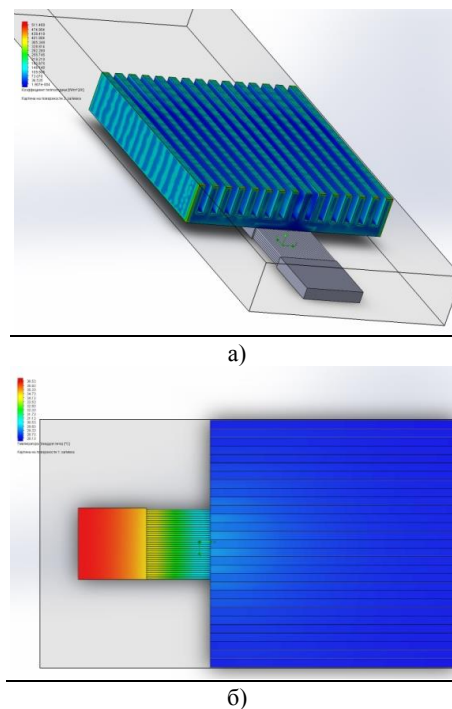
Конструкция штыревого радиатора (рис. 2) имеет следующие параметры:

– материал штыревого радиатора медь с коэффициентом теплопроводности ($\lambda_{rad} = 395 \text{ Вт/мК}$),

– основание радиатора – квадрат со стороной $l = 58 \text{ мм}$,

– толщина основания радиатора $d = 3 \text{ мм}$

Результаты моделирования конструкции ГКТ с штыревым радиатором (рис. 3) для температурного поля и поля скоростей



а)

б)

Рис. 4. Моделируемая конструкция ГКТ с ребристым радиатором (а) и температурное поле конструкции ГКТ с ребристым радиатором

воздушного потока приведены на рис. 3а,б. Тепловое сопротивление ГКТ составляет, по результатам расчета, значение $R_{\text{ГКТ}} = 1,6 \frac{\text{К}}{\text{Вт}}$. При мощности тепловыделения $P = 5$ Вт перепад температуры по гибкому звену ГКТ будет равно $\Delta T = R_{\text{ГКТ}} P = 1,6 \cdot 5 = 8^\circ\text{C}$. Для сравнения на рис. 4а приведена конструкция ГКТ с ребристым радиатором, результаты моделирования температурного поля приведены на рис. 4б, показавшие незначительное отличие в сравнении с применением штыревого радиатора.

Основным преимуществом ГКТ является обеспечение низких значений контактных тепловых сопротивлений между интерфейсами ГКТ и поверхностями с которых отводится тепло (корпус МС) и к которым оно подводится (сток). Поэтому целесообразно оценить выигрыш от его применения. Для этого оценим перепады температуры через контактные тепловые сопротивления между МС, стоком и единой пластиной-теплоотводом, без использования ГКТ. Учитывая, что единая поверхность пластины-тепловода как правило имеет

значительные зазоры с МС и стоком, примем их равными 1мм и проложенными пастой КПТ-8. Тогда контактное тепловое сопротивление между МС и пластиной составит величину $R_{\text{Контакт МС и Пластины}} = \frac{0,001}{0,8 \cdot 0,016 \cdot 0,016} = 4,9 \frac{\text{К}}{\text{Вт}}$. При мощности $P = 5$ Вт, перепад температуры на контактном тепловом сопротивлении составит $\Delta T = R_{\text{ГКТ}} P = 4,9 \cdot 5 = 24,5^\circ\text{C}$, что в 3,1 раза больше чем перепад температуры по ГКТ.

Таким образом, результаты оценок и компьютерного моделирования конструкции ГКТ и различных радиаторов (штыревого и ребристого), показали существенно большую эффективность отвода тепла от МС с применением ГКТ, чем традиционных пластин-теплоотводов.

Публикация выполнена в рамках государственного задания по проведению фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) 0065-2019-0001

Computer simulation of a flexible high conductive heat sink for cooling powerful microcircuits

A.A. Vorobyev, A.G. Madera

Abstract. The article discusses the results of computer simulation of the design of a flexible conductive heat sink, for the cooling of powerful microcircuits, have showing that the flexible conductive heat sink has high heat dissipation properties and flexibility on the different directions.

Keywords: powerful microcircuit, flexible conductive heat sink, contact resistance

Литература

Устройство охлаждения и отвода тепла от компонентов электронных систем // Патент на полезную модель, № 117056, Заявка № 2011149886, Зарегистрировано в Гос. реестре полезных моделей РФ 10 июня 2012 / Мадера А.Г., Гречишников В.И., Гнитиев М.Ю.

Обобщенная математическая модель нелинейных стохастических тепловых процессов в сложных электронных системах

А.Г. Мадера

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва, Россия
E-mail: omm@niisi.ras.ru,

Аннотация. Рассматривается концепция обобщенной математической модели тепловых процессов в сложных электронных системах на различных иерархических уровнях. Концепция позволяет моделировать тепловые режимы в электронных системах любой сложности условиях эксплуатации при дестабилизирующих воздействиях.

Ключевые слова: тепловой процесс, иерархические уровни, тепловая обратная связь, многофункциональный программный комплекс

Для обеспечения возможности математического и компьютерного моделирования тепловых процессов в сложных электронных системах (ЭС) различного назначения, учитывающих разнообразные физические процессы протекающие при их функционировании необходим подход, позволяющий проводить моделирование ЭС для различных иерархических уровней. Иерархическая структура отражает как конструктивную иерархию ЭС и одновременно иерархию математических моделей и последовательности задач, решаемых при моделировании процессов теплообмена.

Иерархическая структура конструкции ЭС в общем случае, характеризуется пятью уровнями [8, 9]: 1 уровень – отдельные элементы ЭС; 2 уровень – электронный модуль (ЭМ); 3 уровень – панель (крейт, блок), объединяющая несколько ЭМ; 4 уровень – стойка с множеством панелей; 5 уровень – помещение (стационарное или подвижное) для размещения и функционирования стоек ЭС, включая системы интерфейса, охлаждения и кондиционирования.

Иерархия математических моделей и последовательности решаемых теплофизических задач развивается в порядке обратном иерархической структуре конструкции ЭС. При этом входные (определяющие) и выходные (определяемые) параметры и факторы тепловых процессов в ЭС, носят интервально стохастический характер на всех иерархических уровнях системы.

Введение концепции иерархического структурирования конструкции ЭС и решаемых теплофизических задач, позволяет разработать универсальную тепловую модель ЭС в едином подходе охватывающую все теплофизические процессы, протекающие на любом

иерархическом уровне. Концепция иерархических уровней ЭС обеспечивает также возможность создания универсальных математических моделей и методов, описывающих тепловые процессы на любом иерархическом уровне и проводить численное компьютерное моделирование нестационарных интервальных статистических мер, порождаемых интервально-стохастическими тепловыми процессами в ЭС, а именно: математических ожиданий, дисперсий, среднеквадратических отклонений, ковариаций. Разработанные подходы могут положены в основание многофункционального программного комплекса, предназначенного для моделирования интервально-стохастических тепловых процессов ЭС на любом иерархическом уровне и любой сложности [2, 3].

Параметры электронных систем (ЭС) и элементов ЭС, как показано в работах [1] являются неопределенными (интервально-стохастическими) и обуславливаются:

- статистическим технологическим разбросом параметров элементов ЭС и всей ЭС в целом,
- статистическим технологическим разбросом параметров конструкции ЭС при сборке, установке микросхем (МС) и проведении монтажных работ в ЭС,
- случайными факторами ЭС, возникающими при функционировании ЭС,
- случайными параметрами окружающей среды при эксплуатации и проведении испытаний ЭС.

Поэтому для повышения степени адекватности результатов моделирования тепловых процессов в ЭС необходимо чтобы разрабатываемые модели и методы учитывали неопределенный характер, точнее интервально-

стохастический характер, определяющих факторов. Поскольку для моделирования интервально стохастических тепловых процессов в ЭС необходимо знать все законы распределения любого числа измерений стохастических факторов, то моделирование на практике наталкивается на непреодолимые трудности. В то же время, для практических приложений знание всех законов распределения излишне, и достаточно знать нестационарные статистические меры – математические ожидания, дисперсии, среднеквадратические отклонения, ковариации. Располагая статистическими мерами можно определить нестационарные распределения верхних и нижних границ интервалов, внутри которых будут изменяться реальные значения температур элементов в ЭС. Разрабатываемые методы математического и компьютерного моделирования интервально стохастических тепловых процессов в условиях интервальной неопределенности составляют основу для создания многофункционального программного комплекса для теплового проектирования ЭС (МФПК-ТП-ЭС).

Основные требования, предъявляемые к МФПК-ТП-ЭС следующие [2, 3].

Разработка МФПК-ТП-ЭС является критически важной и актуальной для создания новых конкурентоспособных ЭС особенно на современном этапе для решения задачи по импортозамещению и импортобезопасности программного обеспечения. Существующие в настоящее время в зарубежных компаниях программные комплексы (ПК) для тепловых расчетов ЭС (Beta Soft, TGM Thermal Analysis & Electronic System Cooling, SINDA, Ansys, FLOTHERM, и другие, включая отдельные тепловые модули, встроенные в различные CAD/CAM/CAE), обладают серьезными системными недостатками, не позволяющими использовать их в практике теплового проектирования ЭС, в том числе и отечественной. К основным недостаткам зарубежных ПК относятся отсутствие возможности моделирования температурных распределений (1) в многослойной печатной плате ЭМ, насчитывающей более нескольких десятков разнородных слоев; (2) при интервально стохастических тепловых, электрических и конструктивных параметрах ЭС и стохастической неопределенности условий реальной окружающей среды; (3) тепловой обратной связи [4, 5, 6], оказывающей значительное влияние на электрические режимы ЭС.

Конструкции электронных систем (ЭС) отличаются большой сложностью, разнообразием, насчитывают большое количество элементов (сотни тысяч), характеризуются сложными взаимосвязями между ними и взаимовлия-

нием, интервально стохастическим характером тепловых и электрических параметров ЭС [1, 7] и находятся под воздействием тепловой обратной связи, которая заключается во взаимном влиянии мощностей потребления элементов на распределение температуры в ЭС, и температурного распределения в элементах ЭС – на потребляемые мощности. Поэтому для того чтобы осуществление математического и компьютерного моделирования тепловых процессов в сложных ЭС с учетом воздействия физических явлений, сопровождающих функционирование ЭС, стало возможным, разработан подход, основанный на концепции иерархической структуры ЭС, отражающей как иерархию уровней конструкции ЭС, так и протекающих в них тепловых процессов, процессов различной физической природы и описывающих их математических методов и моделей [8, 9].

Тепловая обратная связь возникает в полупроводниковых интегральных микросхемах ЭС, построенных с их применением, в силу значительной зависимости электрических и физических параметров полупроводникового кристалла МС от температуры [4, 5, 6]. Эффект тепловой обратной связи заключается в том, что в процессе своего функционирования потребляемая МС мощность приводит к саморазогреву, а ввиду зависимости физических параметров полупроводникового кристалла МС от температуры, – к изменению (увеличению или убыванию) мощности потребления, которая снова изменяет температурное распределение в МС, приводя к новому изменению потребляемой мощности, замыкая тем самым петлю обратной связи. Рассмотренная обратная связь называется тепловой обратной связью, далее ТОС: потребляемая МС мощность ($P_{номп}$) приводит к возникновению температурного распределения на кристалле $T_j(P_{номп})$, а распределение температуры, в свою очередь, – к изменению мощности потребления МС в соответствии с ее температурной зависимостью $P(T_j)$. Тепловая обратная связь может быть как положительной – потребляемая мощность увеличивается с ростом температуры МС, так и отрицательной – потребляемая мощность уменьшается с ростом температуры МС.

Воздействие ТОС на электрический и тепловой режимы микросхем (МС) и ЭС приводит к таким нежелательным последствиям, как выход электрических (статических и динамических) параметров за пределы допустимых значений, снижение надежности, нарушение работоспособности, уменьшение помехоустойчивости, повышенные уровни темпера-

туры, и пр. Воздействие ТОС при функционировании МС и ЭС в большей или меньшей степени присутствует всегда и неустранимо, хотя и может быть в ряде случаев снижено, например, за счет применения более эффективных способов охлаждения, создания МС с меньшим энергопотреблением или отрицательной ТОС. Несмотря на то, что ТОС оказывает значительное влияние на функциональные характеристики и параметры МС и ЭС их проектирование в большинстве случаев проводится без учета эффекта ТОС, что приводит к ошибкам проектирования и созданию неконкурентоспособных МС и ЭС. Поэтому исследование и разработка методов моделирования воздействия ТОС на тепловые процессы в ЭС является в настоящее время актуальным. Предложенный метод моделирования ТОС основан на введении в тепловую модель ЭС новых схемных элементов, представляющих собой термозависимые тепловые проводимости и несущих в себе информацию о зависимости мощностей потребления элементов ЭС от температуры [4, 5]. Такой подход позволяет включать описание нового схемного элемента как в обобщенное матрично-топологическое уравнение, описывающее тепловые процессы в сложных ЭС, так и в существующие и разрабатываемые эффективные программные комплексы теплового проектирования [12].

Иерархия задач математического моделирования тепловых процессов на функционально-конструктивных уровнях ЭС соответствует иерархической структуре конструкции ЭС, они решаются последовательно, но в обратном порядке начиная с самого верхнего (пятого) уровня и заканчивая нижним, первым уровнем.

Входные данные, определяющие тепловые процессы в ЭС являются интервально-стохастическими. При этом выходные стохастические факторы теплового процесса, получаемые в результате моделирования, являются производными от указанных входных стохастических факторов. Согласно методу анализа и моделирования интервально-стохастических процессов в ЭС, развитому в работах [1 – 6], основными характеристиками входных и выходных стохастических факторов являются их статистические меры – математические ожидания, дисперсии, среднеквадратические отклонения и ковариации.

Стохастическими определяющими тепловые процессы в ЭС факторами, являются полная мощность потребления $P_1(t, \omega)$ всех активных элементов ЭС на 1-ом иерархическом уровне, а также температура среды в помеще-

нии $T_a(t, \omega)$, где устанавливается и эксплуатируется ЭС. Примем, что для стохастических факторов $P_1(t, \omega)$ и $T_a(t, \omega)$ известны их математические ожидания $\bar{P}_1(t)$, $\bar{T}_a(t)$ и дисперсии $D_{P_1}(t)$, $D_{T_a}(t)$. Далее, для простоты, но без умаления общности, будем полагать, что стохастические величины потребляемой мощности, температуры среды в помещении, температуры нагнетаемой воздушной среды на входе в стойку, а также их статистические меры \bar{P}_1 , \bar{T}_a , \bar{T}_{in} и D_{P_1} , D_{T_a} , $D_{T_{in}}$ не изменяются во времени. При необходимости зависимости от времени указанных факторов могут быть включены в общую математическую модель.

Отметим, что передача теплового потока между двумя соседними элементами как на данном, так и на различных иерархических уровнях ЭС ($\text{ЭМ}_i \leftrightarrow \text{ЭМ}_{i+1}$; $\text{ЭМ} \leftrightarrow \text{Панель}$; $\text{Панель}_i \leftrightarrow \text{Панель}_{i+1}$; $\text{Панель}_i \leftrightarrow \text{Блок панелей}$; $\text{Блок панелей} \leftrightarrow \text{Корпус стойки}$) осуществляется в основном потоками излучения, которые, принимая во внимание, что предельная температура элементов 1 уровня не превышает 150 градусов, – представляет собой пренебрежимо малую величину и им далее пренебрегается.

Общая стохастическая математическая модель тепловых процессов на различных уровнях иерархии конструкции ЭС, определяющая нестационарные интервально-стохастические средние температуры поверхностей нагретых зон $T_5(t, \omega)$, $T_4(t, \omega)$, $T_3(t, \omega)$, $T_2(t, \omega)$, $T_1(t, \omega)$ на всех пяти уровнях конструктивной иерархии ЭС, имеет следующий вид ($\omega \in \Omega$, ω – элементарные события из пространства элементарных событий Ω), имеет вид:

$$\begin{aligned} C_5 \frac{dT_5(t, \omega)}{dt} - J_{e4-5}(T_{e4}(t, \omega), T_5(t, \omega)) + \\ + J_{5-a}(T_5(t, \omega), T_a(\omega)) = 0, \\ C_4 \frac{dT_4(t, \omega)}{dt} + J_{4-e4}(T_4(t, \omega), T_{e4}(t, \omega)) + \\ + J_{4-5}(T_4(t, \omega), T_5(t, \omega)) = P_4(\omega), \\ C_{3,k} \frac{dT_{3k}(t, \omega)}{dt} + J_{3k-e3,k}(T_{3k}(t, \omega), T_{e3,k}(t, \omega)) + \\ + J_{3k-5}(T_{3k}(t, \omega), T_5(t, \omega)) = P_{3k}(\omega), \\ C_{2,m_k} \frac{dT_{2,m_k}(t, \omega)}{dt} + \\ + J_{2,m_k-e2,k}(T_{2,m_k}(t, \omega), T_{e2,k}(t, \omega)) = P_{2,m_k}(\omega), \\ C_1 \frac{dT_1(t, \omega)}{dt} + J_{1-e2,k}(T_1(t, \omega), T_{e2,k}(t, \omega)) = \\ = P_1(\omega), \end{aligned}$$

где $J_{e4-5}(T_{e4}(t, \omega), T_5(t, \omega))$ – тепловой поток от среды в стойке с температурой $T_{e4}(t, \omega)$ к корпусу стойки со средней температурой $T_5(t, \omega)$; $J_{5-a}(T_5(t, \omega), T_a(\omega))$ – тепловой поток от корпуса стойки во внешнюю среду в поме-

щении с температурой $T_a(\omega)$; $P_4(\omega)$ – суммарная мощность блока панели; $J_{4-e4}(T_4(t, \omega), T_{e5}(t, \omega))$ – тепловой поток от средней температуры поверхности нагретой зоны блока панелей $T_4(t, \omega)$ в среду между блоком панелей и корпусом стойки с температурой $T_{e5}(t, \omega)$; $J_{4-5}(T_4(t, \omega), T_5(t, \omega))$ – тепловой поток между конструкцией Блока панелей и корпусом стойки, обусловленный кондуктивным потоком по элементам крепления Блока панелей к стойке; $P_{3,k}(\omega)$ – суммарная мощность k -й панели; $J_{3k-e3,k}(T_{3k}(t, \omega), T_{e3,k}(t, \omega))$ – тепловой поток от средней температуры поверхности нагретой зоны k -й панели $T_{3,k}(t, \omega)$ в среду в k -й панели с температурой $T_{e3,k}(t, \omega)$; $J_{3k-5}(T_{3k}(t, \omega), T_5(t, \omega))$ – тепловой поток между конструкцией k -й панели и корпусом стойки, обусловленный кондуктивным потоком по элементам крепления k -й панели к стойке; $P_{2,m_k}(\omega)$ – мощность m_k -го ЭМ, установленного в панели с номером k ; $J_{2,m_k-e2,k}(T_{2,m_k}(t, \omega), T_{e2,k}(t, \omega))$ – тепловой поток от средней температуры поверхности нагретой зоны m_k -го ЭМ $T_{2,m_k}(t, \omega)$ в среду вокруг ЭМ в k -й панели с температурой $T_{e2,k}(t, \omega)$; $P_1(\omega)$ – мощность потребления отдельной МС.

Начальные условия в элементах на всех иерархических уровнях равны температуре окружающей среды $T_a(\omega)$ в помещении установки ЭС, а именно $T(t = 0, \omega) = T_a(\omega)$.

Тепловые потоки J_{i-ej} от нагретой зоны конструкции на i -ом уровне к среде внутри конструкции на i -ом уровне, определяется выражением $J_{i-e,i}(T_i, T_{e,i}) = g_{i-e,i}(T_i, T_{e,i}) \cdot (T_i - T_{e,i})$, $g_{i-e,i}(T_i, T_{e,i})$ – тепловая проводимость конвекции (излучением пренебрегаем – см. введение к п. 1.2) между конструкцией i -го уровня и средой внутри конструкции на i -ом уровне; тепловая проводимость $g_{i-e,i}(T_i, T_{e,i})$, в свою очередь, определяются как $g_{i-e,i}(T_i, T_{e,i}) = \alpha_{i-e,i}(T_i, T_{e,i}) \cdot S_i$; S_i – площадь теплоотдающей поверхности конструкции ЭС на i -ом уровне; $\alpha_{i-e,i}(T_i, T_{e,i})$ – коэффициент теплоотдачи конвекцией (естественной или вынужденной) между поверхностью конструкции ЭС на уровне i и средой внутри нее, определяется общим выражением $\alpha_{i-e,i}^{конв}(T_i, T_{e,i}) = A_i(T_i - T_{e,i})^n$, A_i – коэффициент, зависящий от вида среды заполняющей пространство ЭС на всех уровнях; $n \in (0, 1]$ – показатель степени в законе конвективного теплообмена (коэффициенте теплоотдачи), в

условиях естественной конвекции n обычно составляет 1/4, 1/3, 1/8 [15].

Тепловые потоки $J_{j-5}(T_j(t, \omega), T_5(t, \omega))$ между конструктивным элементом j -го уровня ($j = 3, 4$) и корпусом стойки (5), обусловленные твердыми перемычками и крепежными элементами с корпусом стойки определяются как

$$J_{j-5}(T_j(t, \omega), T_5(t, \omega)) = g_{j-5} \cdot (T_j(t, \omega) - T_5(t, \omega)),$$

где g_{j-5} – тепловая кондуктивная проводимость (детерминированная) перемычек связывающих элемент конструкции j -го уровня с корпусом стойки (5 уровень).

Математическая модель тепловых процессов в принудительно охлаждаемой нагнетаемым воздухом стойки ЭС имеет вид ($k = 1, 2, \dots, K$):

$$\begin{aligned} C_{e3,k} \frac{dT_{e3,k}(t, \omega)}{dt} - J_{3k-e3,k}(T_{3k}(t, \omega), T_{e3,k}(t, \omega)) + \\ + 2cG(T_{e3,k}(t, \omega) - T_{out,k-1}(t, \omega)) = 0, \\ C_{e4} \frac{dT_{e4}(t, \omega)}{dt} - J_{4-e4}(T_4(t, \omega), T_{e4}(t, \omega)) + \\ + 2cG(T_{e4}(t, \omega) - T_{in}(t, \omega)) = 0, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} J_{3k-e3,k}(T_{3k}(t, \omega), T_{e3,k}(t, \omega)) = \\ = \alpha_{3,k} S_{3,k}(T_{3k}(t, \omega) - T_{e3,k}(t, \omega)); \\ J_{4-e4}(T_4(t, \omega), T_{e4}(t, \omega)) = \\ = \alpha_4 S_4(T_4(t, \omega) - T_{e4}(t, \omega)); \end{aligned}$$

α_4 – коэффициент теплоотдачи от суммарной поверхности всех ЭМ во всех панелях, составляющих Блок панелей, S_4 – суммарная площадь теплоотдающей поверхности всех ЭМ во всех панелях, составляющих Блок панелей; $\alpha_{3,k}$ α_4 – коэффициент теплоотдачи от суммарной поверхности всех ЭМ в среду в панели k ; $S_{3,k}$ – суммарная площадь теплоотдающей поверхности всех ЭМ в панели с номером k ; c – теплоемкость воздушной среды, Дж/кг·К; G – массовый расход воздуха, кг/с; $T_{in,k}$, $T_{out,k}$ – температуры воздушной среды на входе в панель k и выходе из панели; T_{in} – температуры воздушной среды на входе в стойку; $C_{e3,k}$ – объемная теплоемкость воздушной среды внутри k -й панели, $k = 1, 2, \dots, K$; C_{e4} – объемная теплоемкость воздушной среды внутри Блока панелей.

Уравнения обобщенной математической модели, описывающие нестационарные стохастические тепловые процессы являются нелинейными. Для исчерпывающего описания стохастических процессов необходимо, вообще

говоря, знать многомерные функции распределения случайных функций всех порядков. В то же время для инженерной практики проектирования ЭС различного назначения, необходимость в таком знании является излишней. Это обуславливается тем, что для практики теплового проектирования достаточно располагать статистическими мерами стохастических температурных полей в ЭС, а именно, – полями математических ожиданий, дисперсией, среднеквадратических отклонений и ковариацией. Тогда интервалы возможных значений температуры в различных элементах ЭС могут быть найдены как некий доверительный интервал, покрывающий с заданной вероятностью

2

истинные значения температуры. Однако определение статистических мер стохастических распределений температуры исходя из столь сложных нелинейных уравнений не представляется возможным.

Уравнения для статистических мер стохастических температур на всех иерархических уровнях, выводятся на всех иерархических уровнях согласно методу, разработанному в [1].

Публикация выполнена в рамках государственного задания по проведению фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) 0065-2019-0001

-

Generalized mathematical model for nonlinear stochastic thermal processes in complex electronic systems

A.G. Madera

Abstract. The concept of a generalized mathematical stochastic model of thermal processes in complex electronic systems at different hierarchical levels is considered. The concept allows you to simulate thermal modes in electronic systems of any complexity operating conditions during destabilizing effects.

Keywords: thermal process, hierarchical levels, thermal feedback, multifunctional software complex

Литература

1. Мадера А.Г., Кандалов П.И. Математическое моделирование интервально стохастических тепловых процессов в электронных системах при интервальной неопределенности определяющих параметров // Компьютерные исследования и моделирование. 2016. № 3. С. 501 – 520
2. Мадера А.Г., Решетников В.Н. Многофункциональный программный комплекс теплового проектирования электронных систем: требования к архитектуре и функциональным возможностям моделирования // Программные продукты и системы. 2017. №3(30). С. 367-372
3. Мадера А.Г., Кандалов П.И. Принципы построения программного комплекса для теплового проектирования электронных систем // Программные продукты и системы. 2018. Т. 31. №3. С. 435 – 438.
4. Madera A. G. Modeling thermal feedback effect on thermal processes in electronic systems // Computer Research and Modeling, 2018, vol. 10, no. 4, pp. 483–494
5. Мадера А.Г. Тепловые процессы в электронных системах в условиях влияния эффекта тепловой обратной связи // Тепловые процессы в технике. 2018. Т. 10. № 3-4. С. 144 – 151
6. Мадера А.Г. Воздействие тепловой обратной связи на температуру кристалла микросхемы // Труды НИИСИ РАН, 2018, Т.8, №2. С. 26 – 28
7. Акжолов М.Ж., Кандалов П.И., Мадера А.Г. Исследование влияния параметров теплового режима на статистические меры стохастической температуры электронного модуля // Труды НИИСИ РАН, 2018, Т.8, №5, С. 106 – 109
8. Мадера А.Г. Иерархический подход при тепловом проектировании электронных изделий // Программные продукты и системы. 2008. № 4 (84). С. 43 – 46

-
9. Мадера А.Г. Концепция математического и компьютерного моделирования тепловых процессов в электронных системах // Программные продукты и системы. 2015. №4(112). 2015. №4 (112). С. 79 – 86
 10. Мадера А.Г. Моделирование теплообмена в технических системах. – М.: Науч. фонд «Первая исслед. лаб. им. акад. В.А. Мельникова», 2005.
 11. Мадера А.Г., Кандалов П.И. Моделирование трехмерных температурных полей в электронных модулях // Программные продукты и системы. 2010. №2. С. 36.
 12. Мадера А.Г., Кандалов П.И. Матрично-топологический метод математического и компьютерного моделирования температурных полей в электронных модулях: программный комплекс STF-ElectronMod // Программные продукты и системы. 2012. №2. С. 67 – 69.

Численное исследование конвективного теплообмена и температурного поля воздушной среды при воздействии источника тепла с учетом и без учета явления теплопроводности

М.Ж. Акжолов

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва, Россия
E-mail: ak-j <ak-1@mail.ru>

Аннотация. Проведено исследование конвективного теплообмена и температурного поля в воздушной среде, обусловленных воздействием плоского источника тепла с учетом и без учета в моделировании явления теплопроводности. Показано заметное влияние теплопроводности на динамику развития температурного поля. Результаты могут быть полезны при проектировании тепловых режимов электронных систем и их электронных компонентов.

Ключевые слова: температурное поле, теплопроводность, электронная система

Процессы теплообмена между тепловыделяющими элементами (ТВЭ) и окружающей средой (воздух) подробно рассматривались в [1-9] работах.

При тепловом проектировании электронных систем (ЭС) и создании эффективных конструкций теплоотводов, устанавливаемых на тепловыделяющих элементах (ТВЭ) в ЭС, необходимо располагать адекватными методами моделирования теплообмена между ТВЭ и окружающей средой. Данный теплообмен описывается сложными физическими процессами, осуществляемыми посредством конвекции и теплопроводности [1,2,3], причем конвективный теплообмен в ЭС может протекать как в ламинарном, так и турбулентном режимах. Граница между двумя этими режимами является довольно неустойчивой, так что поначалу спокойный ламинарный поток внезапно и непредсказуемо сменяется турбулентным и обратно. Математическое моделирование конвективного теплообмена основано на уравнениях Навье-Стокса, решению которых посвящено огромное количество литературы. Между тем тепловые процессы, протекающие в ЭС, носят специфический характер, существенно усложняющий их адекватное моделирование. Так, при тепловом проектировании ЭС необходимо учитывать такие факторы, как зависимость мощностей тепловыделения ТВЭ от температуры

собственного разогрева, а температуры ТВЭ, в свою очередь, от изменившейся мощности (тепловая обратная связь); статистический интервальный характер тепловых процессов, вызванных интервальным характером определяющих параметров; неоднородность и сложность формы множества ТВЭ, входящих в конструкцию ЭС и др.; сопряженный характер теплообмена.

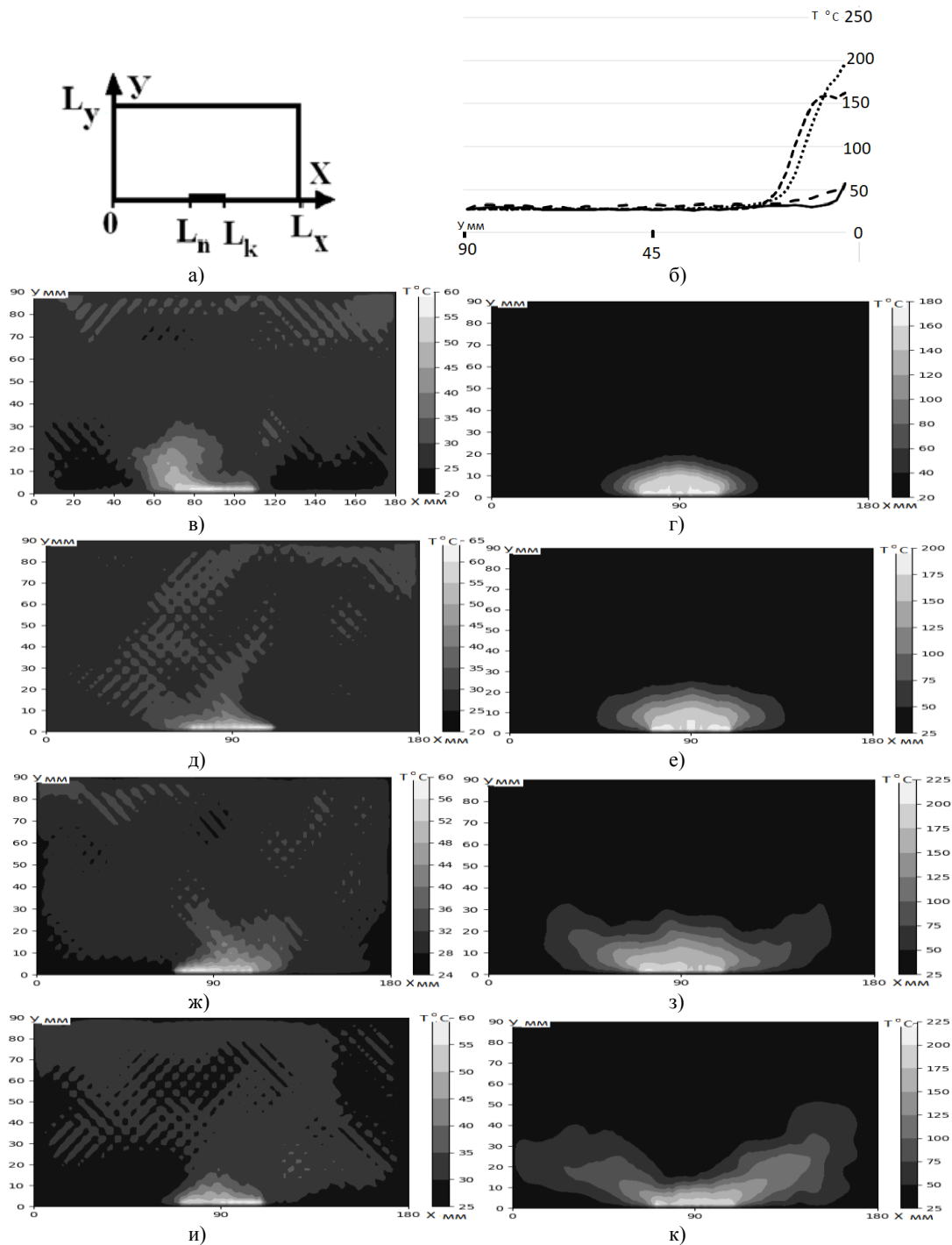
Задачи изучения процессов теплообмена между тепловыделяющими элементами (ТВЭ) и окружающей средой (воздух) с применением моделей идеального газа без учета теплопроводности и вязкости рассматривались в [10-13].

В данной работе рассматривается решение вышеприведенной задачи с учетом теплопроводности, описываемая уравнениями Эйлера:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho uv}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} + \rho g_0 &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u E)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v E)}{\partial y} + \\ + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial y} + \rho g_0 v &= \end{aligned}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right\}. \quad (1)$$

строго вдоль оси OY , γ – показатель адиабаты, p – давление λ – коэффициент теплопроводности.



Система (1) дополняется уравнением состояния:

$$p = (\gamma - 1)\rho J = (\gamma - 1)\rho[E - (u^2 + v^2)/2], \quad (2)$$

где $\vec{V} = (u, v)$ – вектор скорости, J – удельная внутренняя энергия, E – полная удельная энергия, ρ – плотность газа, g_0 – ускорение свободного падения, направленное

Численное решение уравнения газовой динамики и теплопроводности были получены с помощью метода крупных частиц [14]. Геометрия расчетной области приведена на рисунке (Рис.1,а).

Расчетная область представляет собой прямоугольник с размерами $L_x = 180$ мм, $L_y = 90$ мм. На нижней границе участка в

интервале $[L_n, L_k]$ задан источник тепла (ТВЭ) длиной 40 мм. Расчетная область разбивается сеткой размером 90x45 квадратных ячеек со сторонами $d_x = d_y = 2$ мм, шаг по времени равен $dt = 10^{-8}$ сек.

Начальные условия соответствуют сбалансированности окружающей среды и отсутствию возмущений физических параметров: $U(x,y,0) = 0.0$ м/с; $V(x,y,0) = 0.0$ м/с; $\rho(x,y,0) = \rho_0$; $\rho_0 = 1.225$ кг/м³; $E(x,y,0) = E_0$; $E_0 = T_0 * C_p$; $T_0 = 300$ К⁰; $C_p = 1004.800$ Дж/(К*кг). Таким образом граничные условия описываются следующими соотношениями при неадиабатических условиях: $U_{гр}(t) = 0.0$ м/с; $V_{гр}(t) = 0.0$ м/с; $\rho_{гр}(t) = \rho_0$; $E_{гр}(t) = E_0$, $\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{гр} = 0$. Источник тепла ТВЭ задается на

участке исследуемой области $[L_n, L_k]$ (рис.1) в виде граничных условий, когда в качестве источника тепла задается его мощность W . Граничные условия нагревания в источнике тепла задаются как [3]:

$$E(x_{zp}, y_{zp}, t) = \frac{Wt}{\rho(x_{zp}, y_{zp}, t)dxdy},$$

где ρ – плотность газа.

На рис. 1,в-к, представлены компьютерное моделирование исследуемых уравнений моделирования.

На рис. 1,б приведены распределения значения температуры по оси ОУ от центра источника до верхней стенки. Распределение температуры с учетом теплопроводности представлено сплошной линией, а без учета теплопроводности – линией с коротким пунктиром в момент времени $t = 0,20$ сек на графике (рис. 1,б). Так же на графике рассматривается момент времени $t = 1,50$ сек, линия с длинным пунктиром показывает распределение температуры с учетом теплопроводности, а точечная линия - без учета теплопроводности.

Поле температуры рассчитывалось с учетом теплопроводности (рис. 1,в,д,ж,и, и без учета теплопроводности (рис. 1,г,е,з,к) для различных моментов времени 0,2 сек (в, г), 0,5 сек (д, е), 1,0 сек (ж, з) и 1,5 сек (и, к).

Анализ полученных результатов показывает следующее. При нагреве области, занятой ТВЭ, над ним развивается конвективный процесс, который происходит за счет действия давления и гравитационных сил (максимальная скорость $\leq \sqrt{2g_0H}$, где $H = 90$ мм – высота расчетной области). Полученное изображение развития конвективных процессов в воздухе над ТВЭ достаточно хорошо отражает моделируемое физическое явление с учетом теплопроводности и без учета теплопроводности. Тепловые потоки, возникшие за счет нагревания ТВЭ с учетом эффекта теплопроводности, могут наблюдаться из полученных результатов. По результатам моделирования хорошо видно, что в один и тот же момент времени размеры и формы охватываемой тепловым возмущением области изменяется по-разному. На основе выше изложенного математического моделирования можно провести численные эксперименты для решения задачи охлаждения ТВЭ вычислительных систем и оптимизировать размеры корпусов и мощностей источников энергии.

Публикация выполнена в рамках государственного задания по проведению фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) 0065-2019-0001.

Numerical study of convective heat exchange and the temperature field of the air environment with accounting and without accounting of thermal conductivity

M.J. Akjолоv

Abstract. A study of the temperature field in the air environment, caused by the influence of a flat heat source with and without taking into account the effect of heat conduction, was carried out. The noticeable effect of heat conduction on the development of the temperature field is shown. The results may be useful in the design of thermal modes of electronic systems and electronic components.

Keywords: temperature field, thermal conductivity, electronic system

Литература

1. А.Г. Мадера. Моделирование теплообмена в технических системах. – М.: НФ им. ак. В.А. Мельникова, 2005.
2. А.Г. Мадера. Математическое моделирование свободного конвективного теплообмена в электронных системах // Труды НИИСИ РАН, Том 1 №1, 2011. С. 31 – 37.
3. А.Г. Мадера, М.Ж. Акжолов, И.Г. Лебо. Моделирование развития процессов конвекции плюс теплопроводность в воздухе вблизи процессора. // Труды НИИСИ РАН, Т. 3, №1, 2013. С. 90 – 93.
4. А.Г. Мадера Концепция математического и компьютерного моделирования тепловых процессов в электронных системах // Программные продукты и системы. 2015. № 4. С.79 – 86
5. А.Г. Мадера Моделирование интервально стохастических нестационарных и нелинейных тепловых процессов в электронных системах // Труды НИИСИ РАН. 2015. Т. 5. №1. С. 5 – 9
6. П.И. Кандалов, А.Г. Мадера Моделирование температурных полей в многослойных структурах // Программные продукты и системы. 2008. № 4. С. 11
7. А.Г. Мадера, П.И. Кандалов Моделирование трехмерных температурных полей в электронных модулях // Программные продукты и системы. 2010. №2. С. 36
8. A.G. Madera Simulation of stochastic heat conduction processes // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1994. Т. 37. № 16. С. 2571 – 2577.
9. A.G. Madera Heat transfer from an extended surface at a stochastic heat-transfer coefficient and stochastic environmental temperature // International Journal of Engineering Science. 1996. Т. 34. № 9. С. 1093 – 1099.
10. М.Ж. Акжолов. Численное моделирование конвективного теплообмена в электронной системе при различных мощностях источника тепла. // Труды НИИСИ РАН, Том 6 №1, 2016. С. 62 – 63.
11. М.Ж. Акжолов. Математическое моделирование конвективного теплообмена тепловыделяющего элемента с воздушной средой в электронной системе. // Труды НИИСИ РАН, Том 5 №2, 2015. С. 103 – 105.
12. Анализ конвективного теплообмена с воздушной средой в электронных системах методом крупных частиц. Седьмой Российской национальной конференции по теплообмену (РНКТ-7): том 1. (22—26 октября 2018 г., Москва). С. 57-61
13. М.Ж. Акжолов, П.И. Кандалов, И.Г. Лебо, А.Г. Мадера. Компьютерное моделирование конвективных процессов в воздушной среде вблизи электронных устройств. // Труды НИИСИ РАН, Т. 1, №2, 2011. С. 44 – 46.
14. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. – М.: Наука, 1982.

DRBD как средство для создания устройств хранения данных в среде ОС GNU Linux

А.Б. Бетелин¹, А.А. Прилипко², Г.А. Прилипко³, С.Г. Романюк⁴,
Д.В. Самборский⁵

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва, Россия,

E-mails: ¹ab@niisi.msk.ru, ²aaprilipko@niisi.msk.ru, ³prilipko@niisi.msk.ru, ⁴sgrom@niisi.ras.ru,
⁵samborsky_d@fastmail.com

Аннотация: Ядро операционной системы GNU Linux содержит поддержку распределенных реплицированных блочных устройств, Distributed Replicated Block Devices (DRBD) с 2009 года. В данной статье содержится обзор возможностей современных версий DRBD, а также сравниваются их функции с другими решениями задачи хранения данных в среде вычислительных кластеров высокой готовности. Дополнительно в статье предлагается модель данных, позволяющая более точно оценить риск расхождения данных после частичной потери связности кластера DRBD.

Ключевые слова: DRBD, distributed storage, high-availability cluster, RAID, Linux

Введение

В последние годы стали недорогими сетевые адаптеры стандартов 1 и 10 Gbit Ethernet, которые позволяют достичь скорости передачи данных между серверами, сравнимой со скоростями доступа к типичным HDD и SSD накопителям. Объединение нескольких серверов в кластер высокой готовности (High Availability Cluster, HA-кластер) позволяет построить систему повышенной надежности для хранения и обработки данных из недорогих стандартных серверов, то есть без закупки специализированных сетевых систем хранения (NAS, SAN) или специальных отказоустойчивых систем с аппаратной поддержкой резервирования и контроля исполнения (hardware fault-tolerant systems).

Обычно первым шагом увеличения производительности и надежности прикладных систем служит "вертикальное" масштабирование в рамках одного выделенного сервера: увеличение числа процессоров (SMP- и NUMA-параллелизм), наращивание объема ОЗУ и использование ОЗУ с коррекцией ошибок (ECC DDRAM), резервирование дисковой подсистемы с возможностью "горячей" замены дисковых накопителей (RAID-массив и hot swap/spare HDD), объединение сетевых интерфейсов (NIC teaming). Эти меры эффективны, но скорее повышают производительность, чем надежность.

По сравнению с выделенным сервером, кластер высокой готовности обладает рядом преимуществ:

- исключение или сокращение периода простоя в результате выхода из строя или временного сбоя оборудования;
- возможность замены оборудования без длительных перебоев в работе прикладных программных систем;
- горизонтальное масштабирование сервисов прикладных систем (например, объема дискового массива, количества работающих экземпляров приложений и пр.).

При правильном построении HA-кластера достигается исключение единой точки отказа (Single Point Of Fail, SPOF). В этом случае резервирование оказывается достаточным, чтобы в случае сбоя любой компоненты оборудования после короткого периода недоступности все прикладные системы кластера продолжили штатную работу, причем переконфигурирование выполняется автоматически. После такого сбоя кластер может перейти в деградированное состояние, в котором утрачена устойчивость к дополнительным отказам. В этом случае для восстановления исходного состояния комплекса требуется ремонт или замена вышедшего из строя оборудования и ручная перенастройка конфигурации кластера.

Следует отметить, что способность восстановления работы HA-кластера после потери связности (или выхода из строя) некоторых узлов не нарушает CAP-теорему

[1], утверждающую, что в распределенной вычислительной системе невозможно одновременно достичь согласованности (Consistence), доступности или готовности (Availability), и устойчивости к разделению (Partition tolerance). Система высокой готовности обеспечивает быстрое восстановление своих сервисов после сбоя, но в процессе восстановления допускается отказ в обслуживании, например, выражающийся в аварийных завершениях файловых операций, неудачных транзакциях при обращении к системе управления базами данных (СУБД), временной недоступности контента web-сервера. Если внешние пользователи сервисов кластера не готовы к возможности таких ситуаций, то следует либо предусмотреть промежуточные узлы, делегирующие или повторяющие запросы клиентов (это может быть обратный веб-прокси сервер для веб-доступа), либо рассмотреть возможность специального программного решения, например, распределенной СУБД. В последнем случае СУБД также подчиняется CAP-теореме, но нарушение связности узлов, скорее всего, выразится в задержке выполнения некоторой транзакции, а не в отказе от ее выполнения.

Технологии хранения данных в распределенных системах

Для представления систем хранения данных в распределенных вычислительных комплексах исторически используются две концепции:

- сеть хранения данных (Storage Area Network, SAN), предоставляющая блочные устройства по определенным сетевым протоколам (iSCSI, Fibre Channel);
- сетевые хранилища данных (Network Attached Storage, NAS), предоставляющие доступ к файловым системам (ФС) по компьютерной сети.

Блочные устройства могут быть использованы для хранения данных вычислительными узлами на монопольной основе, например, как дисковые образы виртуальных ОС или как тома данных для СУБД. NAS-системы обычно являются локальными, кластерными и сетевыми файловыми системами (XFS, GFS2, OCFS2, NFS, SMB/CIFS) которые экспортируют данные, размещенные на SAN-системах (или на локальных RAID-массивах). В такой

архитектуре SAN-система отвечает за резервирование и отказоустойчивость дисковой подсистемы, а NAS-серверы – за отказоустойчивость сервиса сетевых файловых систем. При этом допускается объединение SAN- и NAS-подсистем в единый вычислительный кластер, связанный производительной локальной сетью передачи данных. В случаях, когда файловая система не нужна, SAN-устройства могут непосредственно использоваться потребителями данных, располагающимися на узлах кластера (примерами служат виртуальные ОС или серверы баз данных, подключенные напрямую к iSCSI устройствам).

Отдельную нишу занимают современные масштабируемые объектные и файловые сети хранения, такие как Lustre, Ceph, и GlusterFS [11,6,7], которые позволяют горизонтальное масштабирование хранилища данных в широком диапазоне, но отличаются труднопредсказуемой производительностью, а также сложностью настройки и эксплуатации.

Обзор системы DRBD

Распределенное реплицируемое блочное устройство, или DRBD-устройство (Distributed Replicated Block Device) – это программная реализация синхронизации содержимого двух или нескольких блочных устройств на разных узлах кластера. Функции репликации данных DRBD-устройств выполняются модулем ядра Linux, тогда как настройка режимов работы и контроль состояния DRBD-дисков осуществляется набором системных утилит.

Программный код DRBD открыт и входит состав системы Linux с 2009 года. Современные версии DRBD разрабатываются компанией Linbit, которая также поставляет ряд коммерческих продуктов на базе DRBD:

- драйвер и утилиты DRBD для системы Windows;
- систему LINSTOR для автоматического управления хранением данных в инфраструктуре платформы виртуализации;
- драйверы для поддержки транспортного протокола Remote Direct Memory Access (RDMA) использующего среду InfiniBand или Ethernet [12].

Принцип работы DRBD-устройств сходен с зеркалированием RAID1-массивов данных, только в DRBD-системе устройства

расположены на разных узлах сети, и предусмотрена возможность продолжения работы и восстановления синхронности копий данных после частичной потери связи между узлами или выхода из строя некоторых узлов. Для создания DRBD-устройства на каждом узле выделяется блочное устройство, которое будет хранить реплицируемые данные (например, раздел диска `/dev/sdb1`, или LVM логический том системы). Одновременно создается блочное устройство, с именем вида `/dev/drbdX`, через которое будет предоставляться доступ к данным DRBD-диска. Это устройство будет доступно только на том узле, который в данный момент выполняет роль *первичного* (*primary* или *ведущего*) узла DRBD. Остальные узлы DRBD-кластера называются *вторичными* (*secondary* или *ведомыми*), они в нормальном режиме получают обновления от первичного узла и могут перейти в режим первичного узла в случае переконфигурации DRBD-кластера. Обычно DRBD-устройство на первичном узле используется либо для создания файловой системы (локальной или сетевой), либо как экспортируемое сетевое блочное устройство (iSCSI).

Принципиальное отличие кластера DRBD от RAID-массива заключается в том, что в DRBD роль арбитра, первичного узла, может выполнять любой вычислительный узел, тогда как RAID-массив управляется одним узлом, и в случае его отказа весь дисковый массив оказывается недоступен. Кластер DRBD теоретически может продолжать работу при отказе не только дисковых устройств, но и самих узлов, а также связывающих их сетевых соединений.

Обратной стороной этого свойства является многообразие нештатных ситуаций, возникающих при сбоях и отказах оборудования и программных компонент, образующих кластер DRBD. Используя доступную документацию системы DRBD [2,3,4,9], ее исходный код [10], реакцию сообщества пользователей и собственный опыт тестирования, можно выделить следующие преимущества и недостатки этого подхода.

Преимущества:

- высокая скорость и малая задержка при передаче данных, поддержка устройства на уровне ядра, поддержка транспортных протоколов RDMA для Ethernet/InfiniBand (с помощью платных драйверов);

- быстрая ресинхронизация с помощью сверки контрольных сумм блоков данных (оптимизация объема передачи данных, см. параметр `csums-alg`);
- относительная простота настройки (по сравнению с распределенными системами CephFS, GlusterFS).

Недостатки:

- опасность рассинхронизации данных на узлах ("split-brain") при неправильной настройке;
- единственный узел монтирования (однако, доступ к устройству DRBD может быть экспортирован средствами NFS, SMB/CIFS, или другой сетевой ФС);
- отсутствие управления алгоритмом резервирования (доступно только зеркалирование данных, аналогичное RAID1);
- недостаточно полная и правильная интеграция с системами управления кластером (см. ниже).

Отличия DRBD-9 от DRBD-8

Существуют две основных линии поддерживаемых на данный момент версий DRBD: DRBD-8 (последняя версия v.8.4.11) и DRBD-9 (последняя версия v.9.0.16). Разработка DRBD-9 началась в 2012 году, и в 2015 году состоялся выпуск первой официально поддерживаемой версии, v.9.0.0.

Таблица 1. Основные различия DRBD-8 и DRBD-9

Функция	DRBD-8	DRBD-9
Макс. число узлов	2	до 32
Поддержка auto-promote	–	+
Алгоритм кворума (quorum)	–	+
Поддержка RDMA на базе Ethernet/InfiniBand	–	+
Режим двух первичных узлов (dual primary)	+	–*

(*) поддержка режима двух первичных узлов анонсирована для v.9.1.x

Как видно из таблицы 1, DRBD-9 имеет ряд преимуществ перед DRBD-8. Смысл упомянутых в таблице функций будет объяснен ниже. Далее в статье будет рассматриваться система DRBD-9, поэтому если не указано особо, то DRBD следует

читать как текущую реализацию DRBD-9 (v.9.0.16).

Интеграция DRBD с системой управления HA-кластера

DRBD-диски могут быть настроены на автономную работу под управлением специальной системной службы Linux (Systemd сервис drbd service). В этом случае вручную назначается роль первичного узла, а затем на нем монтируется файловая система, использующая DRBD-диск. Тем не менее, при использовании DRBD-дисков в среде HA-кластера их рекомендуется передать под управление соответствующего менеджера кластера. Для этого разработчики LINBIT предоставили агент ресурса DRBD для двух систем управления HA-кластерами: коммерческого продукта Veritas Cluster Server (VCS) и открытого проекта Pacemaker [3,8,9], входящего в состав системы RedHat High Availability Add-on [13]. Далее в статье будет предполагаться использование Pacemaker, как наиболее популярного менеджера ресурсов HA-кластера в среде ОС GNU Linux. Интеграция ресурсов DRBD-дисков в составе HA-кластера координирует поведение систем DRBD и Pacemaker как в штатных (например, переезд ресурса на другой вычислительный узел), так и в нештатных (например, потеря связи с узлом) ситуациях. При этом предполагается, что у Pacemaker есть резервный канал связи между узлами, либо способ принудительного останова или изоляции узла (Shoot-The-Other-Node-In-The-Head, STONITH). Данная координация предполагает двустороннее взаимодействие: менеджер Pacemaker знает о зависимостях между ресурсами, и о том, в каком порядке они должны стартовать и выключаться, тогда как система DRBD знает о текущем состоянии дисков и сети репликации данных и должна сообщать об этом Pacemaker, чтобы предотвращать попытки выполнения неверных действий. При настройке DRBD определяются как общие правила обработки нештатных ситуаций, так и конкретные действия – скрипты обработчиков, которые могут обратиться к менеджеру Pacemaker и сообщить о проблеме.

Обзор параметров DRBD

Для создания ресурса DRBD необходимо описать, какие узлы кластера будут участвовать в нем, и для каждого узла

задать его имя, номер, IP-адрес, порт и дисковое устройство, на котором будут располагаться данные. В восьмой версии DRBD диск образуется только из двух узлов (хотя участником DRBD-ресурса может быть другой DRBD-ресурс, этот режим называется стеком, см. настройки "stacked-on-top-of" и "проху on"). Девятая версия DRBD позволяет создавать ресурс на основе большего числа узлов: допускается образовывать до 31-й связи с другими узлами.

Кроме описания состава дискового ресурса, для него нужно задать параметры репликации данных. Это может быть сделано как на глобальном уровне, сразу для всех ресурсов, так и отдельно для каждого ресурса. Наиболее важные параметры, определяющие алгоритм работы DRBD-диска (значения по умолчанию выделены жирным шрифтом):

- `protocol {A|B|C};` Протокол работы репликации, он определяет момент, когда первичный узел считает операцию записи завершённой и сообщает об этом приложению (или уровню файловой системы). Возможные варианты: А, "асинхронный" – после записи данных на локальный диск и помещения данных в очередь на отправку по репликационным соединениям; В, "полусинхронный" – после записи на локальный диск и подтверждения получения данных от вторичных узлов; С, "синхронный" – после записи на локальный диск и получения подтверждения записи данных на вторичных узлах. Очевидно, что синхронный протокол С самый надежный, он является аналогом RAID1-массива и должен быть использован в локальном HA-кластере. Протоколы А и В могут быть использованы в целях создания копии диска в географически удаленном дата-центре, когда не требуется немедленное подтверждение записи. Часто для этой цели используют стек из HA-кластера, синхронизированного по протоколу С и узла, находящегося в другом дата-центре, на который данные копируются по протоколу А. Следует особо отметить, что протокол не определяет порядок работы в случае потери связи с вторичными узлами или отказа локального диска. С его помощью только задается алгоритм подтверждения операции записи, если репликация данных возможна в текущей конфигурации кластера. За поведение в случае сбоев отвечают другие параметры (`fencing`, `quorum`, `on-io-err`). По умолчанию в случае потери связи первичный узел

продолжает работать, выполняя запись на локальный диск и помечая блоки данных, которые не удалось передать вторичным узлам в специальных битовых картах.

- `fencing {dont-care|resource-only|resource-and-stonith}`; Политика ограждения при потере связи с вторичными узлами, необходимая для избежания риска конфликта версий данных (`split-brain`). Если эта опция включена, то с помощью системы управления кластером (Pacemaker) предпринимается попытка запретить возможность делегирования роли первичного узла вторичному [9], с которым разрушен канал синхронизации. Если удастся использовать резервный канал связи, то ресурс вторичного узла переводится в состояние `Outdated`, что будет препятствовать назначению ему роли первичного узла. Данный вид ограждения называется ограждением на уровне ресурса. В противном случае, если также включен режим `STONITH`, то выполняется ограждение на уровне узла – недоступный вторичный узел изолируется или останавливается принудительно, возможно аппаратным способом (IPMI или выключением подачи питания). Ограждение на уровне узла снимается, когда связь восстанавливается. В случае нескольких вторичных узлов спектр возможных аварийных ситуаций шире, см. ниже.
- `quorum {off|majority|all|N}` (появился в версии 9); Данный параметр включает алгоритм нахождения подмножества узлов, или *кворума*, которым разрешена роль первичного узла. Если сеть узлов ресурса потеряла связность, то можно установить минимальный размер полностью связной компоненты (кворума), который будет гарантировать, что она единственна в сети ($m > n/2$, если n – размер сети и m – размер компоненты). Алгоритм кворума разрешает операции записи только в случае, когда первичный узел входит в кворум. В случае разрыва связи с одним или несколькими вторичными узлами и если первичный узел уже не входит в кворум, то он либо приостанавливает операции записи, либо немедленно сообщает об ошибке записи (если задан параметр `on-no-quorum = io-err`). Значение `quorum = majority` обозначает, что минимальный размер кворума должен быть больше половины от общего числа узлов. В качестве

значения параметра `quorum` допускается также использование явного минимального числа узлов. При подсчете узлов кворума считаются также узлы, не имеющие подключенного локального устройства (`diskless`), поэтому если нужна уверенность, что данные действительно реплицировались на несколько узлов, то следует использовать дополнительный параметр `quorum-minimum-redundancy`. Когда алгоритм кворума был анонсирован, разработчики DRBD декларировали [2], что одного его использования достаточно для исключения ситуаций `split-brain` и ограждения (`fencing`) не требуется. Тем не менее оказалось, что это не совсем верно, см. обсуждение ниже.

- `on-io-err {pass_on|detach|call-local-io-err}`; Реакция на ошибку чтения или записи на локальный диск узла. По умолчанию узел помечает вызвавшие ошибки блоки данных на диске как ошибочные и требующие обновления и продолжает работу. Если этот узел – первичный, то для ошибочных блоков он использует данные вторичного узла. Значение `detach` сообщает, что после первой замеченной ошибки узел должен весь локальный диск считать ошибочным и продолжить работу в режиме отключенного локального диска (`diskless mode`). Третье значение, `call-local-io-err`, дает возможность выполнить произвольный обработчик данной ситуации.
- `allow-two-primaries {no|yes}` (только в версии 8); Режим одновременной работы двух первичных узлов. В этом режиме DRBD-устройство может быть использовано одновременно на двух узлах. Ответственность за координирование модификаций данных лежит на пользователях устройства, для чего обычно используется кластерная файловая система с менеджером распределенных блокировок (например, GFS2 + DLM). Работа DRBD в таком режиме особенно чувствительна к потере соединения между узлами, поэтому настоятельно рекомендуется включать ограждение с гарантированной изоляцией одного из узлов в случае аварии (`STONITH`). Чтобы подчеркнуть сложность настройки этого режима и связанные с ним опасности, разработчиками был выпущен LTNBIT специальный документ [4].
- `auto-promote {yes|no}` (появился в версии 9); В данном режиме роль первичного узла

автоматически делегируется при первой попытке доступа к устройству логического DRBD-диска, если этот диск не используется другими узлами. Эту опцию лучше не включать в случае использования Pacemaker, так как случайный доступ к устройству может помешать действиям по перемещению ресурса DRBD-диска.

Помимо этого, есть семейство опций для регистрации внешних обработчиков нештатных ситуаций (кроме упомянутых обработчиков для ограждения изолированных узлов), которые могут быть использованы для протоколирования, оповещения, и, возможно, исправления ошибок работы DRBD-дисков.

Опасность конфликта версий данных (split-brain)

С точки зрения пользователя устройство хранения данных должно гарантировать, что после подтвержденной операции записи данные действительно находятся на диске и могут быть позже прочитаны. Если устройство доступно только через один интерфейс, то также должен гарантироваться порядок выполнения операций записи и чтения. Этот контракт может быть легко нарушен при неверной настройке ресурса DRBD. Например, если массив из двух дисков соединен по протоколу A и не настроено ограждение (fencing), то после отказа первичного узла его роль будет перемещена на вторичный узел, у которого состояние диска устарело. После этого пользователь устройства обнаружит, что последние подтвержденные операции записи не были выполнены. Когда связь между узлами восстановится, то система DRBD может обнаружить, что диски разных узлов подверглись различным модификациям со времени последнего общего состояния: эта ситуация называется рассинхронизацией данных или split-brain. После этого DRBD попытается "исправить" эту ситуацию, следуя некоторым заданным правилам, но будет поздно, поскольку контракт уже нарушен.

При использовании синхронного протокола вероятность split-brain ниже, но она все равно остается. Рассинхронизация происходит при обрыве связи или сбое узла, когда данные записаны только на один из локальных дисков узлов. Но важно отметить,

что в этом случае пользователь не получит подтверждения незавершенной операции записи, и какой бы вариант состояния диска он в будущем ни увидел, с формальной точки зрения контракт не нарушен. Логически данная ситуация неотличима от временного сбоя локального диска, и большинство приложений имеют средства ее обработки либо без потери данных (транзакционный сервер баз данных), либо с минимальными последствиями (журнализируемая файловая система). Этим объясняется тот факт, что часто оказывается верным следующее простое правило при разрешении split-brain: считать верной версию данных текущего первичного узла. Главное, чтобы после аварии роль первичного узла оказалась включенной только на одном узле, не важно на каком именно.

Если настроить DRBD-диск из двух узлов и включить режим ограждения, использующий скрипты сопряжения с Pacemaker, то условие после обрыва связи будет более строгим: первичный узел остается прежним, а недоступный вторичный узел помечается как Outdated или выключается (STONITH). Этим достигается запрет одновременного существования двух первичных узлов при фрагментации репликационной сети. Но при этом DRBD-диск продолжает работу без репликации, пользователи не замечают нештатной ситуации (скорость записи даже увеличивается), нет способа приостановить ввод-вывод, если нужно, чтобы запись данных обязательно дублировалась, и, наконец, нет обработчика этого события, который мог бы известить администратора о произошедшем.

Виды нештатных ситуаций на DRBD-дисках, состоящих из нескольких узлов

В случае трех и большего числа устройств, входящих в состав DRBD-диска, алгоритм кворума в сочетании с синхронным протоколом репликации могут гарантировать, что данные на дисках, входящих в кворум, всегда соответствуют представлению пользователя. Другими словами, контракт с пользователем не нарушается. Действительно, так как операция записи разрешена только для первичного узла, входящего в кворум, и запись будет считаться успешной только после подтверждения записи на всех доступных вторичных узлах, то успешная операция записи синхронна в пределах состава кворума. Если в процессе выполнения операции размер

кворума сократился, но первичный узел остался в его составе, то операция успешна и данные не потерялись. Если же первичный узел в процессе операции потерял кворум, то есть получил число подтверждений меньше, чем должен был получить от кворума минимального размера, то операция неуспешна. Кроме того, событие потери кворума первичным узлом DRBD считается аварийной ситуацией, и все последующие операции чтения-записи также останавливаются. Следовательно, первичный узел без кворума неактивен, он не может модифицировать данные. Делегирование роли первичного узла любому узлу вне кворума также запрещено.

Может показаться, что из этого также следует, что при такой настройке невозможна рассинхронизация данных. К сожалению, это не так, поскольку неуспешные операции записи могут оставить блоки данных в разных состояниях на разных узлах, и при восстановлении связи DRBD детектирует split-brain. Существует другая модель синхронности данных, которая больше подходит к описанию работы репликации данных в вышеописанном режиме. Определим бит информации как элемент, имеющий три состояния: 0, 1, и X, где X имеет смысл неопределенного значения. При этом равенство битов определено как $0=0$, $1=1$, $X=0$, $X=1$, $X=X$. Свойство транзитивности здесь не выполняется, но оно и не нужно. Далее представим операцию записи в виде двух стадий: сначала узлы записывают вместо 1 и 0 значения X (это условная операция, в реальности X могут записываться только в карты блоков), и только когда операция записи успешна, X заменяются реальными значениями 1 и 0. Если операция записи завершилась потерей кворума первичным узлом, то блоки, в которые была выполнена запись, заполнены значениями X, и они по правилам сравнения равны соответствующим блокам других узлов. В результате получается модель, согласно которой расхождение данных невозможно в этом режиме работы, поскольку блоки с незавершенной записью равны устаревшим блокам, и каждый из них соответствует состоянию данных с точки зрения пользователя (так как результат неподтвержденной операции записи может быть любым).

Доработка DRBD по этому алгоритму потребовала бы значительных

изменений кода, поскольку для этого нужна вторая стадия операции записи и дополнительный обмен сообщениями между узлами. Однако на самом деле никакой работы не требуется, потому что приведенная модель доказывает, что реальной опасности split-brain в этом режиме нет, и этого уже достаточно для корректного поведения в момент восстановления связей в кластере. Каждый раз, когда к составу кворума нужно присоединить узел, с которым была восстановлена связь, этот узел следует считать вторичным узлом с отставшим состоянием и синхронизировать его блоки обычным образом. То, что разработчики DRBD постепенно начинают понимать эту модель, косвенно подтверждает модификация кода, сделанная год назад [5,10], комментарий к которой подробно объясняет ситуацию расширения множества кворума и автоматическое решение кажущейся ситуации split-brain. Нужно учитывать, что алгоритм кворума был добавлен относительно недавно, в версии v.9.0.7, выпущенной в марте 2017 года, поэтому правильная интеграция этой функции еще может занять некоторое время.

При использовании алгоритма кворума интеграция с системой Pacemaker все же требуется даже в описанной ситуации, когда split-brain может решаться автоматически. Это необходимо, потому что Pacemaker должен знать, что роль первичного узла не может быть перенесена за пределы текущего кворума. В противном случае попытка переноса ресурса кластера, использующего DRBD-диск, приведет к неудаче. В текущей версии есть только скрипты интеграции DRBD с Pacemaker для ограждения (fencing), и они в случае трех узлов работают верно только при изоляции или аварии вторичного узла. Тогда кворум сокращается до двух узлов, один из которых первичный, работа продолжается в нормальном режиме, перенос первичного узла за пределы кворума запрещен ограничением для Pacemaker (constraint), временно включенным на период недоступности третьего узла. При восстановлении связи или починке третьего узла происходит синхронизация данных, расширение кворума и снятие ограничения. Однако в случае изоляции первичного узла он теряет кворум, все операции ввода-вывода останавливаются, а скрипты ограждения накладывают запрет на перенос роли первичного на вторичные узлы, образующие кворум. Можно сказать, что эта стратегия прямо противоположна

предпочтительному поведению в данной ситуации, поскольку ресурс DRBD-диска мог бы продолжить работу, если бы был принудительно перемещен на любой из узлов, входящих в кворум. Кроме того, текущий первичный узел в этом случае оказывается единой точкой отказа, тогда как именно исключение таких точек декларируется как одна из целей при создании кластера высокой готовности.

В связи с этим можно предложить такую исправленную конфигурацию настройки DRBD-диска на трех узлах:

- локальная файловая система – например, ext4 на дисковом ресурсе монтируется с опцией `errors=remount-ro`;
- `protocol C`;
- `quorum majority`; `quorum-minimum-redundancy 2`; `on-no-quorum io-error`;
- правила, используемые для автоматического решения ситуаций `split-brain`: `after-sb-0pri discard-older-primary`; `after-sb-1pri discard-secondary`; `after-sb-2pri disconnect`;
- обычные действия по ограждению (`fencing`) выполняются только если первичный узел входит в кворум, то есть при отключении одного из вторичных узлов. Для этого обработчики `fence-peer` и `unfence-peer` выполняют скрипты предоставленные пакетом DRBD только после проверки кворума. В противном случае `fence-peer` обработчик инициирует переезд ресурса DRBD-диска на один из других узлов, предполагая, что кворум существует. Одновременно посылается оповещение администратору кластера, поскольку даже после успешной миграции ресурса потребуется ручное вмешательство для приведения конфигурации кластера в исходное состояние.

В процессе перемещения файловая система размонтируется и теряются несохраненные данные из кэша. Объем потерь можно уменьшить, если добавить iSCSI ресурс и "плавающий" IP-адрес, которые будут представлять DRBD-диск и мигрировать вместе с ним. Потребители iSCSI ресурса могут располагаться на любом из узлов кластера, но событие

переконфигурации кластера в случае потери кворума первичным узлом DRBD все равно вызовет отдельные ошибки операций ввода-вывода. Для файловой системы ext4 это будет означать принудительный переход в режим чтения и необходимость вызова команды `"mount -o remount,gw ..."` после успешной переконфигурации кластера.

Заключение

Анализ алгоритма работы DRBD и ее ключевых характеристик выявил преимущества и недостатки этой системы, которые необходимо учитывать при разработке архитектуры системы хранения данных для кластера высокой готовности. Основной вывод, который вытекает из сделанного анализа, состоит в том, что пользователи системы DRBD не должны ожидать от этой системы готовое, простое в эксплуатации и надежное решение. Напротив, подробное описание в документации отдельных параметров DRBD и отсутствие готовых вариантов конфигураций системы с определенными гарантиями неявно предполагают, что пользователь должен хорошо понимать, как эта система устроена, и ответственно выполнять ее настройку. Если это неприемлемо, то лучше обратить внимание на другие продукты, например, на Serp и GlusterFS [6,7].

Необходимо отдельно отметить, что принцип открытости исходного кода и процесса разработки программного продукта DRBD позволил более точно оценить его характеристики, чем это было бы возможно с коммерческим продуктом сходного назначения. Так, стиль разработки программного продукта, порядок добавления функций, взаимодействие с сообществом пользователей, наличие или отсутствие автоматических тестов, все эти факторы оказываются незаменимыми при оценке характеристик программных систем такого масштаба сложности.

Публикация выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (выполнение фундаментальных научных исследований ГП 14) по теме № 0065-2019-0007 "36.20 Развитие методов математического моделирования распределенных систем и соответствующих методов вычисления." (№АААА-А19-119011590093-3).

DRBD – distributed replicated block device in GNU Linux environment

A.B. Betelin, A.A. Prilipko, G.A. Prilipko, S.G. Romanyuk, D.V. Samborskiy

Abstract: GNU Linux OS kernel contains support for Distributed Replicated Block Devices (DRBD) since year 2009. The article describes functionality of the modern DRBD versions and compares it with other data storage solutions commonly used in high availability clusters. Also the article proposes data model which could improve the detection of real split-brain situations in case of partial loss of cluster's connectivity.

Keywords: DRBD, distributed storage, high-availability cluster, RAID, Linux

Литература

1. A. Brewer. Towards robust distributed systems. InPODC 2000 Jul 16 (Vol. 7).
2. Публикация на сайте компании LINBIT HA-Solutions GmbH. Split Brain? Never Again! A New Solution for an Old Problem: DRBD Quorum, 2018. <https://www.linbit.com/en/split-brain-ibm-drbd-quorum>. Дата обращения 11.03.2019.
3. Публикация на сайте компании LINBIT HA-Solutions GmbH. DRBD 9 Now Supports Fencing In Pacemaker, 2017. <https://www.linbit.com/en/drbd-9-now-supports-fencing-pacemaker>. Дата обращения 11.03.2019.
4. Публикация на сайте компании LINBIT HA-Solutions GmbH. Dual Primary: Think Twice, Martin Loschwitz, 2010. <https://downloads.linbit.com>. Дата обращения 11.03.2019.
5. Philipp Reisner. Аннотация к модификации программного кода DRBD-9 от 2018-03-12. drbd: Automatically resolve split-brain in a specific case with quorum.
6. А. Маркелов. Основы облачного хранилища данных Ceph. «Системный администратор», Выпуск №11 (156), 2015.
7. А. Руденко. GlusterFS – новый класс хранилищ данных. «Системный администратор», Выпуск №10 (143), 2014.
8. Пакет документации компании Clusterlabs. Pacemaker 2.0 Configuration Explained. https://clusterlabs.org/pacemaker/doc/en-US/Pacemaker/2.0/html-single/Pacemaker_Explained. Дата обращения 11.03.2019.
9. Пакет документации компании LINBIT HA-Solutions GmbH. Integrating DRBD with Pacemaker clusters, <https://docs.linbit.com/docs/users-guide-9.0/#ch-pacemaker>. Дата обращения 11.03.2019.
10. Репозитории открытых исходных текстов программ компании LINBIT. <https://github.com/LINBIT>. Дата обращения 11.03.2019.
11. Сайт консорциума OpenSFS. Файловая система Lustre. <http://opensfs.org/lustre>. Дата обращения 11.03.2019.
12. М.Кузьминский. InfiniBand: аппаратные средства и поддержка в Linux. «Открытые системы. СУБД», 2008, № 07.
13. Пакет документации компании RedHat для RHEL7. High availability add-on administration.

Технологии и методы погружения оператора в трехмерную виртуальную среду

А.В. Мальцев¹, Д.В. Омельченко²

ФГУ «ФНЦ Научно-исследовательский институт системных исследований РАН»,
E-mail's: ¹avmaltcev@mail.ru, ²omelchenko_dv@mail.ru

Аннотация: В работе рассматриваются VR-технологии, методы и подходы, обеспечивающие интеграцию человека с виртуальным окружением. Основное внимание уделено задаче формирования визуального представления оператором трехмерной виртуальной среды, а также осуществлению воздействий на ее объекты с помощью реальных рук.

Ключевые слова: виртуальная среда, моделирование, стереовизуализация, стереочки, система трекинга, трехмерный объект.

Введение

В настоящее время перспективным направлением развития областей деятельности человека, использующих компьютерное моделирование, является применение технологий виртуальной реальности (VR) [1]. В частности, использование VR-технологий имеет особую актуальность при создании имитационно-тренажерных комплексов и систем виртуального окружения. Погружение оператора в трехмерную виртуальную среду позволяет достичь ряда преимуществ по сравнению с ранее применяемыми подходами.

Во-первых, отсутствует необходимость реализовывать реальную модель окружающей обстановки сложных динамических комплексов и систем, что, как правило, очень дорого, а иногда просто невозможно. Она заменяется на компьютерную виртуальную модель, создаваемую дизайнером с помощью одной из распространенных систем трехмерного моделирования, например, 3ds Max, Maya и т.п. Во-вторых, внедрение VR-технологий улучшает качество визуального восприятия оператором виртуальной среды, тем самым приближая ее к реальному прототипу. Это позволяет повысить эффективность подготовки квалифицированного персонала с использованием таких тренажерных систем.

Среди задач, возникающих при решении проблемы погружения оператора в виртуальную среду с использованием VR-подходов, можно выделить две ключевых. Первая из них заключается в формировании визуального представления оператором этой

среды с применением стереовизуализации, моделирующей бинокулярное зрение человека. Вторая – в реализации возможности воздействовать на объекты виртуального окружения естественными для человека способами, наиболее распространенным и привычным из которых является использование рук. Далее рассмотрим несколько различных методов и технологий для решения данных задач.

1. Стереовизуализация виртуального окружения

Зрение человека является бинокулярным. Мозг получает изображение окружающей среды одновременно с двух позиций, соответствующих расположению глаз, и формирует из них единое трехмерное представление пространства. Данный механизм наделяет зрение целым рядом важных свойств. Среди них восприятие объема и размера предметов, оценка расстояний до них, между ними и т.д. Для достижения сходства в визуальном восприятии оператором виртуальной и реальной сред необходимо обеспечить в первой наличие указанных свойств зрения. Это свидетельствует об актуальности и важности создания методов и подходов для реализации бинокулярного зрения в системах виртуального окружения и имитационно-тренажерных комплексах.

Моделирование бинокулярного зрения выполняется с помощью методов и технологий стереовизуализации трехмерных виртуальных сцен. Общей идеей является размещение в сцене двух виртуальных камер, одна из

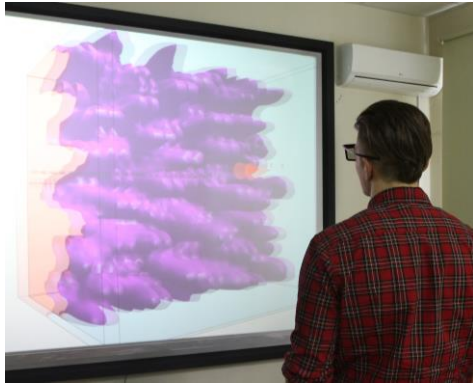


Рис. 1. Использование поляризационных очков

которых соответствует левому глазу, а другая – правому. Расстояние между точками расположения камер устанавливается равным 0.064 м, т.е. среднему значению расстояния между зрачками глаз. В очередном кадре визуализации производится рендеринг виртуальной среды для каждой из этих камер. Совокупность двух полученных изображений образует стереопару, которую необходимо подать в глаза оператору. Данную задачу можно решить различными способами, например, с помощью поляризации света, затворных стереочков, VR-шлемов и гарнитур.

Технология поляризационного стерео основана на формировании изображений для левого и правого глаз с помощью независимых проекторов, на линзы которых установлены светофильтры, превращающие выходящий поток света в плоскополяризованный. Фильтры размещаются так, чтобы плоскости поляризации световых потоков для разных глаз были перпендикулярны друг другу, например, горизонтальная и вертикальная. Проекторы светят на экран, покрытие которого хорошо отражает, не изменяя при этом поляризацию света. Для восприятия стереоизображения оператору нужны специальные поляризационные очки (рис. 1). В них также установлены светофильтры, которые имеют перпендикулярные плоскости поляризации, соответствующие (для каждого из глаз) плоскостям поляризации фильтров на проекторах. Преимуществами описанного подхода является относительно невысокая цена требуемого оборудования, хорошее качество отображения, а также возможность просмотра стерео одновременно несколькими людьми. Однако при этом существуют ограничения в поворотах головы пользователя, связанные с необходимостью совпадения плоскостей поляризации очков и отраженного от экрана света.

Подход с использованием активных стереочков затворного типа (рис. 2)



Рис. 2. Стереочки затворного типа

подразумевает поочередный вывод на экран изображений для левого и правого глаз. Линзы очков имеют независимые электронные шторки. Их открытие и закрытие управляется драйвером, установленным на синтезирующем стереопару компьютере, посредством беспроводного интерфейса передачи данных. В момент выдачи на экран изображения для левого глаза шторка левой линзы открывается, а правой – закрывается. И наоборот, когда выводится изображение для правого глаза. При этом устройство вывода должно обладать частотой вертикальной развертки не менее 120 Гц. Характерным представителем описанного подхода является технология NVIDIA 3D Vision [2].

Подход с использованием активных стереочков также применяется в комнатах виртуальной реальности CAVE [3], в которых пол, потолок и стены являются экранами. На них проецируются синтезируемые компьютером изображения трехмерной сцены. Благодаря практически бесшовной стыковке экранов, находящийся внутри комнаты пользователь видит единое виртуальное пространство, что обеспечивает высокую степень погружения в моделируемую среду. Недостатком CAVE является высокая стоимость оборудования и большой объем занимаемого пространства.

Перспективным и быстро развивающимся направлением виртуальной реальности являются VR-шлемы и гарнитуры [4] такие, как Oculus Rift, HTC Vive, PlayStation VR и т.п. В них стереопара выводится на небольшие LCD экраны, размещаемые вблизи глаз оператора. В зависимости от конструктивных особенностей, для каждого глаза может использоваться как свой отдельный экран, так и половина единого экрана. Между экраном (частью экрана) и глазом пользователя размещается специальная оптика, обеспечивающая правильное поле зрения и комфортность восприятия изображения.



Рис. 3. Гарнитура виртуальной реальности, сенсор и пульт

Вносимые такой оптикой искажения (дисторсии, хроматические aberrации и т.п.) компенсируются путем предварительной коррекции подаваемого на экран изображения. Коррекция выполняется программным обеспечением гарнитуры. Кроме функции отображения поступающий стереопары, VR-гарнитура также обеспечивает отслеживание положения и ориентации головы пользователя. Например, Oculus Rift CV1 [5] решает эти задачи, используя встроенную систему из гироскопа, акселерометра и магнитометра, а также внешнего сенсора (рис. 3). Это обеспечивает возможность синхронного изменения положения и ориентации виртуальных камер для левого и правого глаз при поворотах или движении головы оператора. В комплект CV1 также входит эргономичный пульт управления. Он может быть использован для перемещений по трехмерному виртуальному пространству и совершению каких-либо действий, например, выбору целевого объекта, пункта настроечного меню и т.д.

2. Воздействия оператора на виртуальные объекты

Важным аспектом решения задачи погружения оператора в виртуальную среду, помимо бинокулярного зрения, является

моделирование воздействий на предметы этой среды, аналогичных тем, которые возможны в реальном мире. В рамках рассматриваемой области создания систем виртуального окружения и имитационно-тренажерных комплексов наиболее существенными являются воздействия, производимые руками оператора. Но реальные руки не могут непосредственно взаимодействовать с виртуальными объектами. Поэтому решение данной задачи включает две составляющих: во-первых, создание в виртуальной среде реалистичных трехмерных моделей рук, во-вторых, реализация копирования ими движений рук пользователя в масштабе реального времени. Последнее осуществляется с применением различных технологий трекинга, каждая из которых имеет свои плюсы и минусы.

К подходам без использования нателных датчиков относятся устройства Kinect (рис. 4) и Leap motion (рис. 5). Контроллер Kinect разработан компанией Microsoft. Изначально его применение ограничивалось игровой консолью Xbox, но впоследствии расширилось в область обычных компьютеров. Kinect содержит RGB-камеру и сенсор глубины, выполненный на базе ИК-излучателя и ИК-камеры. Помимо RGB-изображения и карты глубины рабочей области, данный контроллер определяет текущее положение (в собственной системе координат устройства) ряда точек



Рис. 4. Устройство Kinect



Рис. 5. Контроллер Leap motion



Рис. 6. Контроллер Oculus Touch

скелета оператора. На основе этих данных с помощью специальных методов и алгоритмов вычисляются углы в сочленениях конечностей пользователя, находящегося в рабочей области, а также координаты и ориентации кистей его рук (задача данного типа рассмотрена в работе [6]). Задав матрицу перехода из системы координат Kinect в систему координат виртуальной среды, можно определить необходимые параметры и положения виртуальных рук. К сожалению, полный скелет кистей и пальцев контроллер не отслеживает, однако существуют решения по его определению на основе анализа изображений, поступающих с Kinect [7].

Контроллер Leap motion – это небольшое устройство, подключаемое к компьютеру посредством USB интерфейса и размещаемое на рабочем столе пользователя. Оно позволяет отслеживать положения и ориентации рук и пальцев. Однако рабочая область, которая располагается над устройством, является довольно ограниченной. В работе [8] проводится исследование точности и надежности работы контроллера на основе данной технологии. В целом же точность контроллеров без специальных нательных датчиков пока еще остается довольно низкой.

Иным подходом к трекингу рук оператора является использование устройств с датчиками таких, как контроллеры Oculus Touch (рис. 6) и перчатки виртуальной реальности. Устройства Touch обладают эргономичной формой и удобно лежат в руках. Благодаря наличию встроенного акселерометра и ИК-датчика они обеспечивают довольно высокую точность



Рис. 7. Перчатка Manus VR

определения положений и ориентаций кистей рук оператора. Устройства работают в паре с сенсором, аналогичным тому, что входит в комплект гарнитуры Oculus Rift CV1. Преимуществами Touch являются возможность контролировать сжатие большого и указательного пальцев, состояние ладони (сжата или расслаблена), а также наличие обратной тактильной связи, реализуемой посредством встроенного вибромотора. Последняя позволяет не только воздействовать на объекты, но и ощущать эти воздействия рукой.

Обратная тактильная связь также поддерживается современными VR-перчатками [9]. Но в отличие от других рассмотренных технологий, данные устройства обеспечивают контроль сгиба всех пальцев рук. К таким решениям относятся, например, перчатки Manus VR (рис. 7, [10]). Они позволяют реализовать девять степеней свободы для виртуальной руки. Движение каждого из пальцев оператора отслеживается с помощью двух датчиков изгиба. Для большого пальца также определяется угол его поворота. Ориентация кисти вычисляется на основе данных, получаемых от гироскопа, акселерометра и магнитометра. Недостатком VR-перчаток является значительная цена.

Заключение

В данной работе исследованы различные технологии, методы и подходы для погружения человека в синтезируемую с помощью компьютера трехмерную виртуальную среду. Проведенный анализ показывает, что наиболее эффективным решением упомянутой задачи является использование связки из VR-гарнитуры и VR-перчаток. Однако ввиду существенной цены последних, трекинг рук целесообразно выполнять с помощью таких контроллеров, как Oculus Touch.

Публикация выполнена в рамках государственного задания по проведению фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) «34.9. Системы

виртуального окружения: технологии, методы и алгоритмы математического моделирования и визуализации». (0065-2019-0012).

Technologies and methods for the operator immersion in a three-dimensional virtual environment

A.V. Maltsev, D.V. Omelchenko

Abstract: The paper proposes VR-technologies, methods and approaches that ensure a human integration with virtual environment. The main attention is paid to the task of creating visual representation by the operator of a 3D virtual environment, as well as the implementation of impacts on its objects by means of real hands.

Keywords: virtual environment, simulation, stereo visualization, stereo glasses, tracking system, three-dimensional object.

Литература

1. Boletsis C. The New Era of Virtual Reality Locomotion: A Systematic Literature Review of Techniques and a Proposed Typology // *Multimodal Technologies and Interaction*, 2017, 1, 24.
2. NVIDIA 3D Vision // URL: <https://www.nvidia.ru/object/3d-vision-technology-ru.html> (дата обращения: 20.03.2019).
3. VR Cave: Комната виртуальной реальности // URL: <https://vr-j.ru/stati-i-obzory/vr-cave-komnata-virtualnoj-realnosti/> (дата обращения: 20.03.2019).
4. The top VR Headset - Oculus Rift, HTC Vive, PlayStation VR comparison, and more // URL: <https://www.gameskinny.com/8ka4n/the-top-vr-headset-oculus-rift-htc-vive-playstation-vr-comparison-and-more> (дата обращения: 20.03.2019).
5. Oculus Rift // https://ru.wikipedia.org/wiki/Oculus_Rift (дата обращения: 20.03.2019).
6. Мальцев А.В., Михайлюк М.В. Реализация эргономичного интерфейса управления виртуальной моделью антропоморфного робота с использованием Kinect // *Программная инженерия*. – 2015. – № 10. – с. 12-18.
7. Tang M. Recognizing Hand Gestures with Microsoft's Kinect // *Stanford University*. – 2011.
8. Weichert F., Bachmann D., Rudak B., Fisseler D. Analysis of the Accuracy and Robustness of the Leap Motion Controller // *Sensors*. – 2013. – vol. 13. – p. 63-80.
9. Perret J., Vander Poorten E. Touching Virtual Reality: A Review of Haptic Gloves // *Proceedings of 16th International Conference on New Actuators*. – 2018. – p. 270-274.
10. Manus VR: World's leading VR Gloves for training // URL: <https://manus-vr.com> (дата обращения: 20.03.2019).

Алгоритм расщепления трёхслойных полудискретных схем для эволюционного уравнения и оценка погрешности приближённого решения

Д.В. Гулуа^{*}, Е.В. Гулуа^{**}

^{*}профессор Груз. Тех. Университета, кандидат физико-математических наук
^{**}докторант информатики Груз. Тех. Университета

Аннотация: В работе, с помощью алгоритма возмущений, чисто неявная трёхслойная полудискретная схема для абстрактного эволюционного уравнения сводится к двухслойным схемам. С помощью решений этих двухслойных схем, строятся приближённые решения исходной задачи. Получены оценки для погрешности приближённого решения. Приведены результаты численных экспериментов модельных задач

Ключевые слова: эволюционная задача, многослойные полудискретные схемы, алгоритм возмущений, оценка погрешности, результаты численных экспериментов.

Введение

Начально-краевые задачи для эволюционных уравнений с частными производными могут быть сведены к задаче Коши для абстрактного параболического уравнения. Одним из методов решения этих задач является метод полудискретизации (так называют метод, основанный на дискретизации производной по временной переменной). Метод полудискретизации для параболического уравнения известен также как метод Рунге [1]. Метод полудискретизации обладает тем преимуществом, что получаемую при этом систему можно решить, например, методом конечных разностей, осуществляя последующую дискретизацию производных по пространственным переменным, или применить другие методы (в том числе аналитические), которые легко реализуемы. Среди таких методов отметим: проекционно-сеточные, вариационные и метод конечных элементов (см., например, Г. И. Марчук, В. И. Агошков [2], С. Г. Михлин [3], Г. Стренг, Дж. Фикс [4]).

Вопросы связанные с построением и исследованием методов приближённого решения эволюционных задач, рассматриваются, например, в широко известных книгах С. К. Годунова и В. С.

Рябенского [5], Г. И. Марчука [6], А. А. Самарского [7], Н. Н. Яненко [8].

Важным являются вопросы связанные с построением и исследованием алгоритмов приближённого решения эволюционных задач, в том числе реализация и исследование многослойных схем для решения этих задач. Основная трудность, которая возникает при реализации многослойных схем (особенно для многомерных задач), состоит в необходимости использовании большой оперативной памяти, которая возрастает пропорционально вместе с ростом числа слоев. Одним из возможностей преодоления этой проблемы является расщепление многослойных схем. В работе [9] описан алгоритм возмущений для расщепления трёхслойных схем. Алгоритм возмущений широко применяется для решения задач математической физики (см., например, Г. И. Марчук, В. И. Агошков, В. П. Шутяев [10]).

Отметим работы [11], [12], [13] где чисто неявная трёхслойная схема для эволюционного уравнения в банаховом пространстве сводится к двум двухслойным схемам и доказывается явная оценка для погрешности приближённого решения при достаточно общих предположениях относительно данных задачи.

В представленной работе, в гильбертовом пространстве, для приближённого решения задачи Коши для эволюционного уравнения с самоспряжённым положительно

определённым оператором, рассматривается чисто неявная трехслойная полудискретная схема. На основе алгоритма возмущений, рассматриваемая схема сводится к двум двухслойным схемам. С помощью решений этих схем, строится приближённое решение исходной задачи. Следует отметить, что первая двухслойная схема даёт приближённое решение с точностью первого порядка, а решение второй двухслойной схемы уточняет предыдущее решение на порядок.

В работе, для оценки погрешности приближённого решения, применяется подход предложенный в [14], где исследование устойчивости линейных многошаговых методов основано на свойствах класса полиномов от многих переменных (т.н. ассоциированные полиномы). Эти полиномы являются естественным обобщением классических полиномов Чебышева второго рода. В работе приведены результаты численных экспериментов, которые наглядно подтверждают полученные теоретические оценки.

Следует подчеркнуть, что алгоритм возмущений, применительно к разностным схемам для дифференциальных уравнений, был рассмотрен в работе [9]. Отметим, что предложенный алгоритм близок к методам рассмотренным в работах Г. И. Марчука и В. В. Шайдурова [15] и В. Перейра [16, 17]. Представленная работа является обобщением результатов полученных в работе [9].

1. Сведение чисто неявной трёхслойной схемы для эволюционной задачи к двухслойным схемам

В гильбертовом пространстве H рассмотрим следующую эволюционную задачу

$$\frac{du(t)}{dt} + Au(t) = f(t), \quad t \in]0, T], \quad (1)$$

$$u(0) = u_0, \quad (2)$$

где A – самосопряжённый положительно определённый оператор в H с областью определения $D(A)$; $f(t)$ – непрерывно дифференцируемая функция со значениями из H ; u_0 – заданный вектор из H ; $u(t)$ – искомая функция.

Введём на $[0, T]$ сетку $t_k = k\tau$, $k = 0, 1, \dots, n$, с шагом $\tau = T/n$. Воспользуемся аппроксимацией первой производной

$$\left. \frac{du}{dt} \right|_{t=t_k} = \frac{\frac{3}{2}u(t_k) - 2u(t_{k-1}) + \frac{1}{2}u(t_{k-2})}{\tau} + \tau^2 R_k(\tau, u), \quad R_k(\tau, u) \in H.$$

В результате, уравнение (1) в точке $t = t_k$ можно представить в следующем виде

$$\frac{\frac{3}{2}u(t_k) - 2u(t_{k-1}) + \frac{1}{2}u(t_{k-2})}{\tau} + Au(t_k) = f(t_k) - \tau^2 R_k(\tau, u), \quad k = 2, \dots, n, \quad (3)$$

Запишем систему (3) в виде

$$\frac{u(t_k) - u(t_{k-1})}{\tau} + Au(t_k) + \frac{\tau}{2} \left(\frac{u(t_k) - 2u(t_{k-1}) + u(t_{k-2}))}{\tau^2} \right) = f(t_k) - \tau^2 R_k(\tau, u)$$

Очевидно, что выражение в скобках при $\frac{\tau}{2}$ есть $u''(t_{k-1}) + \tau^2 R_{1,k-1}$, $R_{1,k} \in H$.

По аналогии с полученной системой, рассмотрим, в гильбертовом пространстве H , однопараметрическое семейство уравнений

$$\frac{u_k - u_{k-1}}{\tau} + Au_k + \frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{u_k - 2u_{k-1} + u_{k-2}}{\tau^2} \right) = f_k + \varepsilon^2 R_k, \quad R_k \in H, \quad (4)$$

где $f_k = f(t_k)$.

Допустим, что u_k аналитично по ε ,

$$u_k = \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j u_k^{(j)}. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (4) и приравнивая члены при одинаковых степенях ε , получим следующую систему уравнений:

$$\frac{u_k^{(0)} - u_{k-1}^{(0)}}{\tau} + Au_k^{(0)} = f_k, \quad u_k^{(0)} = u_0, \quad k = 1, \dots, n, \quad (6)$$

$$\frac{u_k^{(1)} - u_{k-1}^{(1)}}{\tau} + Au_k^{(1)} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta^2 u_{k-2}^{(0)}}{\tau^2}, \quad k = 2, \dots, n, \quad (7)$$

$$\frac{u_k^{(2)} - u_{k-1}^{(2)}}{\tau} + Au_k^{(2)} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta^2 u_{k-2}^{(1)}}{\tau^2} + R_k, \dots$$

где $\Delta u_{k-1} = u_k - u_{k-1}$.

Введём следующее обозначение

$$v_k = u_k^{(0)} + \tau u_k^{(1)}, \quad k = 2, \dots, n. \quad (8)$$

Объясним вектор v_k приближённым значением точного решения задачи (1), (2) при $t = t_k$, $u(t_k) \approx v_k$.

Заметим, что в схеме (7) стартовый вектор $u_1^{(1)}$ определяем из равенства $v_1 = u_1^{(0)} + \tau u_1^{(1)}$, где $u_1^{(0)}$ находим по схеме (6), а v_1 – приближённое значение $u(t_1)$ с точностью $O(\tau^2)$. Согласно нашему предположению имеем

$$\|v_1 - u(t_1)\| = O(\tau^2).$$

Тогда, учитывая что для решения задачи (1), (2) справедлива формула (см. напр. Т.Като [18])

$$u(t) = \exp(-tA)u_0 + \int_0^t \exp(-(t-s)A)f(s) ds, \quad (9)$$

за вектор v_1 можно принять:

$$v_1 = (I - \tau A)u_0 + \tau f_1. \quad (10)$$

Из представления $v_1 = u_1^{(0)} + \tau u_1^{(1)}$, с учётом формулы (10) и равенства $u_1^{(0)} = Su_0 + \tau S f_1$, где $S = (I + \tau A)^{-1}$, за стартовый вектор $u_1^{(1)}$ схемы (7) можем принять

$$u_1^{(1)} = \frac{v_1 - u_1^{(0)}}{\tau} = \frac{1}{\tau} [(I - S) - \tau A]u_0 + \tau(I - S)f_1 = -\tau AS(Au_0 + f_1). \quad (11)$$

2. Оценка невязки и априорная оценка для погрешности приближённого решения

Оценим невязку чисто неявной трёхслойной схемы на решениях схемы (6)-(8).

Умножим уравнения (7) на τ и результат сложим с (6). Получим, что v_k есть решение системы уравнений:

$$\frac{v_k - v_{k-1}}{\tau} + Av_k = f_k - \frac{\tau}{2} \frac{\Delta^2 u_{k-2}^{(0)}}{\tau^2}, \quad k = 2, \dots, n. \quad (12)$$

Перепишем эту систему в виде

$$\frac{v_k - v_{k-1}}{\tau} + Av_k + \frac{\tau}{2} \frac{\Delta^2 v_{k-2}}{\tau^2} = f_k + R_k(\tau), \quad (13)$$

где $k \geq 3$,

$$R_k(\tau) = \frac{\tau}{2} \frac{\Delta^2 v_{k-2}}{\tau^2} - \frac{\tau}{2} \frac{\Delta^2 u_{k-2}^{(0)}}{\tau^2}.$$

Очевидно, что (13) можно представить в следующем виде:

$$\frac{3}{2}v_k - 2v_{k-1} + \frac{1}{2}v_{k-2} + Av_k = f_k + R_k(\tau), \quad k = 3, \dots, n. \quad (14)$$

Следовательно $R_k(\tau)$ невязка чисто неявной трёхслойной схемы на решениях схемы (6)-(8) (см. (3)).

Очевидно представление

$$R_k(\tau) = \frac{\tau}{2} \frac{\Delta^2 v_{k-2}}{\tau^2} - \frac{\tau}{2} \frac{\Delta^2 u_{k-2}^{(0)}}{\tau^2} = \frac{\tau^2}{2} \frac{\Delta^2 u_{k-2}^{(1)}}{\tau^2}. \quad (15)$$

Заметим, что представление (15) верно при $k > 2$.

Оценим разностное отношение (15).

Из (6) имеем

$$u_k^{(0)} = Su_{k-1}^{(0)} + \tau S f_k, \quad k = 1, \dots, n. \quad (16)$$

Из рекуррентного соотношения (16) следует, что

$$u_k^{(0)} = S^k u_0 + \tau(S^k f_1 + S^{k-1} f_2 + \dots + S f_k).$$

В силу этого равенства имеем

$$\Delta^2 u_{k-2}^{(0)} = u_k^{(0)} - 2u_{k-1}^{(0)} + u_{k-2}^{(0)} = (S^k - 2S^{k-1} + S^{k-2})u_0 + \tau[(S^k - 2S^{k-1} + S^{k-2})f_1 + (S^{k-1} - 2S^{k-2} + S^{k-3})f_2 + \dots + (S^3 - 2S^2 + S)f_{k-2} + (S^2 - 2S)f_{k-1} + S f_k] \quad (17)$$

Так как

$$S^k - 2S^{k-1} + S^{k-2} = (I - 2S^{-1} + S^{-2})S^k = \tau^2 A^2 S^k,$$

то (17) примет следующий вид

$$\Delta^2 u_{k-2}^{(0)} = \tau^2 A^2 S^k u_0 + \tau^3 A^2 (S^k f_1 + S^{k-1} f_2 + \dots + S^3 f_{k-2}) + \tau S(S - 2I)f_{k-1} + \tau S f_k. \quad (18)$$

Учитывая (18), из (7) получаем:

$$u_k^{(1)} = Su_{k-1}^{(1)} + \tau S g_k, \quad (19)$$

где

$$g_k = -\frac{1}{2} A^2 S^k u_0 - \frac{\tau}{2} A^2 (S^k f_1 + S^{k-1} f_2 + \dots + S^3 f_{k-2}) - \frac{1}{2\tau} S(S - 2I)f_{k-1} - \frac{1}{2\tau} S f_k. \quad (20)$$

Из (19) имеем

$$u_k^{(1)} = S^{k-1} u_1^{(1)} + \tau (S^{k-1} g_2 + S^{k-2} g_3 + \dots + S g_k). \quad (21)$$

Отсюда следует:

$$\Delta^2 u_{k-2}^{(1)} = u_k^{(1)} - 2u_{k-1}^{(1)} + u_{k-2}^{(1)} = \tau^2 A^2 S^{k-1} u_1^{(1)} + \tau^3 A^2 (S^{k-1} g_2 + S^{k-2} g_3 + \dots + S^3 g_{k-2}) + \tau S(S - 2I)g_{k-1} + \tau S g_k. \quad (22)$$

Учитывая (20), для суммы $S^{k-1} g_2 + S^{k-2} g_3 + \dots + S^3 g_{k-2}$ получаем представление

$$S^{k-1} g_2 + S^{k-2} g_3 + \dots + S^3 g_{k-2} =$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2}(k-3)A^2S^{k+1}u_0 - \\
& -\frac{\tau}{2}A^2((k-4)S^{k+1}f_1+(k-5)S^k f_2+\dots+S^6 f_{k-4})- \\
& -\frac{1}{2\tau}(S-2I)(S^k f_1+S^{k-1} f_2+\dots+S^4 f_{k-3})- \\
& -\frac{1}{2\tau}(S^k f_2+S^{k-1} f_3+\dots+S^4 f_{k-2})- \\
& -\frac{\tau}{2}A^2S^3 f_0
\end{aligned} \quad (23)$$

Рассмотрим сумму

$$(S-2I)(S^k f_1+S^{k-1} f_2+\dots+S^4 f_{k-3}) + (S^k f_2+S^{k-1} f_3+\dots+S^4 f_{k-2})$$

Имеем

$$\begin{aligned}
& (S-2I)(S^k f_1+S^{k-1} f_2+\dots+S^4 f_{k-3})+ \\
& (S^k f_2+\dots+S^4 f_{k-2})= \\
& = (S-I)(S^k f_1+S^{k-1} f_2+\dots+S^4 f_{k-3})+ \\
& + (S^k f_2+S^{k-1} f_3+\dots+S^4 f_{k-2})- \\
& - (S^k f_1+S^{k-1} f_2+\dots+S^4 f_{k-3})= \\
& = -\tau AS(S^k f_1+S^{k-1} f_2+\dots+S^4 f_{k-3})- \\
& -\tau A(S^k f_2+\dots+S^4 f_{k-2})-S^k f_1+S^4 f_{k-2}. \quad (24)
\end{aligned}$$

Далее для суммы $(S-2I)g_{k-1}+g_k$ имеем.

$$(S-2I)g_{k-1}+g_k = -\tau ASg_{k-1}+(g_k-g_{k-1})+g_k \quad (25)$$

Из (20) получим

$$\begin{aligned}
& g_k-g_{k-1} = \frac{\tau}{2}A^3S^k u_0 + \\
& \frac{\tau^2}{2}A^3(S^k f_1+S^{k-1} f_2+\dots+S^4 f_{k-3})-\frac{\tau}{2}A^2S^3 f_{k-2}- \\
& \frac{1}{2\tau}(-\tau AS^2(f_{k-1}-f_{k-2})+S(f_k-2f_{k-1}+f_{k-2})) \quad (26)
\end{aligned}$$

Тогда, из (22), учитывая (23), (24), (25), (26) и что $u_1^{(1)}$ равномерно ограничен по τ (см.(11)), для достаточно гладких начальных данных, получаем оценку

$$\left\| \frac{\Delta^2 u_{k-2}^{(1)}}{\tau^2} \right\| \leq c, \quad c = \text{const} > 0. \quad (27)$$

Следовательно, учитывая (27), из (15) для невязки $R_k(\tau)$, имеем оценку

$$\|R_k(\tau)\| \leq c\tau^2, \quad c = \text{const} > 0. \quad (28)$$

Из (3) и (14), для погрешности $z_k = u(t_k) - v_k$ имеем:

$$\frac{3}{2}z_k - 2z_{k-1} + \frac{1}{2}z_{k-2} + Az_k = r_k(\tau), \quad k=3, \dots, n, \quad (29)$$

где

$$r_k(\tau) = -(\tau^2 R_k(\tau, u) + R_k(\tau)).$$

Замечание 1 Учитывая (28) заключаем, что если решение задачи (1)–(2) достаточно гладкая функция, то

$$\|r_k(\tau)\| = O(\tau^2).$$

Имеет место следующая теорема (см.(17)).

Теорема 1. Пусть A самосопряжённый положительно определённый оператор в H . Тогда справедлива оценка

$$\|z_{k+1}\| \leq \frac{1}{2}\|z_1\| + \frac{3}{2}\|z_2\| + \tau \sum_{i=2}^k \|r_{i+1}(\tau)\|, \quad (30)$$

где $k=2, \dots, n-1$.

Заметим, что поскольку представление (15) верно только при $k > 2$, доказательство оценки (30) не распространяется для случая $k=1$, т.е. для вектора v_2 . Поэтому необходимо отдельно оценить погрешности $u(t_2) - v_2$.

Из (12) следует

$$v_2 = Sv_1 + \tau S\varphi_1^{(3)}, \quad (32)$$

где $\varphi_1^{(3)} = f_2 - \frac{\tau}{2} \frac{\Delta^2 u_0^{(0)}}{\tau^2}$.

Подставляя (10) и (18) в (32) и учитывая разложение $S = I - \tau A + \tau^2 A^2 S$, получим

$$\begin{aligned}
& v_2 = S((I - \tau A)u_0 + \tau f_1) + \\
& \tau S(f_2 - \frac{\tau}{2} A^2 S^2 u_0 - \frac{1}{2} S(S-2I)f_1 - \frac{1}{2} S f_2) \\
& = (I - 2\tau A)u_0 + \tau S(f_1 + f_2) + r_1(\tau)u_0, \quad \|r_1(\tau)u_0\| = O(\tau^2).
\end{aligned}$$

Очевидно, что отсюда следует

$$v_2 = (I - 2\tau A)u_0 + 2\tau f_2 + r_2(\tau)u_0, \quad \|r_2(\tau)u_0\| = O(\tau^2).$$

Следовательно для погрешности $u(t_2) - v_2$ имеем

$$\begin{aligned}
& \|u(t_2) - v_2\| = \|\exp(-2\tau A)u_0 + \\
& \int_0^{2\tau} \exp(-(2\tau - s)A)f(s) ds - v_2\| = O(\tau^2).
\end{aligned} \quad (33)$$

Замечание 3. С учётом (10), (35) и замечания 1 из неравенства (30), следует

$$\|u(t_k) - v_k\| = O(\tau^2), \quad k=1, \dots, n.$$

Очевидно, при этом подразумеваем, что решение задачи (1), (2) достаточно гладкая функция.

3. Результаты и анализ численных экспериментов

В этом пункте приведём результаты численных экспериментов по решению некоторых "модельных" задач.

Рассмотрим следующую задачу:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + f(x,t), \quad (x,t) \in]a,b[\times]0,$$

$$u(x,0) = \varphi(x),$$

$$u(a,t) = \alpha_0(t), \quad u(b,t) = \alpha_1(t).$$

Приближённое решение $v_{i,k}$ этой задачи будем искать алгоритмом (6)–(8). Ниже приведены значения погрешности

$$\Delta = \max_{i,k} |u(x_i, t_k) - v_{i,k}|$$

для некоторых тестовых решений $u(x,t)$ (s - порядок учитываемой поправки, n - число шагов по x , m - число шагов по t). В рассмотренных ниже тестовых задачах примем: $a = 0$, $b = 1$, $T = 1$.

Задача 1: $u(x,t) = x^2 t^3 (1-x)$

В результате реализации алгоритма возмущений, получаем соответствующие погрешности:

$$s = 0: \Delta_u = 0,0034$$

$$s = 1: \Delta_u = 0,00026.$$

Соответствующие графики функции для точного

($u(x_i, t_k)$) и приближённого ($v_{i,k}$) решения задачи приведены на (Рис.1.1 и Рис.1.2).

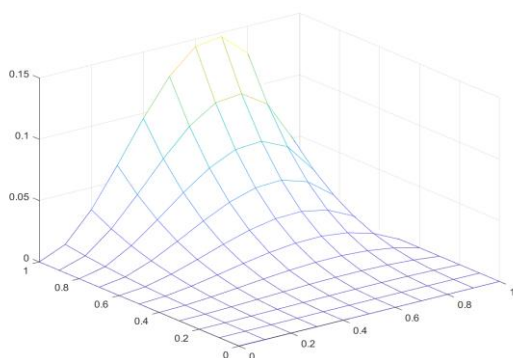


Рис.1.1. График точного решения

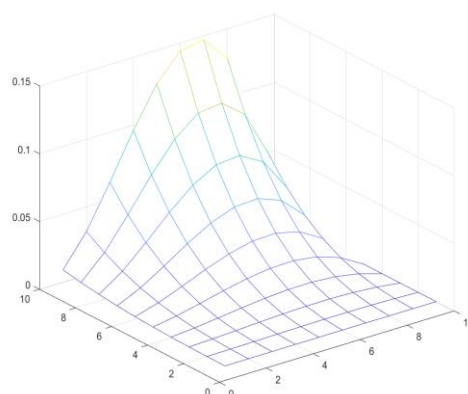


Рис.1.2. График приближённого решения

Заметим, что на приведённых графиках, значения для точного решения даны для $k = 0, \dots, 10$, $i = 0, \dots, 10$, в то время, как значения для приближённого решения даны для $k = 1, \dots, 10$, $i = 1, \dots, 10$.

Задача 2: $u(x,t) = x^2 \exp(t)$

$$s = 0: \Delta_u = 0,0047$$

$$s = 1: \Delta_u = 0,00029.$$

Соответствующие графики имеют вид:

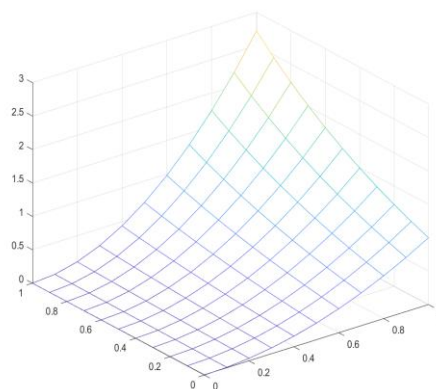


Рис.2.1. График точного решения

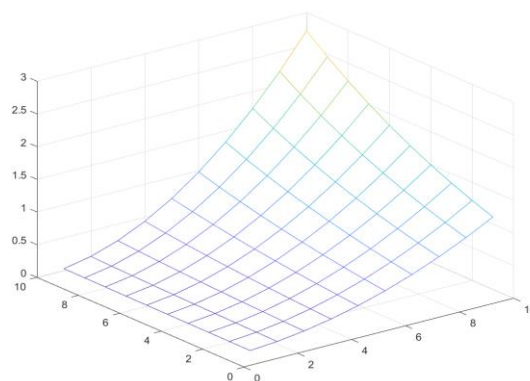


Рис.2.2. График приближённого решения

Задача 3: $u(x, t) = \exp(x) \sin(\pi t)$

$$s = 0: \Delta_u = 0,0943$$

$$s = 1: \Delta_u = 0,0135.$$

Соответствующие графики имеют вид:

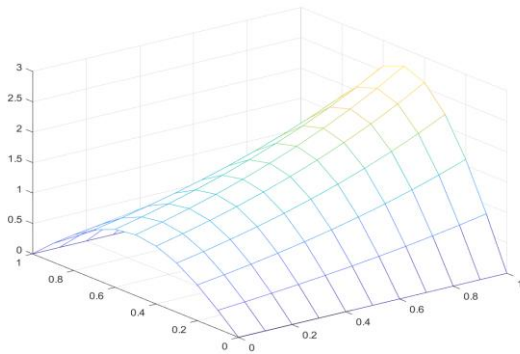


Рис.3.1. График точного решения

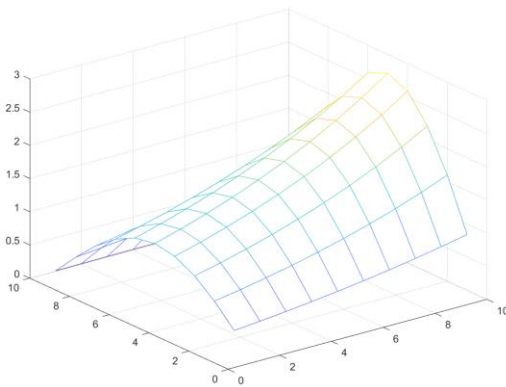


Рис.3.2. График приближённого решения

Как и следовало ожидать, численные эксперименты показали, что второй шаг поправки ($s = 1$) уменьшает погрешность на порядок, т.е. $\|u(t_k) - (u_k^{(0)} + \tau u_k^{(1)})\| = O(\tau^2)$, в то время как $\|u(t_k) - u_k^{(0)}\| = O(\tau)$.

Численные эксперименты также показали, что последующая поправка $u_k^{(2)}$ (см.(6)–(8)) практически не уменьшает погрешность приближённого решения. Причина заключается в том, что в уравнении,

для отыскания $u_k^{(2)}$, входит неизвестная величина R_k , отыскание которой равносильно определению решения исходной задачи. Это обстоятельство является причиной того, что алгоритм ограничивается двумя уравнениями (6)–(7).

Наконец рассмотрим ещё две задачи.

Задача 4: $u(x, t) = \sin \pi(x-1)$

$$s = 0: \Delta_u = 0,0083$$

$$s = 1: \Delta_u = 0,0083.$$

Задача 5: $u(x, t) = \sin \pi(t-1)$

$$s = 0: \Delta_u = 0,0561$$

$$s = 1: \Delta_u = 0,0079.$$

При реализации алгоритма для задачи 4, фактически никакой поправки (уменьшения) погрешности не происходит. Этот странный на первый взгляд результат легко объясним, если обратить внимание, что искомая функция не зависит от временной переменной. По предлагаемому же алгоритму поправка достигается именно по временной переменной (см. Задача 5).

Заметим, что по алгоритму (6)–(8) осуществляется дискретизация исходной непрерывной задачи по временной переменной. Что же касается пространственных переменных (оператора задачи), то имеется в виду, что оно рассчитывается точно (вернее с такой точностью, которая не меньше точности, достигаемой алгоритмом по временной переменной).

The algorithm of splitting of the three-layer semi-discrete schemes for the evolutionary equation and estimation of the approximate solution error

D.V. Gulua, E.V. Gulua

Abstract: In the present paper we consider purely implicit three-layer semi-discrete scheme. Using the perturbation algorithm, the considered scheme is reduced to two-layer schemes. An approximate solution of the original problem is constructed by means of the solutions of these schemes. In the work are presented the results of numerical experiments.

Keywords: evolution equation, multilevel semi-discrete schemes, perturbation algorithm, error estimation, results of the numerical experiments.

Литература

1. E. Rothe. Über die Wärmeleitungsgleichung mit nichtkonstanten Koeffizienten im räumlichen Falle // Math. Ann. 104, No. 1, 1931, pp.340–354.
2. Г.И. Марчук, В.И. Агошков. Введение в проекционно-сеточные методы. –М.: Наука, 1981
3. С.Г. Михлин. Численная реализация вариационных методов. –М.: Наука, 1966
4. Г. Стренг, Дж. Фикс. Теория метода конечных элементов. –М.: Мир, 1977
5. С. К. Годунов, В. С. Рябенкий. Разностные схемы. . –М.: Наука, 1973
6. Г.И. Марчук. Методы вычислительной математики. –М.: Наука, 1977
7. А.А. Самарский. Теория разностных схем. –М.: Наука, 1977
8. Н.Н. Яненко. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967
9. В.И. Агошков, Д.В. Гулуа. Алгоритм возмущений для реализации конечномерных аппроксимаций задач. . –М.: ОВМ АН СССР, 1990
10. Г.И. Марчук, В.И. Агошков, В.П. Шутяев. Сопряжённые уравнения и алгоритмы возмущений в нелинейных задачах математической физики. . –М.: Наука, 1993
11. Дж.Л. Рогава, Д.В. Гулуа. Алгоритм возмущений для реализации конечно-разностной аппроксимации абстрактной эволюционной задачи и явная оценка погрешности приближённого решения // Доклады Академии наук. - т. 456, №4, Москва, 2014. с.405-407.
12. J.L. Rogava, D.V. Gulua. Reduction of a three-layer semi-discrete scheme for an abstract parabolic equation to two-layer schemes. Explicit estimates for the approximate solution error. // Journal of Mathematical Sciences. - Vol. 206, No. 4, 2015. pp. 424-444
13. Д.В. Гулуа, Дж.Л. Рогава. Об алгоритме возмущений полудискретной схемы для эволюционного уравнения и оценке погрешности приближённого решения с помощью полугрупп. // ЖВМиМФ. – т. 56, № 7, 2016. с.1299-1322
14. Дж.Л. Рогава. Полудискретные схемы для операторных дифференциальных уравнений. -Тбилиси: Технический Университет. 1995
15. G. I. Marchuk, V. V. Shaidurov. Difference Methods and Their Extrapolations. -N.Y.; B.; Heidelberg; Tokyo: Springer, 1983
16. V. Pereyra. On improving an approximate solution of a functional equation by deferred corrections.// Numer. Math. - Bd.8. № 3. 1966. pp.376–391
17. V. Pereyra. Accelerating the convergence of discretization algorithms.// SIAM J. Numer. Anal. -V.4. № 4, 1967. pp.508–533.
18. Т. Като. Теория возмущений линейных операторов. –М.: Мир, 1972

Спектральное представление функции ротора внешней задачи Стокса в цилиндрических областях

А.В.Горшков¹

1 – Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, механико-математический факультет

Аннотация: В работе построено нестационарное решение внешней задачи Стокса в цилиндрической области для задачи обтекания набегающим потоком с условием прилипания на границе области. Решение представляется через вихревую функцию с применением ассоциированных преобразований Вебера-Орра.

Ключевые слова: Внешняя задача Стокса, преобразование Вебера-Орра, цилиндрическая область, функции Бесселя, закон Био-Савара.

Введение

Как известно, в цилиндрических областях система Стокса с условием прилипания на границе не имеет стационарного решения. Сложность исследования нестационарных решений связана с наличием непрерывной структуры спектра в гидродинамических операторах. В данной работе нестационарное решение внешней задачи будет построено на базе спектрального разложения оператора Стокса по непрерывному спектру, заключенному в отрицательной полуоси.

При исследовании движения объектов аэро-гидро-механики во внешней среде самой естественной областью решения уравнений движения является бесконечное пространство, окружающее обтекаемый объект. На сегодняшний день задача обтекания тела потоком, как правило, решается в ограниченной области (пусть и достаточно большой). На внешней границе этой области ставится граничное условие, равное скорости набегающего потока, а на внутренней - условие прилипания (условие нулевой скорости на границе взаимодействия объекта с потоком). Однако данный подход имеет существенный недостаток в виде эффекта экрана, который исключается в наличии шума от искусственно введенной внешней границы области (см [1]). Поэтому физически

оправданным является постановка граничного условия именно на бесконечности.

Преимуществом двумерной задачи Стокса для вязкой несжимаемой жидкости перед трехмерной заключается в том, что система из нескольких уравнений (включая уравнения движения и неразрывности) может быть сведена к одному скалярному уравнению относительно вихревой функции. Действительно, под действием оператора ротора, система Стокса сводится к простейшему уравнению теплопроводности. На бесконечности данное уравнение замыкается нулевым граничным условием. Постановка граничного условия на внутренней границе области является очень важной проблемой. Если условие прилипания для векторного поля является простым условием Дирихле, то это же условие для вихревой функции становится интегральным.

В работе, на примере цилиндрических областей, будет показано, что условие прилипания обтекаемой среды на границе объекта может быть трансформировано в граничное условие для вихревой функции. Оказывается, что для этой функции можно построить специальное граничное условие смешанного типа (условие Робина), позволяющее решать начально-краевую задачу вместо интегро-дифференциальной,

что значительно понижает сложность решаемой задачи.

Решение внешней граничной задачи смешанного типа находится при помощи ассоциированных интегральных преобразований Вебера-Орра с обратным показателем. Более того, можно сказать, что сегодня системы Стокса и Навье-Стокса являются единственными уравнениями, в решении которых находят применение данные преобразования. По сути, преобразование Вебера-Орра становится спектральным разложением оператора Стокса по обобщенным собственным функциям.

Для плоских течений основным объектом задачи обтекания внешним потоком является круг, так как теорема Римана о конформных отображениях сводит произвольную односвязную область к данной (например, отображения Жуковского, Кармана-Трефтца).

Постановка внешней задачи Стокса

В области $B_{r_0} = \{x \in \mathbb{R}^2, |x| > r_0\}$, $r_0 > 0$, представляющей собой внешность круга радиуса r_0 исследуется внешняя задача Стокса с заданным внешним горизонтальным потоком, движущимся со скоростью v_∞ :

$$\partial_t \mathbf{v} - \Delta \mathbf{v} = \nabla p \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v}(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (2)$$

$$\mathbf{v}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}) \quad (3)$$

$$\mathbf{v}(t, \mathbf{x}) = 0, |\mathbf{x}| = r_0 \quad (4)$$

$$\mathbf{v}(t, \mathbf{x}) = v_\infty, |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (5)$$

Здесь $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$ – векторное поле и $p(t, \mathbf{x})$ – давление. Тогда функция ротора

$$w(t, \mathbf{x}) = \operatorname{rot} \mathbf{v}(t, \mathbf{x}) = \partial_{x_1} v_2 - \partial_{x_2} v_1$$

будет удовлетворять уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial w(t, \mathbf{x})}{\partial t} - \Delta w = 0, \quad (6)$$

с начальной функцией

$$w(0, \mathbf{x}) = w_0(\mathbf{x}) = \operatorname{rot} \mathbf{v}_0(\mathbf{x}).$$

Во внешних областях векторное поле восстанавливается по функции ротора неоднозначно, а, именно, с точностью до циркуляции векторного поля на

бесконечности, которую мы положим равной нулю (подробнее см. [2]):

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \oint_{|\mathbf{x}|=R} \mathbf{v}(t, \mathbf{x}) \cdot d\mathbf{l} = 0.$$

Разложим функцию ротора и соответствующее начальное условие в ряд Фурье

$$w(t, r, \varphi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} w_k(t, r) e^{ik\varphi}$$

$$w_0(r, \varphi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} w_{0,k}(r) e^{ik\varphi}$$

Тогда $w_k(t, r)$ будет удовлетворять уравнению

$$\frac{\partial w_k(t, r)}{\partial t} - \frac{\partial^2 w_k}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial w_k}{\partial r} + \frac{k^2}{r^2} w_k = 0 \quad (7)$$

с начальной функцией

$$w_k(0, r) = w_{0,k}(r) \quad (8)$$

Из граничных условий (4), (5) следуют следующие соотношения:

$$\int_{r_0}^{\infty} s^{-|k|+1} w_k(t, s) ds = v_\infty \operatorname{sign}(k) \frac{i\delta_{|k|,1}}{r_0^{|k|-1}}.$$

Следовательно, необходимым условием прилипания потока к границе является инвариантность моментов с отрицательным показателем:

$$\frac{d}{dt} \int_{r_0}^{\infty} s^{-|k|+1} w_k(t, s) ds = 0. \quad (9)$$

Учитывая, что уравнение (7) не меняется при замене k на $-k$, то дальнейшие рассуждения будем проводить для неотрицательных целых k .

Положим $z = x_1 + ix_2$. Умножим (7) на $s^{-|k|+1}$, проинтегрируем по лучу (r_0, ∞) и продифференцируем по t :

$$\frac{d}{dt} \int_{r_0}^{\infty} s^{-|k|+1} w_k(t, s) ds = \int_{B_{r_0}} \frac{\Delta w(t, \mathbf{x})}{z^k} d\mathbf{x}$$

$$= \frac{1}{r_0^k} \left(\frac{\partial w_k}{\partial r}(t, r_0) + k w_k(r_0) \right) = 0,$$

откуда получается граничное условие третьего типа

$$\frac{\partial w_k}{\partial r}(t, r_0) + k w_k(t, r_0) = 0. \quad (10)$$

Тем самым первоначальная задача Стокса (1)-(5) сводится к начально-краевой задаче третьего типа (7), (8), (10), решение которой дается ниже.

Ассоциированное преобразование Вебера-Орра

Определим выражение

$$R_{k,l}(\lambda, s) = J_k(\lambda s)Y_l(\lambda r_0) - Y_k(\lambda s)J_l(\lambda r_0)$$

Здесь J_k и Y_k – функции Бесселя первого и второго рода с показателем k соответственно. Для функций $f(r)$ удовлетворяющих $f(r)\sqrt{r} \in L_1(r_0, \infty)$ преобразование Вебера-Орра дается формулой

$$\hat{f}(\lambda) = \int_{r_0}^{\infty} R_{k,l}(\lambda, s)f(s)ds \equiv W_{k,l}[f](\lambda).$$

Обратное преобразование дается формулой

$$F(r) = \int_0^{\infty} \frac{R_{k,l}(\lambda, r)}{J_l(\lambda r_0)^2 + Y_l(\lambda r_0)^2} \hat{f}(\lambda)\lambda d\lambda \\ \equiv W_{k,l}^{-1}[\hat{f}](r)$$

Для $k = l$ эти формулы определяют классическое преобразование Вебера-Орра. И если дополнительно предположить ограниченность вариации $f(r)$, то Титчмаршем [3] было доказано, что преобразование $W_{k,l}^{-1}[\hat{f}]$ действительно является обращением $W_{k,l}[f]$ в том смысле, что верно

$$\frac{f(r+0)+f(r-0)}{2} = W_{k,l}^{-1}[W_{k,l}[f]](r). \quad (11)$$

При $k = l - 1$ формулы выше определяют ассоциированное преобразование Вебера-Орра, и, при этом, формула (10) остается верной.

При $k = l + 1$ эта формула уже не верна. Точнее, для $k = 0, 1$ она остается верной, а для $k > 1$ необходимо дополнительно потребовать, чтобы

$$\int_{r_0}^{\infty} s^{-k+1} f(s) ds = 0. \quad (12)$$

Отметим, что при $k = l + 1$ выражение $R_{k,k-1}(\lambda, r)$ удовлетворяет граничному условию (9).

Если предположить, что начальное условие $w_0(x)$ удовлетворяет условию прилипания, из которого следует выполнение (11), то, с

учетом (12), решение задачи (7), (8), (10) будет даваться явной формулой

$$w_k(t, r) = \int_0^{\infty} \frac{R_{k,k-1}(\lambda, r)}{J_{k-1}(\lambda r_0)^2 + Y_{k-1}(\lambda r_0)^2} \times \\ \left(\int_{r_0}^{\infty} R_{k,k-1}(\lambda, s)w_{0,k}(s)ds \right) e^{-\lambda^2 t} \lambda d\lambda \quad (13)$$

Действительно, функции $e^{-\lambda^2 t} J_k(\lambda r)$ и $e^{-\lambda^2 t} Y_k(\lambda r)$ являются решениями (7) по определению функций Бесселя. Тогда и $w_k(t, r)$ является решением того же уравнения. Выполнение начального условия (8) при $t = 0$ следует из (11). Т.к. $R_{k,k-1}(\lambda, r)$ удовлетворяет (10), то и $w_k(t, r)$ удовлетворяет тому же условию.

Умножив (13) на $e^{ik\varphi}$ и просуммировав по k , получим спектральное представление решения вида

$$w(t, x) = \int_{-\infty}^0 e^{\lambda t} dE_{\lambda} [w_0], \quad (14)$$

где E_{λ} – семейство спектральных проекторов (см. [4]).

Стабилизация решения

Далее мы покажем, что ротор векторного поля при обтекании внешним потоком средне-квадратически стабилизируется к нулю со степенной скоростью.

Определим функцию

$$\sigma(\lambda) = J_{k-1}(\lambda r_0)^2 + Y_{k-1}(\lambda r_0)^2$$

Можно доказать, что эта функция является монотонно убывающей. Для ассоциированного преобразования Вебера-Орра стандартно доказывается равенство Парсеваля, которое имеет следующий вид:

$$(f, g)_{L_{2,r}dr(r_0, \infty)} \\ = (W_{k,k-1}[f], W_{k,k-1}[g])_{L_{2,\sigma(\lambda)}\lambda d\lambda(0, \infty)}$$

Здесь $L_{2,r}dr$, $L_{2,\sigma(\lambda)}\lambda d\lambda$ обозначают пространства квадратично суммируемых функций с весом r и $\sigma(\lambda)\lambda$ соответственно.

Применив это равенство к (13) получим

$$\|w_k(t, r)\|_{L_{2,r}dr(r_0, \infty)} \\ = \left\| e^{-\lambda^2 t} \right. \\ \left. \times \int_{r_0}^{\infty} R_{k,k-1}(\lambda, s)w_{0,k}(s)ds \right\|_{L_{2,\sigma(\lambda)}\lambda d\lambda(0, \infty)}$$

Пользуясь оценками, полученными в [5], можно показать, что это выражение, а, следовательно, и $\|w(t, x)\|_{L_2(B_{r_0})}$, стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$ степенным образом.

Полученное спектральное представление (14) позволяет строить явные решения

внешней задачи Стокса с применением закона Био-Савара.

Spectral representation of the rotor function of the Stokes exterior problem in cylindrical domains

A.V. Gorshkov

Abstract: In this paper, a nonstationary solution of the external Stokes problem for a flow past the cylindrical domain with no-slip condition on the boundary is constructed. The solution is represented through the vortex function using the associated Weber-Orr transforms.

Keywords: Stokes exterior problem, Weber-Orr transform, cylindrical domain, Bessel functions, Bio-Savart law.

Литература

1. M. Feistauer, C. Schwab. Coupled Problems for Viscous Incompressible Flow in Exterior Domains. Research Report No. 99-07, 1999.
https://www.sam.math.ethz.ch/sam_reports/reports_final/reports1999/1999-07.pdf
2. C. Lacave. Two-dimensional incompressible ideal ow around a thin obstacle tending to a curve. “Annales Inst. H. Poincare Analyse Non Lineaire”, 26, 1121–1148 (2009)
3. E.C. Titchmarsh.: Weber’s integral theorem. “Proc. Lond. Math. Soc.”, 22 (2), (1924), 15-28.
4. К. Иосида. Функциональный анализ. М.: Мир, 1967.
5. A.V. Gorshkov. Boundary Stabilization of Stokes System in Exterior Domains. “J. of Math. Fluid Mech.”, Birkhauser Verlag (Switzerland), pp. 1-19

Применение псевдообратной матрицы для моделирования процессов различной физической природы: обзор существующей литературы

Е. К. Гребенникова

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва, Россия
E-mail: ekaterina.grebennikova@inbox.ru

Аннотация. В статье приводится обзор существующей зарубежной и российской литературы, посвященной концепции псевдообратной матрицы и методам ее вычисления. Особое внимание уделено применению понятий псевдорешения и псевдообратной матрицы в приложении к вопросам математического моделирования процессов различной физической природы и стохастических систем.

Ключевые слова: псевдообратная матрица, псевдорешение, применение псевдообратной матрицы, использование псевдообратной матрицы, литературный обзор, математическое моделирование

Введение

Концепция псевдообратной матрицы была разработана только в XX веке [1, 2, 3]. В отличие от всем известных обратных матриц, вычисляемых только для невырожденных квадратных матриц, псевдообратная может быть вычислена для любых исходных матриц. Данная концепция представлена во многих известных учебниках и учебных пособиях.

Учебник [4] считается классическим. Псевдообратная матрица описывается с помощью скелетного разложения, доказываются существование и единственность матрицы, перечисляются ее свойства, приводится способ нахождения наилучшего приближенного решения методом наименьших квадратов с примером для системы, состоящей из трех линейных уравнений с четырьмя неизвестными.

Ещё одним примером [5] классического описания концепции псевдообратной матрицы является. В нём приведены понятия псевдорешения, невязки, нормальной системы и нормального псевдорешения, доказываются единственность нормального псевдорешения произвольной системы линейных уравнений, приводятся определение псевдообратной матрицы, её свойства, понятия псевдообращения и псевдообратного отображения.

С последующим развитием темы появились и новые учебные пособия, описывающие расширенную общую или применимую к конкретной сфере знания теорию.

Например, в [6] дается представление о

псевдорешении, о невязке решения системы уравнений и норме невязки, определение нормального псевдорешения и простой пример его нахождения учитывающий минимизацию нормы невязки решения. Приводятся два способа определения псевдообратной матрицы, с помощью классической формулы $AA^+A = A$ и с помощью псевдообратного решения. Так же приводится простой пример решения системы уравнений, состоящей из двух уравнений с двумя неизвестными и столбцом свободных членов, не имеющей решения в классическом понимании, но для которой можно найти псевдорешение с минимальной невязкой. Приводится ряд свойств.

Далее будут рассматриваться различные методы вычисления псевдообратной матрицы.

Методы определения псевдообратной матрицы

На сегодняшний день существует немало известных способов вычисления псевдообратной матрицы.

В [4], описаны классические методы вычисления псевдообратной матрицы. Как уже упоминалось ранее, в качестве наилучшего приближенного решения описывается метод наименьших квадратов. А так же описывается Метод Гревилля последовательного нахождения псевдообратной матрицы с примером для матрицы из четырех уравнений с тремя неизвестными.

В [5] так же описываются классические методы вычисления. Приводятся две формулы для нахождения псевдоинверсии: при

линейной независимости столбцов и в случае линейной независимости строк, приводится доказательство существования решения в обоих случаях. Приводится формула, описывающая псевдообратную матрицу через скелетное разложение. Вычисление рассматривается при помощи прямого скелетного разложения, QR-разложения и второй формы сингулярного разложения, приводится метода наименьших квадратов.

В [6] так же приводится формула, описывающая псевдообратную матрицу через скелетное разложение, и рассматриваются два способа получения данного разложения: прямое получение и получение с помощью QR-разложения. Рассматривается метод Гревилля на примере системы уравнений с двумя уравнениями и четырьмя неизвестными. Описывается решение систем линейных уравнений тремя методами: методом наименьших квадратов Гаусса в случае, если количество уравнений больше количества неизвестных, образующим псевдорешение, методом псевдообратной матрицы Мура-Пенроуза, для случая, при котором количество уравнений меньше количества неизвестных, образующим нормальное решение, и методом регуляризации Тихонова, являющегося дальнейшим развитием двух предыдущих методов, и дающим, так же, нормальное решение.

Не редко при решении задач возникает вопрос о вычислении псевдообратной матрицы, и исследователи изобретают всё новые методы ее нахождения, как в общем случае, так и для решения конкретных задач, минимизируя количество необходимых вычислительных операций.

Например, в [7] предлагается новый метод построения для блочных матриц при количестве уравнений большем, чем количество неизвестных, основанный на сопряженном процессе Грама-Шмидта и инверсии Мура-Пенроуза. Приводится сравнение точности псевдообратной матрицы, полученной с помощью разработанного метода относительно нескольких известных методов, в частности, относительно метода Гревилля, показывающее достаточную точность вычислений, для разреженных матриц большого размера. Так же проводится исследование вычислительного времени, показывающее заметный выигрыш во времени, относительно известных методов.

В [8] авторами описывается универсальный подход аналитического вычисления квадратной и прямоугольной псевдообратных матриц. На основе

предложенного подхода получена формула, связывающая операцию обращения невырожденной блочной матрицы с её псевдообращением, проведено исследование основных свойств формулы, сформулированы некоторые следствия упрощающие вычисление псевдообратной матрицы на основе свойств данной формулы. Приведены примеры для квадратных и прямоугольных матриц невысокого ранга.

В [9] описаны новые формулы вычисления псевдообратной матрицы Мура-Пенроуза для квадратной матрицы, основанные на преобразовании с помощью обратимой матрицы, которое позволяет использовать для псевдообращения стандартные вычислительные алгоритмы, улучшать обусловленность уравнений при псевдообращении плохо масштабированных матриц, а также выполнять псевдообращение символьных матриц. Приводится пример обращения символьной матрицы невысокого ранга и описание процедуры повышения точности вычислений псевдообратной матрицы.

С повсеместным распространением компьютеров стало развиваться не только математическое, но и компьютерное моделирование методов построения псевдообратных матриц в различных системах.

Одним из наиболее распространенных способов моделирования является моделирование с использованием системы Matlab, в которой реализована специальная функция, вычисляющая псевдообратную матрицу по Муру-Пенроузу, использующая разложение сингулярных значений для вычисления псевдоинверсии, внутри специального пакета работы с матрицами.

Пример работы данной функции изложен в [10] для решения системы линейных уравнений невысокого порядка.

В [11] представлены параллельные матричные и матрично-векторные вычислительные методы определения параметрических обобщенных обратных матриц Мура-Пенроуза в системе MATLAB, так же как и у предыдущего автора. Для гиперматрицы параметрической матрицы небольшого размера приведено нахождение псевдообратной матрицы. Дана оценка количества затрачиваемого машинного времени при решении подобных задач.

Исследования по применению псевдообратной матрицы

На сегодняшний день псевдообратная

матрица применяется в различных научных сферах, зачастую при моделировании процессов различной физической природы.

Вычисление псевдообратной матрицы, нередко необходимо при решении задач прогнозирования.

В [12] рассматривается плоская нейронная сеть для оперативного прогнозирования состояний двигателя с применением рекурсивного алгоритма на основе псевдообратной матрицы разбиения. Экспериментальным путем устанавливается высокая точность разработанной нейронной сети и её достаточная надежность при оперативном прогнозировании, что позволяет использовать данную сеть для нелинейных систем с несколькими входами и многими выходами, таких как двигатели транспортных средств.

Задача предсказания рассматривается в [13] на применение нейронной сети, применимой к проблеме автоматического обнаружения неисправностей в вентиляционной установке системы кондиционирования воздуха отопительной вентиляции. Предлагается стратегия диагностики неисправностей для вентиляционной установки, в которой используется сеть с радиусной базисной функцией для моделирования причин неисправностей. В качестве основных, авторы выбрали функции Гаусса. Параметры данных функций и веса сети вычислялись с использованием нового метода обучения сети, который сочетает в себе генетический алгоритм и алгоритм псевдообратной матрицы. Авторы разработали собственную программу для моделирования. Провели тестирование построенных алгоритмов и программы моделирования для системы кондиционирования воздуха отопительной вентиляции, установленной в лаборатории, для семи различных искусственно введенных в работу вентиляционного отопления неисправностей. Программа показала успешную идентификацию каждой искусственной неисправности.

Так же используются методы, основанные на вычислении псевдообратной матрицы и псевдоинверсии для моделирования явлений различной физической природы.

В [14 Separation of temperature] рассматривается определение температуры и деформации в системе брЮллиэновского оптического импульсного анализатора (BOTDA) с одним волокном на основе псевдообращения Мура-Пенроуза неквадратных матриц. В статье проводится

теоретическое и экспериментальное исследование данного подхода. Путем сравнения разработанного метода для одной оптической полосы с другим эталонным методом для двух оптических полос было экспериментально доказано, что исследуемый метод подходит для восстановления данных о температуре и деформации с достаточной точностью.

В [15 Brightness-Temperature Retrieval] рассматриваются методы получения яркости и температуры для радиометров с синтезированной апертурой. Представлены три различных подхода к объединению измеренных значений яркости и температуры антенны и данных характеристик прибора в общее уравнение для обращения. Для данного уравнения рассматриваются два известных метода обращения: Метод Фурье и метод псевдообратной матрицы. Приводится сравнительный анализ данных методов для некоторых примерах.

В статье [16] представляется инкрементный метод вычисления псевдообратной матрицы применимый к машинному обучению и вычислительной нейробиологии, который, как утверждают авторы, является биологически правдоподобным методом обучения и может быть адаптирован для нестационарных потоков данных. Авторы утверждают, что представленный метод является значительно более эффективным для памяти, чем обычное вычисление псевдоинверсий путем декомпозиции сингулярных значений.

В [17] исследуются алгоритмы формирования управляющих воздействий в системах управления динамическими объектами. Для нахождения решения используются устойчивые алгоритмы на основе ортогональных разложений и псевдообращения квадратных матриц, которые способствуют увеличению точности формирования управляющих воздействий. Приводятся регуляризованные алгоритмы стабилизирующие процедуру формирования и развития управляющих воздействий в локально оптимальных системах управления динамическими объектами в условиях плохой обусловленности.

Среди последних отечественных исследований можно отметить статью [18], в которой автор описывает задачу многоканальной томографии и математические методы ее решения. Предлагается новый метод томографического подхода к обработке многоканальных сигналов, использующий сингулярное

разложение матрицы для получения вектора-оригинала методом псевдообращения.

В дальнейшем тот же автор проводит компьютерное моделирование [19], описывая новый метод определения направлений на источники излучения, основанный на вышеупомянутом томографическом подходе. Данный подход позволяет по ограниченному числу измерений интегральной мощности на выходе приемной антенны, полученных при заранее выбранных направлениях оси широкоугольной диаграммы направленности, определять направления на источники излучения с высокой точностью и достигать сверхразрешения источников. В статье приводятся результаты компьютерного эксперимента.

Нередко авторы проводят долгосрочные исследования получения и применения псевдообратной матрицы.

Так, в [20] исследуется проблема устойчивости алгоритма нахождения псевдообратной матрицы к малым возмущениям, несущая очень важное теоретическое и практическое значение. В статье приводится подробное исследование рекурсивного алгоритма псевдообращения на устойчивость к ошибкам исходной информации. Приводится пример простой произвольной нивелирной сети с соответствующей матрицей коэффициентов параметрических уравнений поправок, на основе которой строится псевдообратная матрица. Авторы делают заключение о том, что предложенный ими алгоритм получения псевдообратной матрицы является достаточно устойчивым к возмущениям исходных данных.

Одновременно в [21] авторы исследуют решение плохо обусловленных систем уравнений в задачах геодезической практики, предлагая заменить классический метод наименьших квадратов на метод псевдонормального решения. Авторы приводят рекурсивный алгоритм вычисления на основе метода Гревилля. Проводится исследование оценки точности вычислений.

Так же авторы рассматривают применение метода псевдонормальной оптимизации к процедуре оценивания параметров линейной эконометрической модели [22]. Использование метода позволяет получить несмещенные и эффективные оценки параметров эконометрической модели, исключая составление и обращение матрицы, нормальных уравнений, что позволяет значительно упростить процедуру оценивания параметров модели. Метод демонстрируется на примере, с помощью ковариационной

матрицы оцениваются средние квадратические ошибки полученного решения.

Один из авторов продолжает исследования предлагая новый метод применения псевдоинверсии, основанный на итерационном алгоритме псевдообращения матриц [23], для оценивания параметров регрессионной модели.

Последней опубликованной с участием автора является работа [24], посвященная прогнозированию процесса осадки здания, в которой автор выступает в качестве соавтора. Основой математического моделирования дальнейшего прогнозирования послужили многолетние измерения осадки реально существующего здания. Расстояния Махаланобиса, необходимые для составления математического уравнения прогнозной модели, определяется с помощью рекурсивного алгоритма псевдообращения. При долгосрочном прогнозировании, учитывая продолжение процесса усадки, составленная модель показывает результаты, укладывающиеся в предвычисленный коридор погрешности прогноза.

Так же концепция псевдообратной матрицы используется при решении различных физических задач моделирования.

Например, для моделирования движения подвижного состава [25]. Предлагается новый метод определения сил, действующих в контакте колеса и рельса во время движения. На основе проведения серии экспериментов с использованием приращения одной из компонент сил или смещения точки контакта, формируется система линейных алгебраических уравнений, связывающих приращение измеряемых деформаций и приращения приложенных сил, где количество уравнений превышает количество искомым переменных. Данная система уравнений решается нахождением псевдорешения с минимальной евклидовой нормой ошибки. Приводятся результаты экспериментов по восстановлению действующих сил и координат точек контакта, подтверждающие достаточную точность разработанного метода.

В работе [26] Предложен алгоритм навигационного определения координат управляемых средств МЧС с компенсацией систематических и эфемеридных погрешностей для случая, когда исходная модель регрессии является моделью неполного ранга и (или) не выполняются предположения о линейной независимости столбцов матриц модели. В работе формулируется теорема, о псевдообращении блочных матриц с произвольным числом компонентов для

случая, когда исходная модель регрессии является моделью неполного ранга и (или) не выполняются предположения о линейной независимости столбцов матриц, можно рассматривать как обобщение метода псевдообращения матриц, состоящих из двух блоков (теорема Гревилля), утверждением которой является существование матрицы. Данную теорему можно применять на практике для оценивания погрешностей эфемерид и систематических погрешностей навигационных измерений в тех случаях, когда исходная модель регрессии является моделью неполного ранга и (или) не выполняются предположения о линейной независимости столбцов матриц модели.

Примером последних отечественных научных исследований являются работы [27, 28, 29], в которых предлагается использование псевдообратной матрицы для моделирования тепловых процессов. В работе [27] предлагается метод математического моделирования стохастических температурных полей в электронных системах, для которого получены матричные уравнения для статистических мер стохастических распределений температуры в электронной. В [28, 29] предлагается метод анализа тепловых процессов в технических системах, основанный на псевдорешении уравнений математической модели, описывающей нестационарные и нелинейные тепловые процессы, позволяющий определять наилучшее решение уравнений математической модели по критерию

минимума суммы квадратов разности правой и левой частей уравнений. Разработанный метод позволяет определять решение как линейных, так и нелинейных систем алгебраических уравнений математической модели. В статье, так же, приводится сравнение точного и псевдорешения для нескольких конкретных случаев, значения относительных погрешностей сравнения которых находятся в пределах допустимых при инженерных расчетах тепловых режимов технических систем.

Заключение

С момента открытия методов решения произвольных систем линейных уравнений псевдообратная матрица активно используется при решении задач различных сфер знания. С повсеместным распространением компьютеров и увеличением их вычислительных мощностей, компьютерное моделирование становится более доступным, и использование псевдообратной матрицы все больше распространяется в различных научных сферах. Данный факт подтверждается наличием большого количества публикаций, как среди отечественных, так и зарубежных исследователей.

Публикация выполнена в рамках государственного задания по проведению фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) 0065-2019-0001.

Usage of pseudo-inverse matrix for modeling different physical nature processes: existing literature review

E.K. Grebennikova

Abstract. The article provides an overview of the existing foreign and Russian literature on the concept of a pseudoinverse matrix and methods for its calculation. Particular attention is paid to the application of the concepts of pseudo-solution and a pseudo-inverse matrix in the application to the problems of mathematical modeling of processes of different physical nature and stochastic systems.

Keywords: pseudo-inverse matrix, pseudo-solution, use of pseudo-inverse matrix, application of pseudo-inverse matrix, literature review, mathematical modeling

Литература

1. Moore E.H. On the Reciprocal of the General Algebraic Matrix, Bulletin of the American Mathematical Society, №26, 1920, p. 394-395.
2. Penrose R. A. Generalized Inverse for Matrices, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 51, 1955, p. 406-413.
3. Penrose. R On best approximate solution of linear matrix equations, Proceedings of the Cambridge

- Philosophical Society, 52, 1956, с. 17-19.
4. Грантмахер Ф.Р. Теория матриц, 5-е издание, М.: Физматлит, 2010, 560 с., с. 32.
 5. Беклимишев Д.В. Дополнительные главы линейной алгебры, М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1983, 336 с., с. 193.
 6. Л.А. Севастьянов, К.П. Ловецкий, Е.Б. Ланеев Регулярные методы и алгоритмы расчета обратных задач в моделях оптических структур, Уч. пос., Москв, 2008, 135 с., с. 11-60.
 7. Toutounian F., Ataei A., A new method for computing Moore–Penrose inverse matrices, Journal of Computational and Applied Mathematics, volume 228, issue 1, 1 June 2009, p. 412-417
 8. Зубов Н.Е., Рябченко В.Н. О вычислении псевдообратной матрицы. Общий случай, Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана, сер. Естественные науки, № 1, 2018, с. 16–25.
 9. Зубов Н.Е., Микрин Е.А., Рябченко В.Н. О вычислении псевдообратной квадратной матрицы на основе обращения, Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана, сер. Естественные науки, № 3, 2018, с. 24–31.
 10. Бункова А.А., Макаренко Е.С., Самокрайняя Ю.В. Решение системы линейных уравнений в системе MATLAB, Наука молодых, Сборник научных статей по материалам X Всероссийской научно-практической конференции, Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, 2017, с. 523-527.
 11. Симонян С. О. Параллельные вычислительные методы определения параметрических обобщенных обратных матриц, Известия Томского политехнического университета, Инжиниринг георесурсов, 2013, №5, 323 с., с. 10-15.
 12. Jurgen R., On-Line State Prediction Of Engines Based On Fast Neural Network, Electronic Engine Control Technologies, 2004, 2nd Edition, 768 p., 713 – 719 p.
 13. Yonghong Huang et. al., Automated Fault Detection and Diagnosis for an Air Handling Unit Based on a GA-Trained RBF Network, International Conference on Communications, Circuits and Systems, 2006, 2038-2041 p.
 14. Felipe Lima et. al., Separation of temperature and strain in a single fiber BOTDA system by pseudo-inverse approach, 2017 SBMO/IEEE MTT-S International Microwave and Optoelectronics Conference (IMOC)
 15. Corbella I. et. al., Brightness-Temperature Retrieval Methods in Synthetic Aperture Radiometers, IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, Volume: 47, Issue: 1, Jan. 2009, 285 – 294 p.
 16. Tapson J., A. van Schaik Learning the pseudoinverse solution to network weights, Neural Networks, Volume 45, September 2013, 94-100 p.
 17. Sevinov J., Regularized Algorithms for the Formation of Control Actions in Locally Optimal Control Systems for Dynamic Objects, International Journal of Advanced Research in Science, Engineering and Technology, Vol. 5, Issue 5 , May 2018, 5853-5857 p.
 18. Самойленко М. В., Математические аспекты применения томографического подхода в обработке многоканальных сигналов, Вестник Московского Авиационного института, том 17, №3, 2010, 205-212 с.
 19. Самойленко М. В., Метод высокоточного определения направлений на источники излучения и их сверхразрешение с использованием широкоугольной диаграммы направленности, Вестник Московского Авиационного института, Т. 17, №5, 2010, 144-153 с.
 20. Барлиани А. Г., Егорова С. А. Исследование рекурсивного алгоритма псевдообращения на возмущение исходных данных, ИНТЕРЭКСПО ГЕО-СИБИРЬ, Т. 1, № 1, 2012, 90-94 с.
 21. Барлиани А. Г., Егорова С. А. Исследование рекурсивного алгоритма псевдообращения на возмущение исходных данных, ИНТЕРЭКСПО ГЕО-СИБИРЬ, Т. 1, № 1, 2012, 85-89 с.
 22. Барлиани А. Г., Егорова С. А. Процедура оценивания параметров линейной эконометрической модели методом псевдонормальной оптимизации, Вестник Сибирского государственного университета геосистем и технологий, № 1 (25), 2014, 105-113 с.
 23. Барлиани А. Г., Барлиани И. Я. Оценка параметров модели экономических систем на основе итерационного алгоритма псевдообращения матриц, ИНТЕРЭКСПО ГЕО-СИБИРЬ, Т. 6, № 1, 2016, 200-207 с.
 24. Сычева Н. В., Барлиани А. Г. Предварительный анализ результатов наблюдений осадок высотного здания в г. Москва (пл. Восстания) для математического моделирования процесса развития деформации, ИНТЕРЭКСПО ГЕО-СИБИРЬ, Т. 9, № 1, 2017, 67-71 с.
 25. Елисеев К. В., Исполков Ю. Г., Орлова А.Н. Определение сил, возникающих при контакте колесной пары с рельсами Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, № 4-1, 2013, с. 262-269
 26. Пицык В. В., Гамаюнов Е. Г., Суховерхова Л. В. Псевдоинверсия в задачах обработки

результатов навигационных измерений для определения координат управляемых средств МЧС России, Пожары и чрезвычайные ситуации: предотвращение, ликвидация, №1, 2011, 63-69с.

27. Мадера А.Г. Применение концепции псевдообратной матрицы для математического моделирования стохастических распределений температуры в электронных системах // Электронные информационные системы. 2018. № 4(19). С. 67-72.
28. Мадера А. Г. Анализ тепловых процессов в технических системах методом псевдообратной матрицы // Современные наукоемкие технологии. 2018. № 9. С. 61-65.
29. Мадера А.Г. Метод стохастического псевдорешения при математическом моделировании тепловых режимов в электронных системах в условиях неопределенности определяющих параметров // Труды НИИСИ РАН. 2018. Т.8. №5. С. 115 – 120