
СОДЕРЖАНИЕ

Том 8, номер 4, 2019

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

Устойчивость ячейки Вигнера–Зейца в условиях частичного нарушения электронейтральности в LDA-приближении

К. М. Ерохин, Н. П. Калашников

299

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Сравнение последствий волн давления при остановке ГЦН и LOCA в ВВЭР-1000

Дина Али Амер, С. П. Никонов

309

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

Нелинейные реакционно-диффузионные уравнения с переменными коэффициентами: метод поиска точных решений в неявной форме

А. Д. Полянин

321

Аналитические и численные свойства математической модели баланса инсулин–глюкоза в крови человека

К. В. Кан, Н. А. Кудряшов

335

АВТОМАТИКА И ЭЛЕКТРОНИКА

Компенсация импульсов помех в троичном КМОП мажоритарном элементе на логических элементах И-НЕ при воздействии одиночных ионизирующих частиц

Ю. В. Катунин, В. Я. Стенин

342

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

О важности оптимизации точности и производительности алгоритмов отслеживания объектов в видеопотоке по параметрам

А. Д. Егоров

350

Применение методики динамической адаптации сетки при исследовании процессов формирования полос локализованной деформации

Р. В. Муратов, Н. А. Кудряшов, П. Н. Рябов

361

Аналитическое моделирование динамики истощения невозобновляемых традиционных энергетических ресурсов

В. В. Харитонов, Ю. А. Ульянов, Д. Е. Слива

370

Аппроксимация измерений интернет-трафика в магистральном канале суммой логнормальных распределений

Валерий В. Иванов, Виктор В. Иванов, А. В. Крянев, И. И. Татаринев

380

Contents

Volume 8, Number 4, 2019

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta "MIFI"

Theoretical and Experimental Physics

Stability of a Wigner–Seitz cell During Partial Violation of Electroneutrality in the LDA-approximation

K. M. Erokhin and N. P. Kalashnikov

299

Technical Physics

Comparing the Consequences Pressure Waves due to MCP Pump Stops and LOCA in VVER-1000

Dina Ali Amer and S. P. Nikonov

309

Differential Equations and Dynamic Systems

Nonlinear Reaction–Diffusion Equations with Variable Coefficients: Method for Finding Exact Solutions in an Implicit Form

A. D. Polyinin

321

Analytical and Numerical Properties of the Mathematical Model of the Insulin–Glucose Balance in Human Blood

K. V. Kan and N. A. Kudryashov

335

Automation and Electronics

The Noise Pulse Compensation in the Ternary CMOS Majority Element on NAND Logical Elements under Impacts of Single Ionizing Particles

Yu. V. Katunin and V. Ya. Stenin

342

Applied Mathematics and Informatics

Optimization of Parametric Object Video Stream Tracking Algorithms

A. D. Egorov

350

Application of the Adaptive Mesh Refinement Technique to Study the Plastic Flow Localization Process

R. V. Muratov, N. A. Kudryashov, and P. N. Ryabov

361

Analytical Modeling of Exhaustion Dynamics of Non-Renewable Traditional Energy Resources

V. V. Kharitonov, Yu. A. Uljanin, and D. E. Sliva

370

Approximation of Internet Traffic Measurements in the Trunk Channel by the Sum of Lognormal Distributions

Valery V. Ivanov, Victor V. Ivanov, A. V. Kryanev, and I. I. Tatarinov

380

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

УДК 538.915; 539.182

УСТОЙЧИВОСТЬ ЯЧЕЙКИ ВИГНЕРА–ЗЕЙЦА В УСЛОВИЯХ ЧАСТИЧНОГО НАРУШЕНИЯ ЭЛЕКТРОНЕЙТРАЛЬНОСТИ В LDA-ПРИБЛИЖЕНИИ

© 2019 г. К. М. Ерохин^{1,*}, Н. П. Калашников^{2,**}

¹ ФГБОУ ВО Московский политехнический университет, Москва, 107023, Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

*e-mail: kmekm@yandex.ru

**e-mail: kalash@mephi.ru

Поступила в редакцию 02.04.2019 г.

После доработки 19.05.2019 г.

Принята к публикации 28.05.2019 г.

На основе теоремы Гельмана–Фейнмана для изолированной ячейки Вигнера–Зейца был проведен расчет зависимости энергии связи от дефицита электронов. Для 38 металлов получена оценка критического параметра среднего числа электронов, удаление которых приводит к их разрушению. Нарушение устойчивости металлов наступает при удалении около 13.1–13.4% имеющихся электронов проводимости, причем величина критического заряда немонотонно зависит от атомного номера элемента. Расчеты проводились на основе модели локальной плотности и сравнивались с результатами, полученными при использовании модели свободных электронов. Показано, что имеет место относительно небольшое отличие результатов расчетов между этими моделями, что в дальнейшем позволяет использовать для дальнейших оценок приближение свободного электронного газа. Анализ полученных результатов показал, что критический параметр, определяющий устойчивость ячейки, зависит от принадлежности к группе переходных или непереходных металлов, а так же зависит от ее среднего размера. Получено, что основными параметрами, влияющими на устойчивость металла, являются энтальпия атомизации и значение энергии низшего состояния валентного электрона в изолированном атоме. Расчеты показали, что критический параметр, определяющий устойчивость металла, практически линейно зависит от величины энтальпии атомизации, что позволяет экстраполировать экспериментальные данные, полученные при измерении энтальпии в условиях небольшого электронного дефицита, к его критическому значению.

Ключевые слова: ячейка Вигнера–Зейца, теорема Гельмана–Фейнмана, дефицит электронов, металлы, Томас–Ферми, устойчивость решетки

DOI: 10.1134/S2304487X19040035

1. ВВЕДЕНИЕ

Электропроводность металлов определяется наличием коллективизированных электронов, не связанных с отдельными ионами и имеющими возможность перемещаться по всему объему металла. Условие устойчивости металлов объясняется взаимодействием положительных ионов с электронами, располагающимися между ними. Выделим вблизи некоторого иона объем, соответствующий элементарной ячейке Вигнера–Зейца (ВЗ) [1, 2], последующая трансляция которого по всем направлениям дает возможность формировать кристаллическую структуру металлов с определенной степенью симметрии. Хотя электроны свободно перемещаются внутри металла, их средняя плотность ρ_1 почти постоянна, и в ячейке (ВЗ) находится такое число электро-

нов, которое, в среднем, обеспечивает ее электронейтральность. Основная часть взаимодействия сосредоточена внутри ячейки, что и определяет энергию электронов в поле, создаваемым положительным ионом. Согласно [1–3], ячейка (ВЗ) имеет высокую степень симметрии, что позволяет с достаточной степенью точности аппроксимировать ее сферой (ВЗ) радиуса r_s равного объема. При подобной аппроксимации взаимодействие между ионами и электронами внутри таких объемов обладает сферической симметрией, и электрон, оказавшийся в области отдельной сферы, будет взаимодействовать с ионом и другими электронами, находящимися только внутри этой сферы. В таком приближении – приближении изолированных сфер – взаимодействием между соседними ячейками пренебрегают, несмотря на возможность небольшого нарушения ее электро-

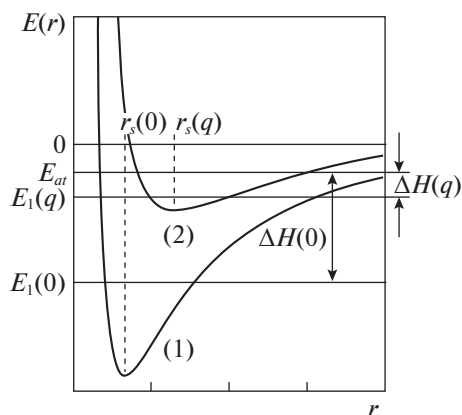


Рис. 1. Полная энергия электрона проводимости нейтральной (1) и заряженной (2) сферы ВЗ.

нейтральности. Сама нейтральная ячейка (ВЗ) является стабильным образованием, обеспечивающим устойчивость макроскопического количества вещества.

Цель настоящей работы: сделать оценку минимального числа электронов проводимости, удаление которых приводит к нарушению устойчивости сферы (ВЗ), т.е. разрушению металла.

Расчеты проводились на основе приближения Local Density Approximation (LDA) без учета вкладов от обменной и корреляционной энергии.

2. УСЛОВИЕ УСТОЙЧИВОСТИ СФЕРЫ (ВЗ)

При удалении из сферы некоторого количества электронов происходит уменьшение электронной плотности, т.е. возникновение некомпенсированного заряда λe , относительная величина которого

$$\lambda = \frac{\rho_\lambda}{\rho_1}, \quad q = 1 - \lambda, \quad (1)$$

где, соответственно, ρ_λ и ρ_1 — плотности электронов заряженной и нейтральной сферы. Обозначим через E_1 энергию связи электрона в изолированной ячейке, которую можно представить как

$$E_1 = \Delta H + E_{at}, \quad (2)$$

где ΔH — энтальпия атомизации, E_{at} — энергия низшего состояния валентного электрона в изолированном атоме. На рис. 1(1) показана качественная зависимость полной энергии электрона от его расстояния относительно центра нейтральной сферы (ВЗ). Положение минимума кривой определяет радиус сферы r_s .

В результате удаления из металла некоторой части электронов q возникает некомпенсированный заряд, что приводит к уменьшению энергии связи электрона рис. 1(2), соответственно к

уменьшению величины ΔH и одновременно увеличению размера ячейки r_s .

Если доля удаленных электронов q_c удовлетворяет условию

$$E_1(q_c) \approx E_{at}, \quad (3)$$

т.е. энтальпия атомизации близка к нулю, металл теряет устойчивость и разрушается. Ионам металла становится энергетически выгодно превращаться в отдельные атомы, что нарушает устойчивость металла и приводит к полному разрушению кристаллической структуры, т.е. вещество перестает быть металлом.

Квантово-механический расчет зависимости энергии связи от параметра q является довольно сложной самосогласованной задачей, требующей решения уравнения Шредингера с граничным условием, зависящим от q [4]. В работе [5] был предложен другой подход, основанный на применении теоремы Гельмана—Фейнмана, позволяющий получать результаты для разных моделей металла на основе единого подхода.

3. ТЕОРЕМА ГЕЛЬМАНА—ФЕЙНМАНА. ЭНЕРГИЯ ЭЛЕКТРОНА ДЛЯ ЗАРЯЖЕННОЙ СФЕРЫ ВЗ

Гамильтониан квантовой системы всегда содержит некоторые переменные, не определяющие степени свободы этой системы. От этих величин будут зависеть как волновые функции, так и полная энергия такой системы. Теорема Гельмана—Фейнмана позволяет связать собственные значения стационарного гамильтониана с такими величинами и найти зависимость между полной энергией системы и этими переменными [6, 7]. В качестве параметра был выбран параметр λ (1), определяющий величину некомпенсированного заряда внутри сферы (ВЗ).

Теорема утверждает, что для вычисления производной от полной энергии по такому параметру λ достаточно рассчитать среднее значение производной гамильтониана системы по этому параметру

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda} = \frac{\left\langle \bar{\Psi}_\lambda \left| \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right| \Psi_\lambda \right\rangle}{\langle \bar{\Psi}_\lambda | \Psi_\lambda \rangle}, \quad (4)$$

где Ψ_λ — волновая функция электронов, находящихся внутри заряженной сферы (ВЗ). Как отмечено в [8], теорема Гельмана—Фейнмана (4) выполняется не только для точных волновых функций, являющихся решением уравнения Шредингера, но также для приближенных функций, которые рассматриваются как вариационные параметры, позволяющие получить наилучшее приближение для многоэлектронной системы.

Следуя работе [5], будем полагать, что отдельный электрон массой m_e имеет элементарный за-

ряд e . В результате удаления части электронов q , число оставшихся, согласно (1), равно λ . Далее используются атомные единицы, причем значение борковского радиуса a_B , который выбирается в качестве масштаба длины, и постоянная Ридберга, определяющая единицу энергии, считаются инвариантами.

Используем масштабные преобразования по числу электронов:

$$\begin{aligned} m_e &\rightarrow \lambda m_e; & e &\rightarrow \lambda e; & E_\lambda^F &\rightarrow \lambda^{-\frac{1}{3}} E_{\lambda=1}^F; \\ \mathbf{p}_\lambda &\rightarrow \lambda^{\frac{1}{3}} \mathbf{p}_{\lambda=1}; & U_\lambda &\rightarrow \lambda U_{\lambda=1}, \end{aligned} \quad (5)$$

где E^F , $\mathbf{p}$ и U – энергия Ферми, импульс и потенциальная энергия электронов проводимости. С учетом (5) теорема Гельмана–Фейнмана (4) записывается как

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda} = \int \bar{\psi}_\lambda \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \psi_\lambda dV_\lambda + E_\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \int \bar{\psi}_\lambda \psi_\lambda dV_\lambda. \quad (6)$$

Волновая функция электронов внутри сферы (ВЗ) в условиях их дефицита удовлетворяет условию нормировки

$$\int \bar{\psi}_\lambda \psi_\lambda dV_\lambda = \lambda. \quad (7)$$

Следует отметить, что для нейтральной ячейки (ВЗ) $\lambda = 1$ и последнее слагаемое в формуле (6) отсутствует.

4. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ СФЕРЫ (ВЗ) В УСЛОВИЯХ ЭЛЕКТРОННОГО ДЕФИЦИТА

Состояние электронов проводимости нейтральной сферы (ВЗ) описывается волновой функцией $\psi_{\lambda=1} = \psi_1$. По мере возникновения дефицита электронов ($\lambda < 1$) меняется их полная энергия рис. 1(2). Согласно масштабным преобразованиям (5), гамильтониан оставшихся электронов внутри сферы может быть записан как:

$$\hat{H}(\lambda) = \lambda^{-\frac{1}{3}} \hat{T}_1 + \lambda \hat{U}_1, \quad (8)$$

где $\hat{T}_1$ и $\hat{U}_1$ – операторы кинетической и потенциальной энергий нейтральной сферы. Энергия связи электронов в такой сфере находится путем минимизации функционала

$$E_1 = \int \bar{\psi}_1 (\hat{T}_1 + \hat{U}_1) \psi_1 dV_1. \quad (9)$$

Как показано в [5], в первом приближении связь между волновыми функциями электронов нейтральной и заряженной сферами может быть представлена как

$$\psi_\lambda \approx \pm \sqrt{\lambda} \psi_1. \quad (10)$$

В соответствии с рис. 1(2) при возникновении электронного дефицита радиус сферы (ВЗ) увеличивается и объем сферы становится

$$dV_\lambda = \frac{dV_1}{\lambda}. \quad (11)$$

Подставим соотношения (8), (10) и (11) в формулу (6) после минимизации функционала (9). Исключим, согласно (9), потенциальную энергию $\hat{U}_1$ электронов, находящихся в нейтральной сфере. В результате сделанных преобразований, основное уравнение, определяющее зависимость энергии связи электронов E_1 в заряженной и нейтральной сферах от среднего числа электронов, будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{dE_1(\lambda)}{d\lambda} - E_1(\lambda = 1) &= \\ = E_1(\lambda) - \left\{ 1 + \frac{1}{3\lambda^{4/3}} \int \bar{\psi}_1 \hat{T}_1 \psi_1 dV_1 \right\} &= \\ = E_1(\lambda = 1) - \left\{ 1 + \frac{1}{3\lambda^{4/3}} \right\} \bar{T}_1, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\bar{T}_1$ – среднее значение кинетической энергии электрона проводимости в нейтральной сфере. Уравнение (12) позволило связать расчетные параметры при наличии дефицита электронов ($\lambda < 1$) с параметрами нейтральной сферы ($\lambda = 1$), оценка которых, в свою очередь, может быть получена на основе модели твердого тела или экспериментальных данных.

5. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

В дальнейших расчетах будем предполагать, что любой функционал, вычисляемый в некоторой точке пространства, однозначно зависит только от локальной электронной плотности в этой точке. В таком приближении в каждой точке пространства можно использовать соотношения, соответствующие однородному электронному газу, с учетом ее изменения в разных точках пространства. Такое приближение называют моделью локальной аппроксимации плотности (Local Density Approximation, LDA). В рамках приближения (LDA) первоначально неоднородная система рассматривается как локально однородная с энергией, зависящей электронной плотности [9, 10]

$$\bar{T}(n(\mathbf{r})) = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) t(n(\mathbf{r})), \quad (13)$$

т.е. как совокупность взаимодействующих малых объемов однородного электронного газа, что является достаточно хорошей моделью для описания систем с медленно (порядка длины волны де Бройля) меняющейся в пространстве плотности. В модели учитывается, что при нахождении электрона в некоторой точке количество других элект-

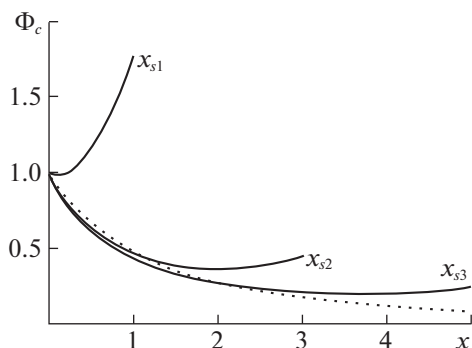


Рис. 2. Решение уравнения Томаса–Ферми для сферы ВЗ при различных ее размерах.

тронов уменьшается по сравнению с моделью свободного электронного газа. Непосредственный расчет средней кинетической энергии был выполнен в рамках модели Томаса–Ферми (ТФ) [11–13]. В этом случае плотность кинетической энергии (13) записывается как [1]

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \frac{3}{10} (3\pi^2 \rho(\mathbf{r}))^{2/3}. \quad (14)$$

Интегрирование плотности кинетической энергии в единице объема $\epsilon(\mathbf{r})$ по всему пространству дает среднее значение кинетической энергии отдельного электрона. Модель (ТФ), успешно применялась в расчетах атомных параметров [14], поверхностных свойств металлов [15], взаимодействий мощных лазерных импульсов с кластерами [16] и других приложениях. Воспользуемся этим приближением для оценки плотности электронов проводимости в отдельной сфере (ВЗ).

При расчете электронной плотности вводится функция Φ , которая является решением универсального уравнения (ТФ)

$$\frac{d^2 \Phi(x)}{dx^2} = \Phi(x) \sqrt{\frac{\Phi(x)}{x}}. \quad (15)$$

В формуле (15) использованы следующие стандартные обозначения:

$$x = br, \quad b = \left\{ \frac{8\sqrt{2Z}}{3\pi} \right\}^{\frac{2}{3}}. \quad (16)$$

Электронная плотность системы выражается через функцию Φ согласно

$$\rho(r) = \frac{2}{3\pi^2} \left\{ Z \frac{\Phi(br)}{r} \right\}^{\frac{3}{2}}. \quad (17)$$

Уравнение (15) решается с определенными граничными условиями. Так, при $r \rightarrow 0$ потенциал переходит в кулоновский потенциал иона и

$\Phi(0) = 1$. Согласно теореме Блоха, волновая функция должна периодически меняться при переходе между ячейками. Следовательно, она должна иметь горизонтальную касательную на границе сферы r_s [17], т.е. должно выполняться условие:

$$\left. \frac{\partial \rho(r)}{\partial r} \right|_{r_s} = 0. \quad (18)$$

Условие (18) нарушает универсальность функции (ТФ), которая имеет место в расчетах атомных параметров. Чтобы отметить это обстоятельство, далее будем обозначать функцию (ТФ) для электронов внутри аппроксимирующей сферы через Φ_c . С учетом (18) уравнение (ТФ) и граничные условия для электронов проводимости будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Phi_c(x)}{dx^2} &= \Phi_c(x) \sqrt{\frac{\Phi_c(x)}{x}}, \quad \Phi_c(0) = 1, \\ x_s \frac{d\Phi_c(x_s)}{dx} - \Phi_c(x_s) &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

На рис. 2 приведены результаты численных расчетов функции Φ_c для нескольких значений радиусов аппроксимирующих сфер x_s . Для сравнения, приведены значения универсальной функции Φ (пунктирная кривая) являющейся решением классического (15) уравнения (ТФ).

На рис. 3 показана радиальная плотность распределения электронов в сфере (ВЗ) для непериодических и переходных металлов. Вертикальными линиями показаны значения радиусов аппроксимирующих сфер этих металлов.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

В приближении локальной плотности (LDA), с использованием функции плотности электронов проводимости (17), (19) был проведен расчет средней кинетической энергии (13) электронов проводимости в зависимости от атомного номера металла Z . Результаты расчетов показаны на рис. 4. Для сравнения приведены результаты расчетов в модели свободного электронного газа (FEG) (Free-Electron Gas). Горизонтальными линиями отмечено среднее по всей совокупности металлов значение кинетической энергии в обоих приближениях.

Результаты расчета зависимости критического числа q_c электронов, удовлетворяющих условию (3), с использованием приближений (FEG) и (LDA) приведены на рис. 5. Горизонтальными линиями отмечено среднее по всем металлам относительное число электронов, удаление которых приводит к их разрушению.

По способу заполнения атомных оболочек металлы разделяют на две группы — непериодические и переходные. К непериодическим металлам относят-

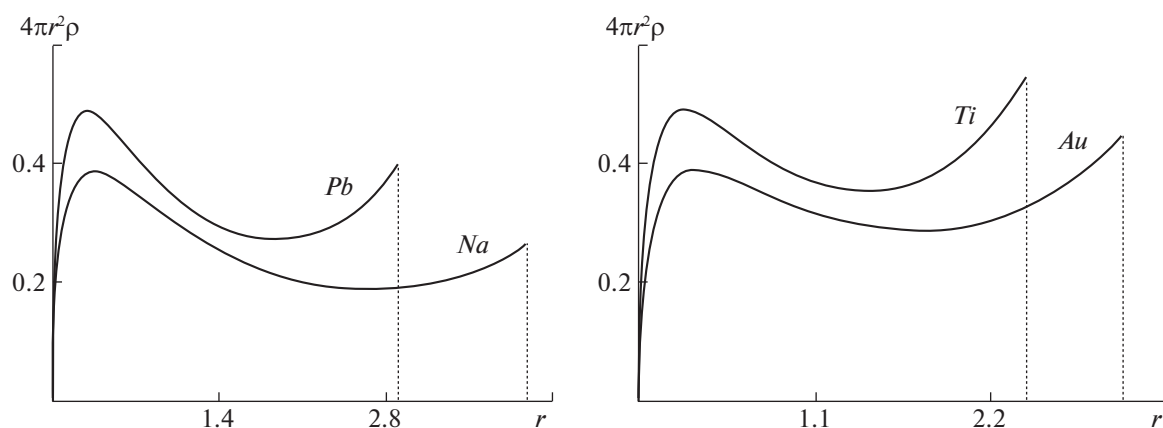


Рис. 3(1). Радиальная плотность распределения электронов в переходных металлах. (2). Радиальная плотность распределения электронов в непереходных металлах.

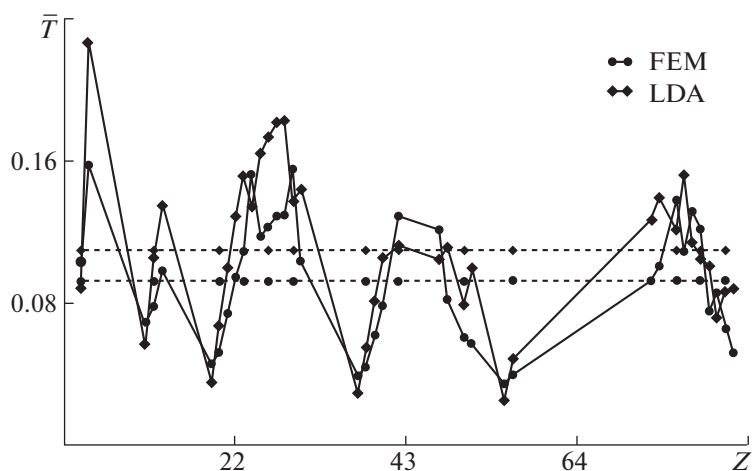


Рис. 4. Средняя кинетическая энергия электронов проводимости, рассчитанная в приближениях FEM и LDA.

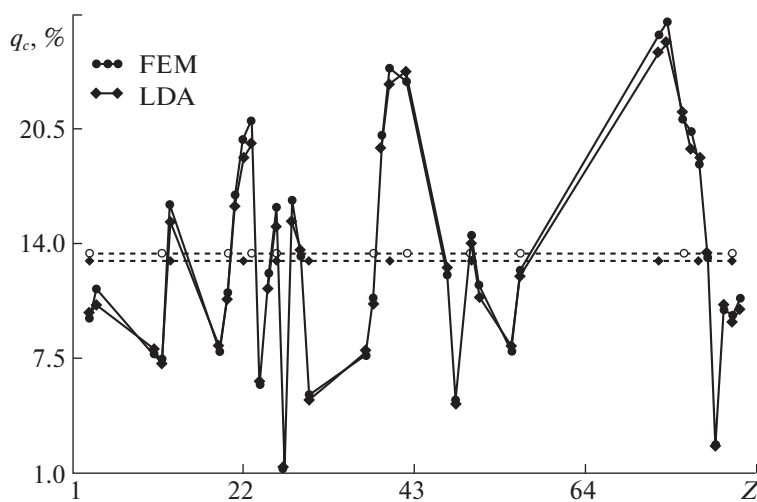


Рис. 5. Критические значения параметров q_c (3), при которых происходит разрушение металла. Расчеты на основе моделей FEM и LDA.

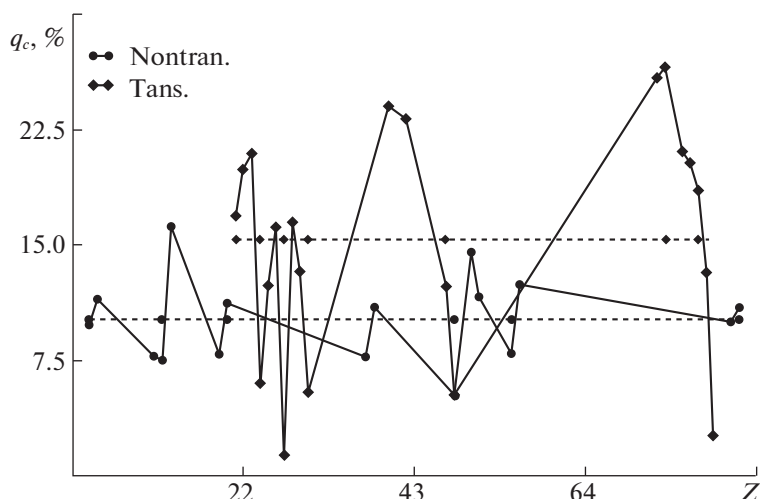


Рис. 6. Критические значения параметров q_c (3), при которых происходит разрушение переходных и непереходных металлов. Горизонтальной пунктирной линией показаны средние значения параметра устойчивости q_c по совокупности соответствующих групп металлов.

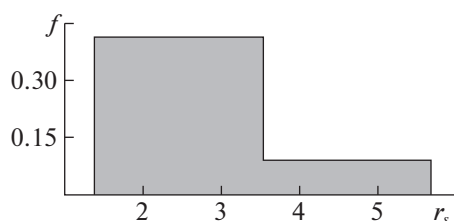


Рис. 7. Плотность распределения радиусов r_s аппроксимирующих сфер (B3).

ся 22 элемента. Среди них в настоящей работе рассчитывались критические параметры следующих элементов: Li, Be, Na, Mg, Al, K, Ca, Rb, Sr, Sn, Sb, Cs, Ba, Pb, Bi. К переходным металлам относят 37 элементов, среди которых были рассчитаны соответствующие параметры элементов: Sr, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Zr, Mo, Ag, Cd, Ta, W, Os, Ir, Pt, Au, Hg. На рис. 6 представлена зависимость критического числа q_c отдельно для переходных и непереходных металлов.

Плотность распределения f металлов по радиусам аппроксимирующих сфер r_s рис. 7 позволяет так же разделить металлы на две группы, которые отличаются размерами области локализации электронов проводимости.

Таблица 1.

	r_s	$\bar{r}_s$	$\bar{T}$	$\bar{q}_c$, %
I	< 3.5	2.55	0.10	13.0
II	≥ 3.5	4.39	0.06	10.0

В табл. 1 приведены значения величин, характеризующих каждую группу — значения радиуса сферы (B3), средние по совокупности элементов величины $\bar{r}_s$, кинетические энергии электронов и параметры устойчивости металла q_c . Как видно из данных, приведенных в табл. 1, чем меньше радиус сферы, тем больше средняя кинетическая энергия электронов и тем большее количество электронов надо удалить для разрушения металла.

На рис. 8 представлена зависимость критического параметра устойчивости q_c для металлов периодической системы.

На представленном рисунке хорошо прослеживается деление металлов на выбранные группы. Пунктирными линиями показаны средние значения параметра устойчивости табл. 1 (последний столбец).

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На базе теоремы Гельмана—Фейнмана для изолированной ячейки Вигнера—Зейца был проведен расчет зависимости энергии связи от дефицита электронов. Расчеты распределения электронной плотности внутри аппроксимирующей сферы (B3) основывались на использовании приближения (LDA). Это приближение позволяет рассматривать неоднородную систему как совокупность малых объемов однородного электронного газа. Оно оправдано, если плотность является медленно меняющейся функцией на расстояниях порядка де-бройлевской длины волны электрона.

Для расчета радиального распределения электронов использовалась модель (ТФ) с граничным

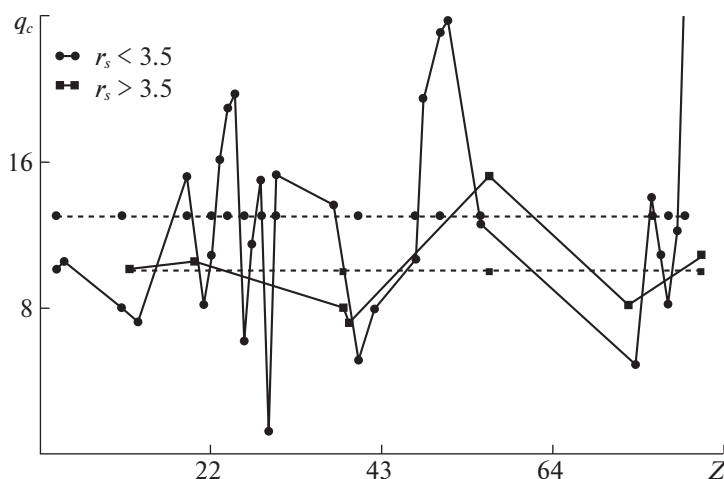


Рис. 8. Критические значения параметров q_c (3), при которых происходит разрушение металлов в зависимости от размеров области их локализации.

условием (19) на поверхности сферы (ВЗ), задаваемым теоремой Блоха. В этой модели считается, что электроны являются полностью делокализованными, их волновые функции являются комбинацией плоских волн. По результатам проведенных расчетов можно сделать следующие заключения:

- расчеты параметра устойчивости металлов в приближениях (FEG) и (LDA) дают близкие значения параметра устойчивости q_c . На рис. 9 показаны зависимости плотности распределения числа металлов $n(q_c)$ в разных диапазонах значений параметра устойчивости q_c . Как видно из приведенного рисунка распределения практически совпадают. Средние значения параметра устойчивости 13.4% в приближении (FEG) и 13.0% — (LDA). Полученное совпадение является следствием предположения о медленности изменения электронной плотности в модели (LDA) по сравнению с постоянным значением в модели (FEG);
- последовательность заполнения электронных оболочек атомов металлов делает возможным их разделение на две группы: непереходные

и переходные металлы. С точки зрения ФТТ непереходные и переходные металлы различаются величиной энтальпии атомизации. Для непереходных металлов ее среднее значение (по всем непереходным металлам) 0.069, тогда как для переходных — в 2 раза больше — 0.156, в то время как отличия средней энергии ионизации атомов не превышают 20%. Разница в энтальпиях приводит к разбросу в значениях параметра устойчивости, что и представлено на рис. 6;

- разделить существующие металлы на две группы возможно и по другому параметру — размеру ячеек (ВЗ), т.е. значениям радиусов аппроксимирующих сфер (рис. 7). Результаты расчетов показали существования закономерности в зависимости параметра q_c от среднего (по совокупности металлов) размера сферы (рис. 8). Качественно, такую зависимость можно объяснить на основе принципа неопределенности. Чем меньше средняя кинетическая энергия, которую имеет электрон внутри сферы (ВЗ), тем большую область пространства он может занимать, что количественно и подтверждается данными табл. 1;

- металлы, параметры которых рассчитывались в настоящей работе, в большей части имеют три типа кристаллических решеток body centred cubic (bcc), hexagonal closed packed (hcp) и cubic close packed (ccp). В настоящей работе рассчитывались параметры 11 металлов с решеткой bcc, 9 — решеткой ccp и 10 с решеткой hcp. Найдено, что не существует какой либо зависимости параметров от типа решетки. Отсутствие такой зависимости можно объяснить использованием аппроксимации ячейки (ВЗ) сферой, не учитывающей индивидуальные особенности строения решетки металла и характеризующейся только таким интегральным параметром, как ее размер;

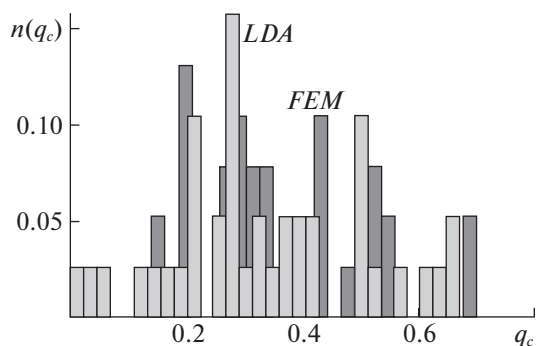


Рис. 9. Плотность распределения металлов по интервалам значений параметра устойчивости q_c металлов.

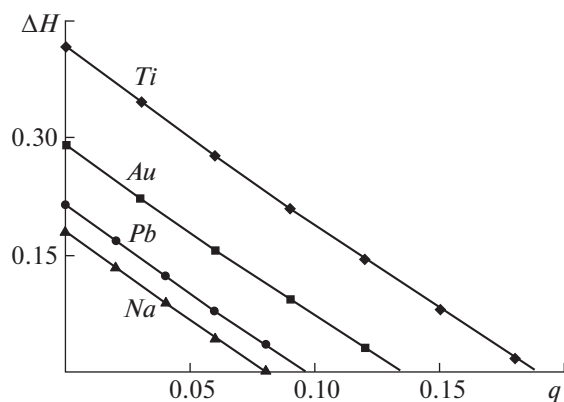


Рис. 10. Зависимость энthalпии атомизации от среднего числа удаленных электронов q .

- в соответствии с формулой (2) и рис. 1 значение энthalпии атомизации зависит от среднего числа электронов λ , находящихся в сфере (ВЗ). На рис. 10 показана зависимость энthalпии ΔH от среднего числа удаленных электронов $q = 1 - \lambda$ для переходных Ti, Au и непереходных Na, Pb металлов.

Как видно из рис. 10, зависимость практически является линейной убывающей функцией. При значениях $q = q_c$ энthalпия принимает нулевое значение и металл разрушается. Чем меньше величина энthalпии атомизации ΔH , тем меньше, в среднем, надо удалить электронов из сферы (ВЗ) для разрушения металла. На рис. 11 показана зависимость параметра устойчивости q_c от величины энthalпии ΔH . Следует отметить, что эта зависимость хорошо аппроксимируется линейной функцией (прямая линия);

- одним из важных параметров, влияющих на устойчивость электронов проводимости в сфере (ВЗ) является энергия атомизации E_{at} , т.е. энергия образования связанного состояния атома металла. На рис. 12 представлена зависимость критического значения параметра устойчивости q_c от значения наименьшей (по абсолютной величине) энергии связанного состояния атома металла.

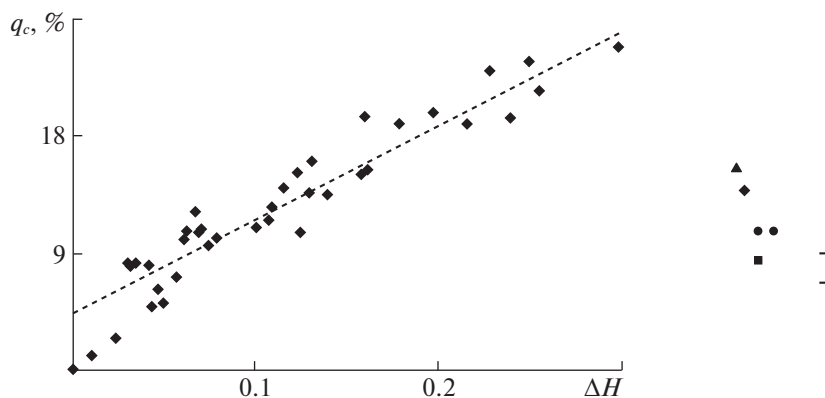


Рис. 11. Зависимость энthalпии атомизации от значений критических параметров q_c .

Согласно (2), чем большая энергия требуется для атомизации ионного остова, тем меньше величина энthalпии атомизации и требуется удалить меньшее количество электронов из сферы (ВЗ). Оставшиеся электроны будут захвачены ионным остовом с образованием нейтрального атома, что повлечет за собой разрушение металла.

Полученные результаты хорошо согласуются с результатами расчетов в модели равномерно заряженных шаров [4], что свидетельствует об удачном выборе энергии взаимодействия. Следует отметить, что если волновые функции электронов известны точно, то теорема Гельмана–Фейнмана позволяет точно вычислить зависимость собственного значения гамильтониана от параметра λ . Сделанная в настоящей работе замена волновых функций (10) при наличии дефицита электронов волновой функцией в нейтральной ячейке, привела к некоторому изменению теоремы Гельмана–Фейнмана по сравнению с первоначальной формой [8].

Предложенный выше метод позволяет применять в расчетах не только использованные приближения (FEG) и (LDA), но и другие модели, волновые функции которых могут существенно различаться. Так в модели сильной связи волновая функция электрона проводимости не сильно отличается от его волновой функции в атоме с одной стороны. С другой стороны, в модели почти свободных электронов волновая функция является волной де Бройля.

Расчеты средней кинетической энергии на основе модели свободных электронов и модели локальной плотности показали их малое отличие друг от друга. Это позволяет делать оценки параметров электронов проводимости на основе модели свободных электронов, что значительно упрощает расчеты и позволяет наглядно интерпретировать полученные результаты. Необходимо отметить, что в настоящей работе не учитывались вклады от обменной и корреляционной энергии.

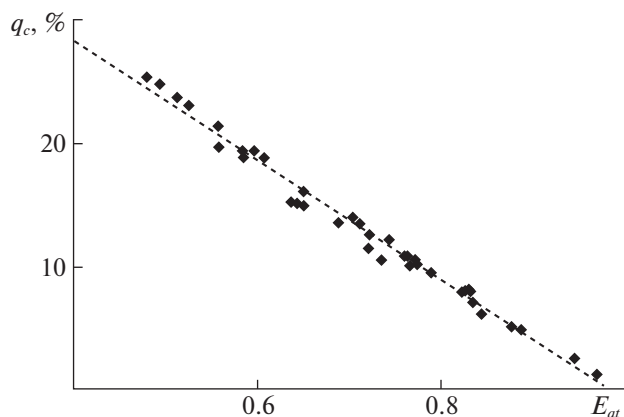


Рис. 12. Значения критических параметров q_c от энергии низшего состояния валентного электрона атомов металлов.

В связи с вышеизложенным представляет интерес экспериментальная проверка полученных оценок путем исследования инерциальных взрывов металлов за счет его торможения о преграду. Кроме того, учитывая практически линейную зависимость (рис. 10), возможно экспериментальное измерение энтальпии при небольшом электронном дефиците с последующей его экстраполяцией до значения $\Delta H = 0$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1966. 472 с.
2. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979. Т. 1. 399 с.
3. Журавлев В.А. Лекции по квантовой теории металлов. М.: Институт компьютерных исследований, 2002. 240 с.
4. Ерохин К.М., Калашиников Н.П., Нестерихин Ю.Е., Ольчак А.С. Кулоновский взрыв щелочных и переходных металлов при частичном удалении электронов проводимости. Доклады РАН, 2010. Т. 436. № 4. С. 1.
5. Ерохин К.М., Калашиников Н.П. Зависимость энергии связи кристаллической решетки металлов от среднего числа электронов проводимости. Физика твердого тела, 2017. Т. 59. Вып. 9. С. 1667.
6. Гельман Г. Квантовая химия. Объединенное научно-техническое издательство НКТП СССР, 1937. 546 с.
7. Feynman R.P. Forces in Molecules // Phys. Rev. 1939. V. 56. P. 340.
8. Байков Ю.А., Кузнецов В.М. Квантовая механика. М.: Эл. изд. БИНОМ, 2013. 291 с.
9. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. B. 1964. V. 136. P. 864.
10. Кон В. Электронная структура вещества — волновые функции и функционал плотности // УФН. Т. 172. № 3. С. 336.
11. Киржищ Д.Д., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. Статистическая модель вещества // УФН. 1975. Т. 117. В. 1. С.4.
12. Теория неоднородного электронного газа, под ред. Лундквиста С., Марча Н. Мир. М., 1987. 397 с.
13. March N.H. Electron Density Theory of Atoms and Molecules. Academic Press, 1992. ISBN 978-0-12-470525-8.
14. Feynman R.P., Metropolis N., and Teller E. Equations of state of elements based on the generalized Thomas–Fermi theory // Phys. Rev. 1949. V. 75. P. 1561.
15. Партенский М.В. Самосогласованная электронная теория металлической поверхности // УФН. 1979. Т. 128. В. 1. С. 69.
16. Rusek M., Lagarde H., and Thomas Blenski I T. Cluster explosion in an intense laser pulse: Thomas–Fermi model // Phys. Rev. A. 2000. V. 63. 013203.
17. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 789 с.
18. Ерохин К.М., Калашиников Н.П. Расчет устойчивости ячейки Вигнера–Зейца металлов в условиях частичного нарушения их электронейтральности в модели свободных электронов. Сб. Высшая школа. Новые технологии науки, техники, педагогики: материалы Всероссийской научно-практической конференции “Наука — Общество — Технологии — 2018”. М. 2018. 612 с.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta “MIFI”, 2019, vol. 8, no. 4, pp. 301–310

Stability of a Wigner–Seitz cell During Partial Violation of Electroneutrality in the LDA-approximation

K. M. Erokhin^{a, #} and N. P. Kalashnikov^{b, ##}

^a Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education Moscow Polytechnic University, Moscow, 107023 Russia

^b National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[#]e-mail: kmekm@yandex.ru

^{##}e-mail: kalash@mephi.ru

Received April 4, 2019; revised May 19, 2019; accepted May 28, 2019

Abstract—On the basis of the Gellmann–Feynman theorem for an isolated Wigner–Zeitz cell, the dependence of the binding energy on the electron deficit has been calculated. The critical parameter of the average number of electrons the removal of which leads to the destruction of a given element has been estimated for 38 metals. The stability of metals is violated when removing about 13.1–13.4% of the available conduction electrons, and the critical charge depends nonmonotonically on the atomic number of the element. The calculations have been performed within the local density model and compared to the results obtained using the free electron model. It has been shown that the calculations within these models give close results, which allows us to use the free electron gas approximation for further estimates. Analysis of the results has showed that the critical parameter determining the stability of the cell depends on the classification among transition or non-transition metals and on its average size. It has been found that the main parameters affecting the stability of the metal are the enthalpy of atomization and the energy of the lowest state of the valence electron in an isolated atom. Calculations have shown that the critical parameter determining the stability of the metal depends almost linearly on the enthalpy of atomization, which allows us to extrapolate experimental data obtained by measuring the enthalpy in a small electron deficit to its critical value.

Keywords: Wigner–Seize cell, Hellmann–Feynman theorem, the deficit of electrons, metals, Thomas–Fermi theory, stability of the lattice

DOI: 10.1134/S2304487X19040035

REFERENCES

1. Zajman Dzh., *Printsipy teorii tvyordogo tela*. [Principles of the theory of solids] M.: Mir, 1966. 472 p.
2. Ashcroft N. W. and Mermin N. D. Solid State Physics Holt, Rinehart and Winston, New York NY u. a. ISBN 0-03-049346-3 (1976).
3. Zhuravlev V.A. *Leksii po kvantovoj teorii metallov*. [Lectures on the quantum theory of metals] M.: Institut komp'yuternykh issledovaniy, 2002. 240 p.
4. Erokhin K.M., Kalashnikov N.P., Nesterikhin Yu.E., Ol'chak A.S. Kulonovskij vzryv shhelochnykh i perekhodnykh metallov pri chastichnom udalenii ehlektronov provodimosti. [Coulomb explosion of alkali and transition metals with partial removal of conduction electrons] *Doklady RAN*, 2010, vol. 436, no. 4, p. 1 (in Russian).
5. Erokhin K.M., Kalashnikov N.P. Zavisimost' ehnergii svyazi kristallicheskoj reshetki metallov ot srednego chisla ehlektronov provodimosti. [The dependence of the binding energy of the crystal lattice of metals on the average number of conduction electrons.] *Fizika tverdogo tela*, 2017, vol. 59, no. 9, p. 1667 (in Russian).
6. Gel'man G. *Kvantovaya khimiya*. [Quantum chemistry] Ob'edinennoe nauchno-tehnicheskoe izdatel'stvo NKTP SSSR, 1937. 546 p.
7. Feynman R.P. Forces in Molecules. *Phys. Rev.*, 1939, vol. 56, p. 340.
8. Bajkov Yu. A., Kuznetsov V. M. *Kvantovaya mekhanika*. [Quantum Mechanics] M.: EHL. izd. BINOM, 2013. 291 p.
9. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev. B.*, 1964, vol. 136, p. 864.
10. Kohn W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter — wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*, Vol. 71, No. 5, October 1999 0034-6861/99/71(5)/1253(14).
11. Kirzhiits D.D., Lozovik Yu.E., Shpatakovsnaya G.V. Statisticheskaya model' veshhestva. [Statistical model of a substance] *UFN*, 1975, vol. 117, no. 1, p. 4 (in Russian).
12. Teoriya neodnorodnogo ehlektronnogo gaza [The Theory of Inhomogeneous Electron Gas], pod red. Lundkvista S., Marcha N. M.: *Mir*, 1987. 397 p.
13. March N.H. Electron Density Theory of Atoms and Molecules. *Academic Press*, 1992. ISBN 978-0-12-470525-8.
14. Feynman R.P., Metropolis N., and Teller E. Equations of state of elements based on the generalized Thomas–Fermi theory. *Phys. Rev.*, 1949, vol. 75, p. 1561.
15. Partenskij M.V. Samosoglasovannaya ehlektronnaya teoriya metallicheskoj poverkhnosti. [Self-consistent electron theory of a metal surface] *UFN*, 1979, vol. 128, no. 1, p. 69 (in Russian).
16. Rusek M., Lagadec H., and Blenski T. Cluster explosion in an intense laser pulse: Thomas–Fermi model. *Phys. Rev. A*, 2000, vol. 63, 013203.
17. Kittel' Ch. *Vvedenie v fiziku tverdogo tela*. [Introduction to solid state physics] M.: Nauka, 1978. 789 p.
18. Erokhin K.M., Kalashnikov N.P. Raschet ustojchivosti yachejki Vignera–Zejca metallov v usloviyah chastichnogo narusheniya ih elektronejtral'nosti v modeli svobodnykh elektronov. [Calculation of the Stability of the Wigner–Seitz Cell in Metals under Conditions of Partial Violation of their Electroneutrality in the Model of Free Electrons]. Sb. Vysshaya shkola. Novye tekhnologii nauki, tekhniki, pedagogiki. [High education. New technologies of science, engineering, pedagogics]. Materialy Vserossijskoj nauchno-prakticheskoy konferencii “Nauka — Obshchestvo — Tekhnologii — 2018” [Proceedings of the All-Russian scientific — practical conference “Science–Society–Technology 2018”]. Russia, Moscow. 2018. In Russian.

Comparing the Consequences Pressure Waves due to MCP pump stops and LOCA in VVER-1000

© 2019 г. Dina Ali Amer^{a, #} and S. P. Nikonov^{b, ##}

^a Alexandria University, Alexandria, 21526 Egypt

^b National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[#]e-mail: Dina.amer@alexu.edu.eg

^{##}e-mail: SPNikonov@mephi.ru

Received March 20, 2019; revised April 30, 2019; accepted May 14, 2019

Abstract—Consider the propagation of pressure waves in emergency situations on the equipment of the circuit for reactor VVER-1000. Here we discuss two situations: an instant rupture (10^{-4}) in the main circulation pipelines of the primary circuit with a double End Break (DEB) and instantaneous stop (10^{-4}) of the main circulating pump. The considered emergency situations are included in the list of different types of reports necessary for VVER safety justification [1]. As a model for investigation we chose the 3rd unit of Kalinin NPP (VVER-1000, model 320). All thermohydraulic and physics data for this are taken from the international standard problem Kalinin-3 [2, 3]. The first analysis for those emergency situations was made in works [4, 5]. For the calculations, the code of improved evaluation ATHLET [6] was used, which is included in the AC2 software package, officially obtained by the national research Nuclear University of MEPhI on the basis of a license agreement with Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) GmbH, Germany [7]. The ATHLET code is certified in Russia for calculations of stationary and transient regimes at reactors with water coolant [8].

We consider in detail the initial period of the accidents, because only at this stage we can observe the strongest amplitude and frequency of pressure fluctuations on NPP elements, which can lead to significant dynamic loads on the structural elements of these objects. This can be estimated either by: joint strength and hydrodynamic calculations, or it is possible to use the results obtained in this work as boundary conditions for the calculation of dynamic loads. The basic reason for the pressure waves in case of instant pump stop was the instant stop of the MCP. But in the case of instant rupture in the pipelines of the first circuit, the main reason is the instant boiling (superheated) of the coolant.

Keywords: VVER-1000, LOCA, Kalinin-3, MCP stop, LOCA, DEB, ATHLET, emergency situations

DOI: 10.1134/S2304487X19040023

1. A BRIEF DESCRIPTION OF THE CALCULATION CODE

The thermohydraulic system code ATHLET (Analysis of THERmalhydraulics of LEaks and Transitions) was originally intended for analysis of the entire spectrum of the leak and transient analyses in PWR and BWR reactors. However, experience with it has shown that it can be successfully used to the full extent for Russian reactors such as VVER and RBMK. ATHLET consists of several basic modules that allow to describe different phenomena in the behavior of thermal hydraulic systems: thermal hydraulic module (TFD), heat exchange and thermal conductivity module (HECU), neutron-kinetic module (NEUKIN) to describe point and one-dimensional kinetics, module to describe the operation of the equipment (GCSM) and fully implicit module for numerical integration (FEBE). Also,

other independent modules can be connected via the main interface. As all information about the program ATHLET can be found in its manual [6], so its description will not be included here.

Quite widely used capabilities of the ATHLET code for linking with various three-dimensional neutron-physical programs in the calculation of the spatial distribution of energy release fields and the spatial distribution of the coolant parameters in the reactor core (up to the sub-cassette), an example are the works [9–13].

2. THE DESIGN SCHEME OF THE SIMULATED POWER PLANT

The design scheme of the plant simulation presented below (Fig. 1) can be attributed to a group of

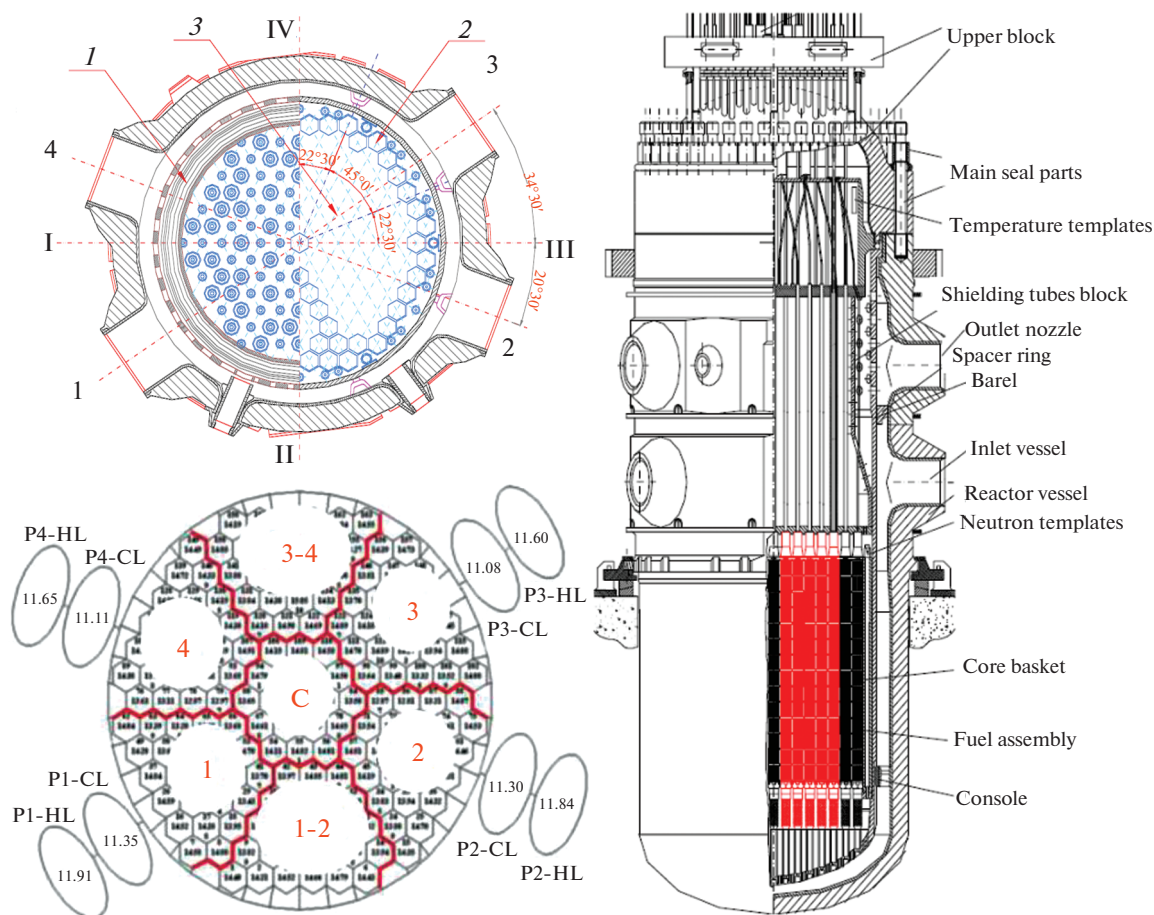


Fig. 1. To the upper left side there is a cross-section along the axis connecting leg. To the Bottom — the core partitioning scheme by seven groups of parallel hydraulic channels (six peripheral ones and central one) — To the right Reactor of Unit 3, Kalinin NPP ‘cross-section of in-core area’.

schemes for the analysis of the behavior of reactors of VVER-1000 type (model 320), which were developed for the code of ATHLET. The detailed description of the simulated power plant was included in [14].

In addition, the scheme of splitting the first circuit of the first loop (Fig. 2) is presented, which is used as an emergency loop when considering these transients. The scheme of splitting the first loop of the first circuit from the output (V-UP4) of the mixing chamber and to the input (V-DC0) of the reactor mixing chamber.

3. MAIN CHARACTERIZATIONS OF THE MODEL

The calculation was carried out with point kinetics, each of the seven selected reactor zones corresponded to a heat-generating element with averaged energy, ob-

tained from the experimental transient state of the core of the standard problem Kalinin-3.

The value of the reactivity coefficients (Doppler, boron, density and temperature for the heat-transfer medium) correspond to the state of the core at the beginning of the experiment, the Kalinin-3 (126 effective day).

Figure 3 shows the model of the first circuit of the first loop, which is the same for other three circuits, except for pump. Also, the model for all components is the same in normal operation and emergency case, except for pump. The hydraulic behavior of a pump in the different states of operation is generally described by empirically developed sets of curves relating pump head and torque to the volumetric flow through the pump and the angular speed of the pump impeller. These curves are a four quadrant curves. Generally,

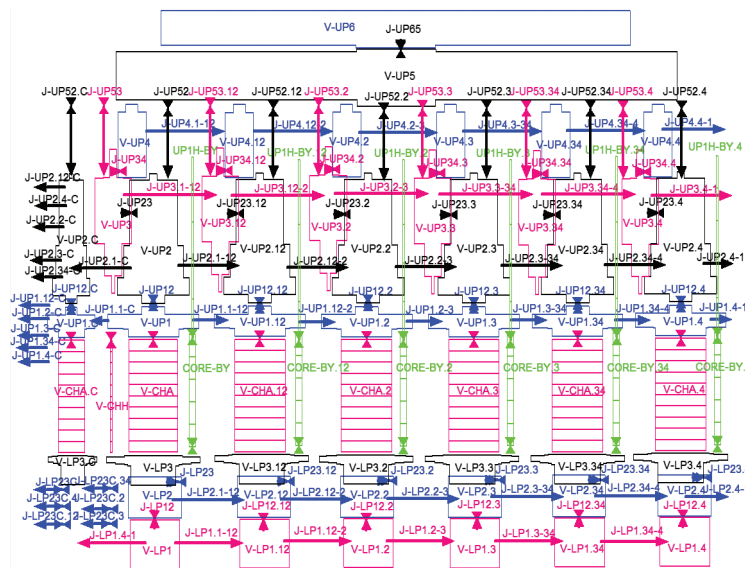


Fig. 2. Nodalization scheme of reactor objects in the primary circuit.

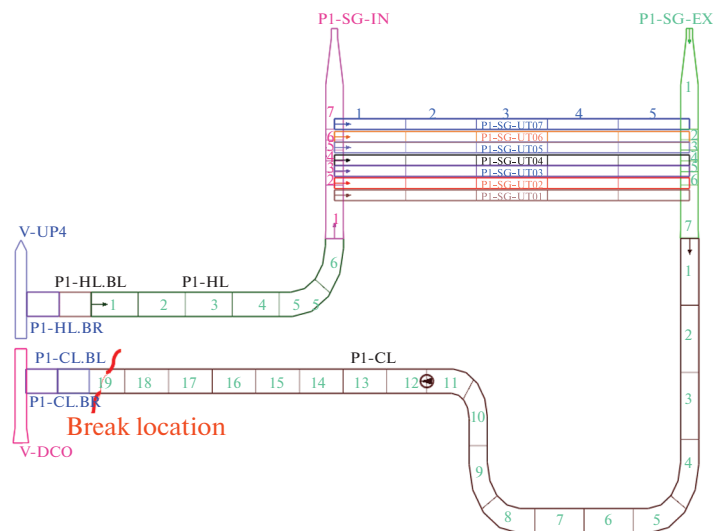


Fig. 3. The scheme of splitting the first circuit of the first loop.

they are supplied by the pump manufacturer for both the pump head and torque.

For each of the considered two emergency situations, will be mentioned the critical breakout models in the code, which is used in these calculations.

3.1. Instant Stop of the MCP

For normal operation, single phase homologous head curve and Single-phase homologous torque curve are used. But for simulating the pump stop,

Pump Model with Speed Control and Single-phase homologous head curve are used.

3.2. LOCA

The BLASI block especially attached to the program ATHLET, where a one-dimensional nonequilibrium model is used. It is based on four conservation equations (water mass, steam mass, total energy, and total impulse) and allows to consider more detailed nodalization of the leak site.

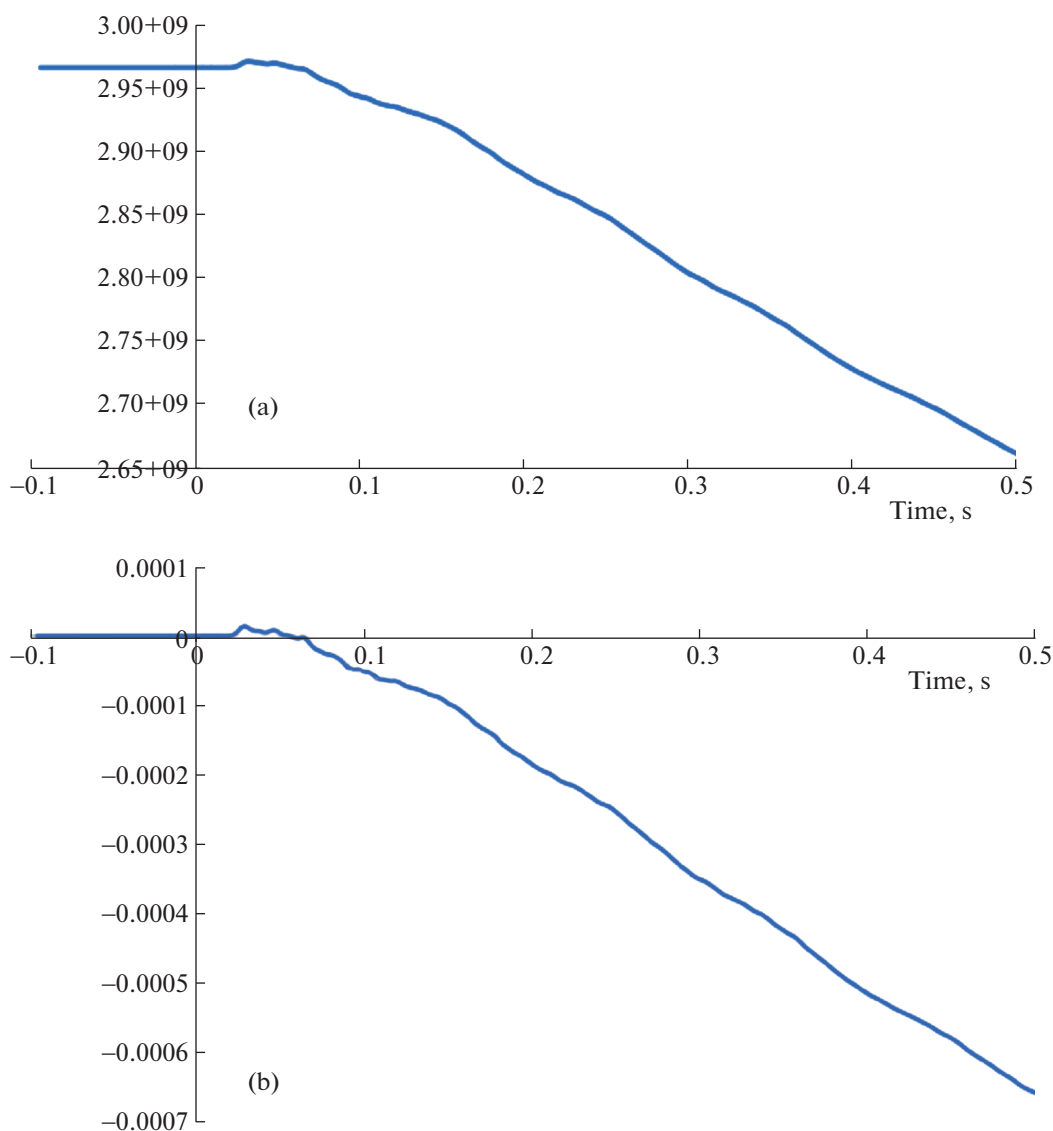


Fig. 4. a) Reactor Power in first 0.5 sec after emergency situation due to Instant Stop of the MCP. b) Reactor Total Reactivity in first 0.5 sec after emergency situation due to Instant Stop of the MCP.

4. RESULTS AND DISCUSSION

Starting with the reactor power, figure 4a and 4b show within the first 0.5 sec after the emergency due to MCP.1 stop, the reactor power and the reactor total reactivity have the same behavior as a direct rapid decreasing.

In case of LOCA, figures 5a and 5b show the same behavior for reactor power following its reactivity, but with a peak of increasing before 0.1 sec.

Figure 6 shows that in case of MCP stops, the average coolant temperature in the core rapidly in the a

0.5 second by more than 1 degree from 306.3 to 307.8. While in the case of LOCA, the increasing in coolant temperature in the core, which shown in Fig. 7, is higher, i.e. from 306 to 313°C.

Considering the average fuel temperature, Fig. 8 illustrates the decrease in fuel temperature within the first 0.5 sec by 2°C, comparing to figure 8 which shows the average fuel temperature in the case of LOCA by decreasing about 4°C within the same period of time.

In order to get a physical explanation for the previous behavior of power, reactivity and temperatures, it is necessary to follow the change in the coolant mass

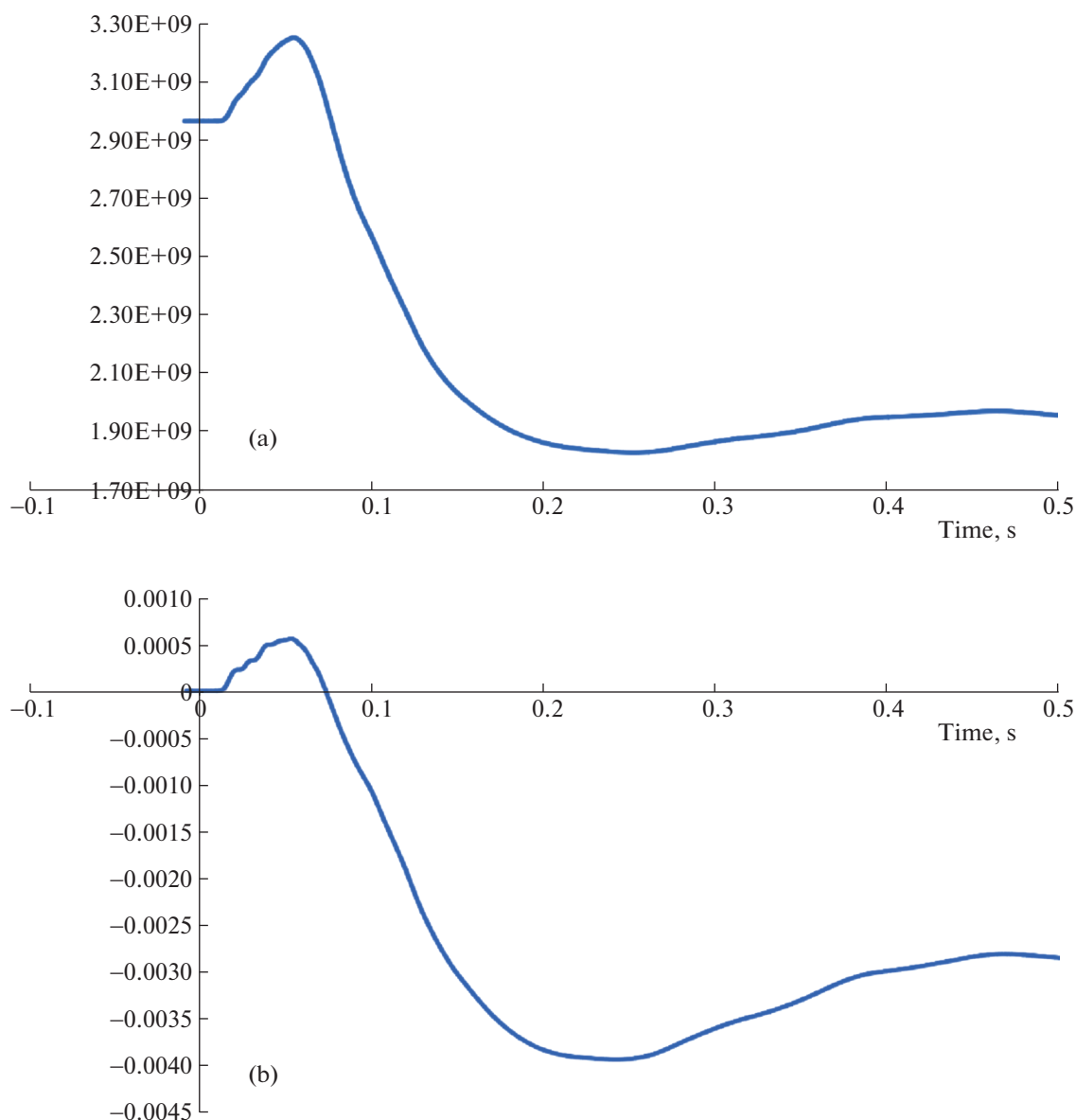


Fig. 5. a) Reactor Power in first 0.5 sec after emergency situation due to *LOCA*. b) Reactor Total Reactivity in first 0.5 sec after emergency situation due *LOCA*.

flow rate into and out from the core. Hence, Figs. 10 and 11 show the coolant mass flow rate into the core in the first 0.5 sec after the emergence due to instant stop of the MCP.1 and *LOCA* respectively from the 4 coolant loops. As expected, the decreasing rate is more rapid in case of *LOCA* than in MCP.1 stop from the first loop.

Observing also the coolant mass flow rate out from the core, Figs. 12 and 13 show it in case of MCP.1 stop and *LOCA* respectively. Comparing the two cases, it is

obviously that in the case of *LOCA* the effect is extended to include the other three loops specially the fourth loop which is the closest – from the geometry point of view – to the emergency loop. As shown before in Fig. 1.

Finally, it is important to consider the pressure difference as it is a main parameter from the safety point of view. Figure 14 and 15 illustrate the pressure difference in the main components: reactor, core, MCP.1 and the steam generator. As a first observation the behavior change in a wavy way having ups and downs peaks. For

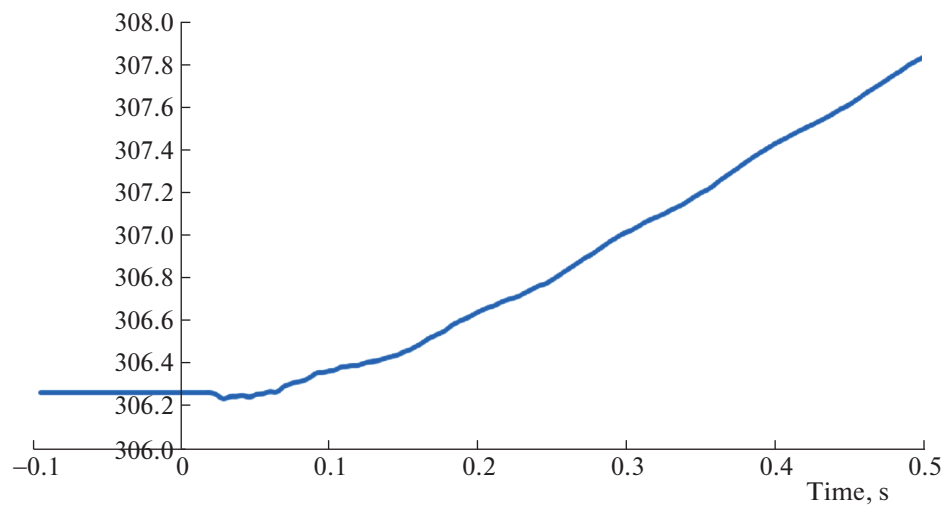


Fig. 6. Average Coolant Temperature in core in first 0.5 sec after emergency situation due to Instant Stop of the MCP.1.

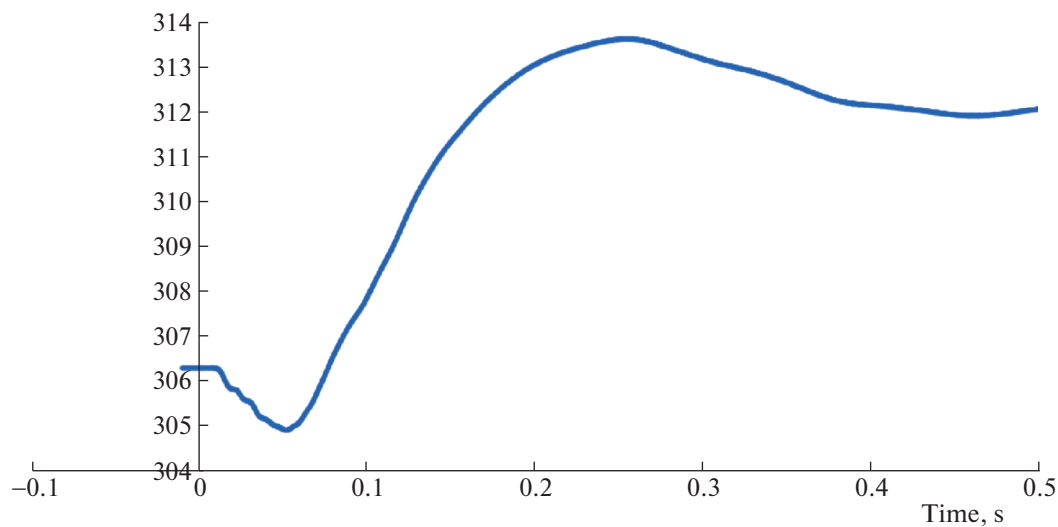


Fig. 7. Average Coolant Temperature in core in first 0.5 sec after emergency situation due to LOCA.

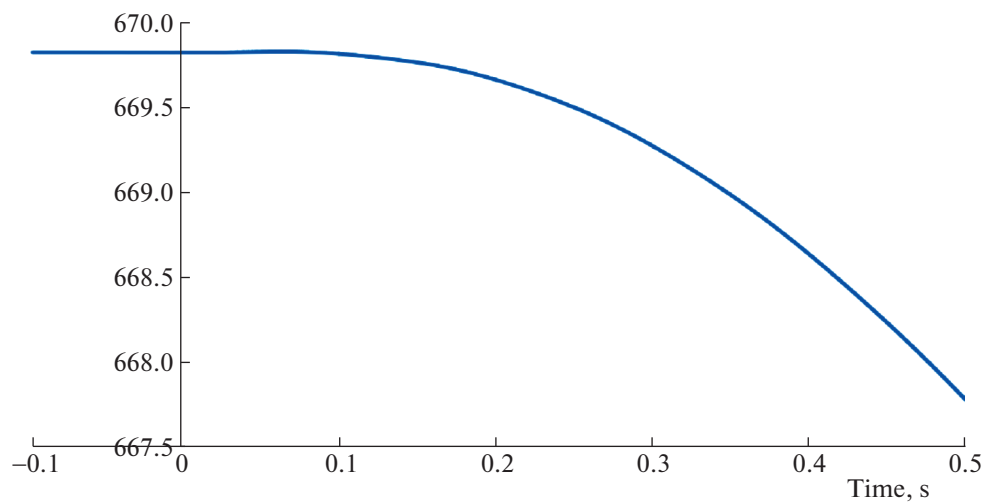


Fig. 8. Average Fuel Temperature in first 0.5 sec after emergency situation due to Instant Stop of the MCP.1.

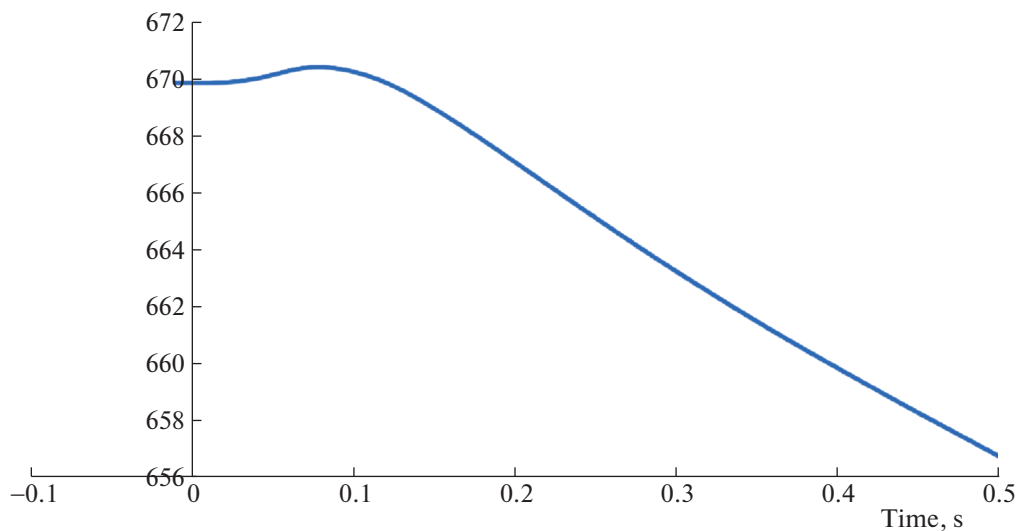


Fig. 9. Average Fuel Temperature in first 0.5 sec after emergency situation due to *LOCA*.

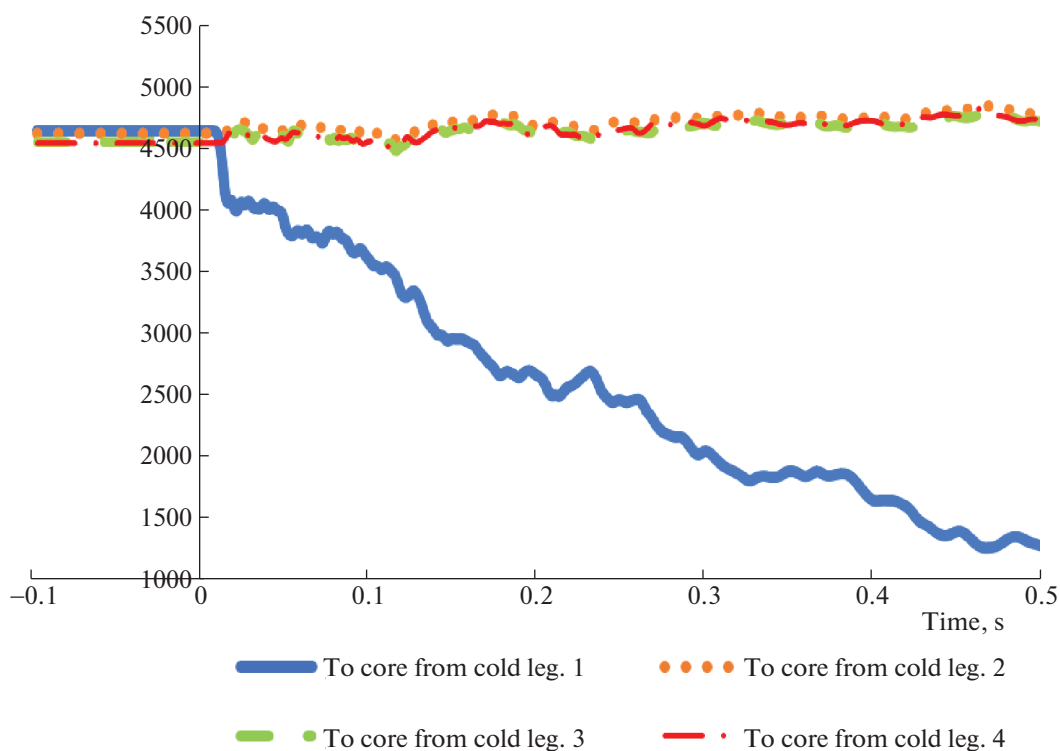


Fig. 10. Coolant Mass Flow Rate into the core from the four loops in first 0.5 sec after emergency situation due to Instant Stop of the MCP.1.

a second observation, the peaks are sharper in the case of *LOCA* then in the case of MCP.1 instant stop.

5. CONCLUSION

The details of the initial period of in the considered emergency situations shows a strongest amplitude and

frequency of pressure fluctuations on NPP elements, strongest amplitude and frequency of pressure can lead to significant dynamic loads on the structural elements of these objects.

This can be estimated either by:

1) Joint strength and hydrodynamic calculations, or

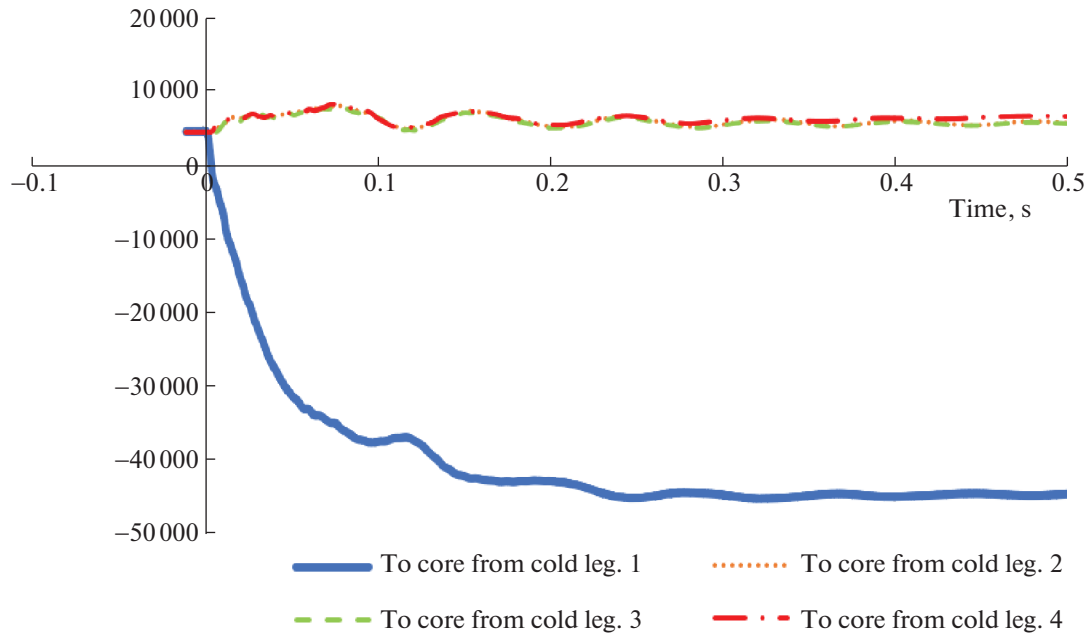


Fig. 11. Coolant Mass Flow Rate into the core from the four loops in first 0.5 sec after emergency situation due to LOCA.

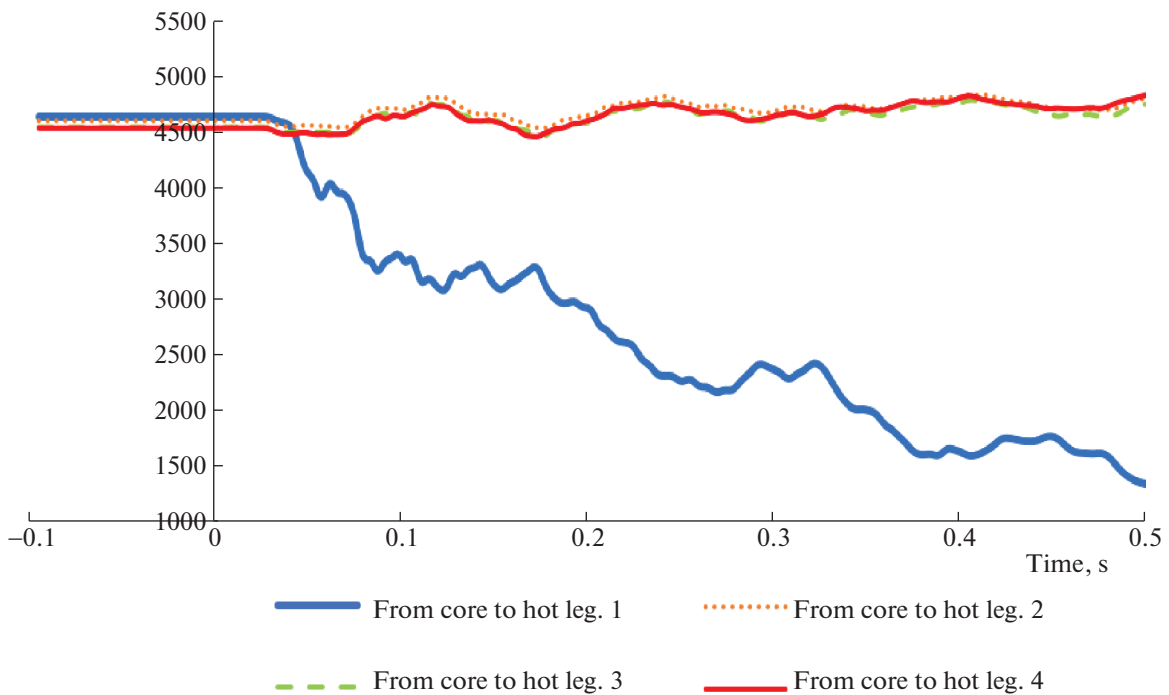


Fig. 12. Coolant Mass Flow Rate out of the core to the four loops in first 0.5 sec after emergency situation due to Instant Stop of the MCP.1.

2) It is possible to use the results obtained in this work as boundary conditions for the calculation of dynamic loads.

Comparing the two cases, MCP.1 instant stop and LOCA, the changes in all parameters are sharper and

stronger in the case of LOCA than in the case of MCP.1 instant stop.

It is necessary to consider a similar process for the other MCPs specially the pump in 3rd circuit in which the pressurizer connected. In the safety case, emer-

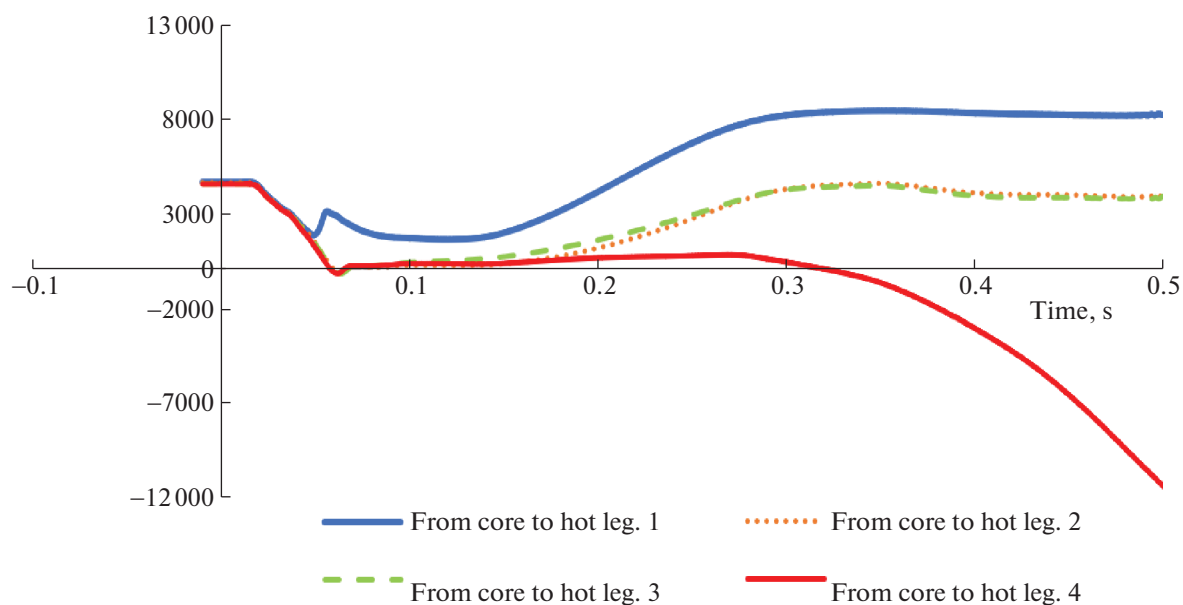


Fig. 13. Coolant Mass Flow Rate out of the core to the four loops in first 0.5 sec after emergency situation due to Instant Stop of the MCP.

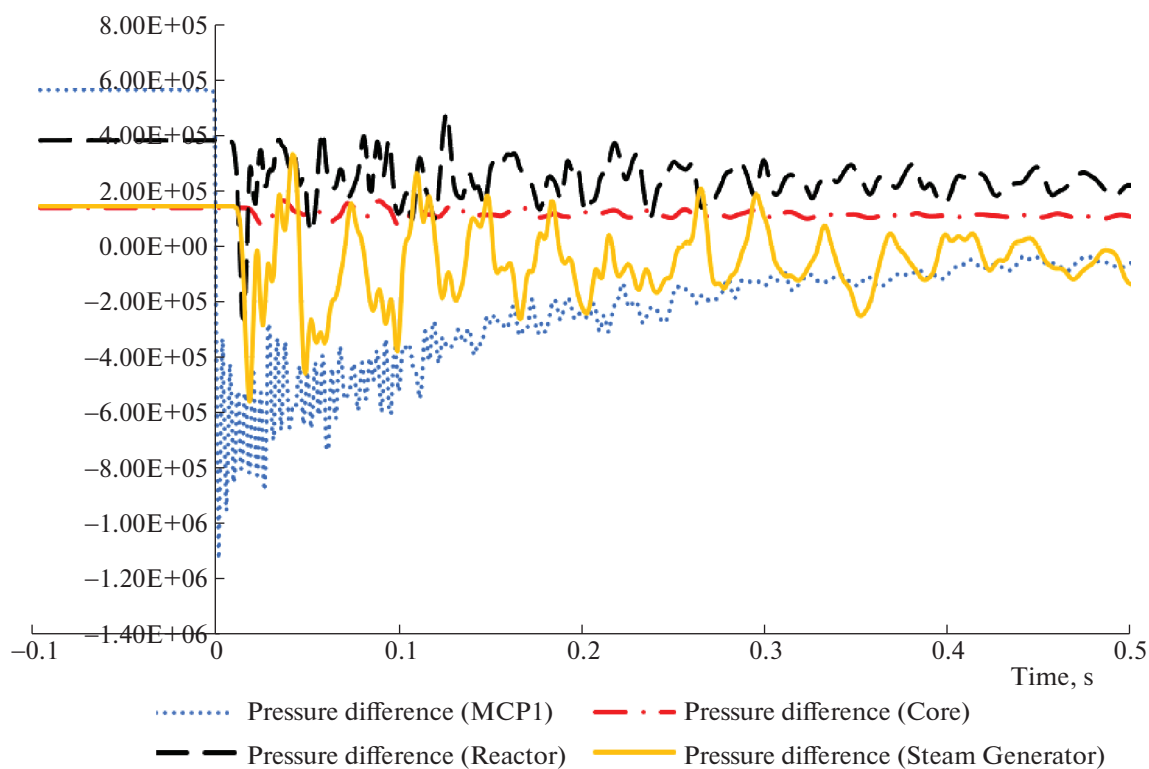


Fig. 14. Pressure Difference in Main Objects in first 0.5 sec after emergency situation due to Instant Stop of the MCP.1.

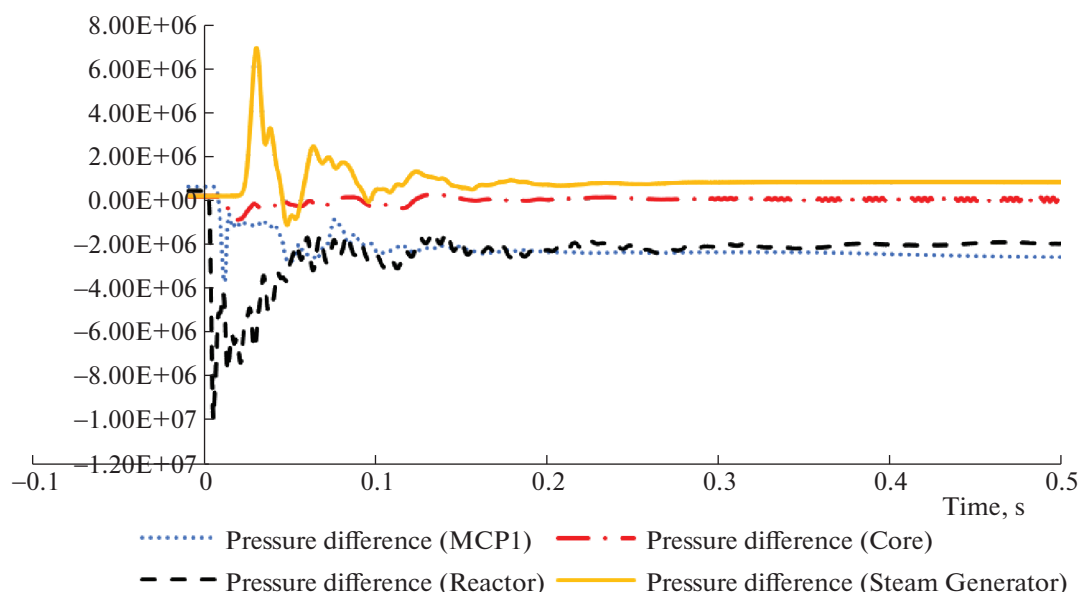


Fig. 15. Pressure Difference in Main Objects in first 0.5 sec after emergency situation due to LOCA.

gency situations are analyzed, which can also lead to significant pressure fluctuations in the first stage, in particular, these are accidents with instantaneous rupture of the main circulation pipeline.

So, the next step in the direction of analyzing the occurrence of pressure waves will be just the study of such accidents at breaks in different parts of pipelines, and MCP in the 3rd loop.

REFERENCES

1. PNAE G-1-036-95 (NP-006-98), Trebovaniya k soderzhaniju otcheta po obosnovaniyu bezopasnosti AS s reaktorom tipa VVER [Requirements to the contents of the report on safety justification of NPPs with VVER] (with amendment No. 1 dated 20.12.2005). In Russian.
2. Tereshonok V.A., Stepanov V.S., Ivchenkov V.V., Pitilimov V.A., and Nikonov S.P., Description of a transient caused by the switching-off of one of the four operating MCP at nominal reactor power at NPP Kalinin Unit 3, NEA/OECD, 2008.
3. Tereshonok V.A., Nikonov S.P., Lizorkin M.P., Velkov K., Pautz A., and Ivanov K., International benchmark for coupled codes and uncertainty analysis in modelling: switching-off of one of the four operating main circulation pumps at nominal power at NPP Kalinin unit, in *Proceedings of the 18th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Hungary, Eger, Oct. 6–10, 2008*.
4. Amer D. and Nikonov S.P., Pressure waves in the primary circuit of the VVER-1000 reactor at instant stop of the MCP, in *Proceedings of the Volga-2018 International conference for Young Scientists, Specialists and Post-Graduates on Nuclear Reactor Physics, September, 2018*.
5. Amer D. and Nikonov S.P., LOCA and pressure waves in the first loop of the VVER-1000 reactor, in *Proceedings of the 28th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Olomouc, Czechia, October 8–12, 2018*.
6. Austregesilo H., Deitenbeck H., Langenfeld A., Scheuer J., and Schoffel P., *ATHLET 3.1A, Programmer's Manual*, 2017.
7. Computer Code AC2, Code Certificate N0 17-01, Software License Agreement N0.L/M-03, 2017.
8. *Certification Passport Software No. 350*, 2014.
9. Grundmann U., Lucas D., and Rohde U., Coupling of the thermohydraulic code ATHLET with the neutron kinetic core model DYN3D, in *Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computations, Physics and Environmental Analysis, Portland, USA, 1995*, vol. 1, pp. 257–263.
10. Panka I., Hegyi Gy., Marácz Cs., and Keresztúri A., Uncertainties of the kiko3d-ATHLET calculations using the Kalinin-3 benchmark (phase II) data, in *Proceedings of the 25th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Balatongyörök, Hungary, 13–16 Oct., 2015*.
11. Nikonov S., Pautz A., and Velkov K., Detailed modeling of KALININ-3 NPP VVER-1000 reactor pressure vessel by the coupled system code ATHLET/BIPR-VVER, in *Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering M&C 2011, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8–12, 2011*.
12. Romanenko V.I., Bachdanovich R.B., Bogdanova E.V., Nikonov S.P., and Tikhomirov G.V., Complex modeling of VVER-1000 fuel assembly using codes MCU/ATHLET, in *Proceedings of the 27th Symposium*

of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Munich, Germany, Oct. 2017.

13. Nikonov S.P., Pham P., Romanenko V.I., and Tikhomirov G.V., Coupled neutronics thermohydraulic calculation of HPLWR fuel cell using codes MCU/ATHLET, in *Proceedings of the 27th Symposium*

of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Munich, Germany, Oct. 2017.

14. Amer D. and Nikonov S., Pressure waves in the primary circuit of the VVER-1000 reactor at instant stop of the MCP, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2018, vol. 1133, p. 012049.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 4, pp. 311–322

Сравнение последствий волн давления при остановке ГЦН и ЛОСА в ВВЭР-1000

Дина Али Амер^{1,2,*}, С. П. Никонов^{2,**}

¹ Александрийский университет, Александрия, 21526, Египет

² Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, 115409, Россия

*e-mail: Dina.amer@alexu.edu.eg

**e-mail: SPNikonov@mephi.ru

Поступила в редакцию 20.03.2019

После доработки 30.04.2019

Принята к публикации 14.05.2019

Рассматривается процесс образования и распространения волн давления в первом контуре реактора ВВЭР-1000 при аварийных ситуациях. Анализируются две возможные аварии: мгновенный (10^{-4} с) разрыв главного циркуляционного трубопровода (ГЦТ) первого контура с двухсторонним истечением в разрыв (DEB) и мгновенная (10^{-4} с) остановка главного циркуляционного насоса (ГЦН). Рассматриваемые аварии включены в перечень различных видов отчетов, необходимых для обоснования безопасности ВВЭР [1]. В качестве модели для исследования выбран 3-й блок Калининской АЭС (ВВЭР-1000, модель 320). Все необходимые для расчетного исследования данные взяты из описания международной стандартной проблемы Калинин-3 [2–3]. Первый анализ выше указанных аварий был сделан в работах [4, 5]. Для расчетов использовался код улучшенной оценки ATHLET, который входит в программный пакет AC2, официально полученный Национальным исследовательским ядерным университетом "МИФИ" на основании лицензионного соглашения с компанией Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) GmbH, Германия [6, 7]. Код ATHLET сертифицирован в России для расчетов стационарных и переходных режимов на реакторах с водяным теплоносителем [8].

В работе рассматривается начальный период аварий, поскольку только на этом этапе наблюдаются максимальные амплитуды и частоты колебаний давления в объектах АЭС, что может привести к значительным динамическим нагрузкам на конструктивные элементы этих объектов. Количественно динамическое воздействие можно оценить либо с помощью совместных прочностных и гидродинамических расчетов, либо можно использовать полученные в данной работе результаты в качестве граничных условий для расчета динамических нагрузок. Основной причиной возникновения волн давления в случае мгновенной остановки ГЦН является мгновенное изменение скорости потока, а при мгновенном разрыве ГЦТ первого контура — вскипание перегретого теплоносителя.

Ключевые слова: ВВЭР-1000, аварийные ситуации, ЛОСА, MCP stop, Калинин-3, ATHLET, двухстороннее истечение (DEB)

DOI: 10.1134/S2304487X19040023

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ПНАЭ Г-1-036-95 (НП-006-98). Требования к содержанию отчета по обоснованию безопасности АС с реактором типа ВВЭР (с Изменением № 1 от 20.12.2005 г.).
2. Tereshonok V.A., Stepanov V.S., Ivchenkov V.V., Pitilimov V.A., Nikonov S.P., Description of a Transient Caused by the Switching-off of One of the Four Operating MCP at Nominal Reactor Power at NPP Kalinin Unit 3, NEA/OECD, July, 2008.
3. Tereshonok V.A., Nikonov S.P., Lizorkin M.P., Velkov K., Pautz A., Ivanov K., International Benchmark for Coupled Codes and Uncertainty Analysis in Modelling: Switching-off of one of the four operating main circulation pumps at nominal power at NPP Kalinin unit,

- 18th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Hungary, Eger, Oct. 6–10, 2008.
4. *Dina Ali Amer, Nikonov S.P.*, Pressure Waves in The Primary Circuit Of The VVER – 1000 Reactor At Instant Stop of The MCP, Volga-2018, International conference for young scientists, specialists and post-graduates on Nuclear Reactor Physics, September, 2018.
5. *Dina Ali Amer, Nikonov S.P.*, LOCA and pressure waves in the first loop of the VVER – 1000 reactor, 28th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Olomouc, Czechia, October 8–12, 2018.
6. *Austregesilo H., Deitenbeck H., Langenfeld A., Scheuer J., Schöffel P.*, ATHLET 3.1A, Programmer's Manual, March 2017.
7. Computer Code AC2, Code Certificate N0 17-01, Software License Agreement N0.L/M-03, 11 Sep. 2017.
8. Ростехнадзор, ФБУ “НТЦ ЯРБ”, Аттестационный паспорт программного средства № 350 от 17.04.2014.
9. *Grundmann U., Lucas D., Rohde U.*, Coupling of the thermohydraulic code ATHLET with the neutron kinetic core model DYN3D. In: Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computations, Physics and Environmental Analysis, Portland (USA), 1995, vol. 1, pp. 257–263.
10. *Panka I., Hegyi Gy., Maráczy Cs., Keresztúri A.*, Uncertainties of the kiko3d- ATHLET calculations using the Kalinin-3 benchmark (phase II) data, 25th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Hungary, Balatongyörök, Oct. 13–16, 2015.
11. *Nikonov S., Pautz A., Velkov K.*, Detailed modeling of KALININ-3 NPP VVER-1000 reactor pressure vessel by the coupled system code ATHLET/BIPR-VVER, International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011), ISBN 978-85-63688-00-2, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8–12, 2011.
12. *Romanenko V.I., Bachdanovich R.B., Bogdanova E.V., Nikonov S.P., Tikhomirov G.V.*, Complex Modeling Of VVER-1000 Fuel Assembly Using Codes MCU/ATHLET, 27th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Munich, Germany Oct. 2017.
13. *Nikonov S.P., Pham P., Romanenko V.I., Tikhomirov G.V.*, Coupled Neutronics Thermohydraulic Calculation of HPLWR Fuel Cell Using Codes MCU/ATHLET, 27th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Munich, Germany Oct. 2017.
14. *Amer D., Nikonov S.*, Pressure waves in the primary circuit of the VVER-1000 reactor at instant stop of the MCP. 2018 J. Phys.: Conf. Ser. 1133 012049.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

УДК 517.9

НЕЛИНЕЙНЫЕ РЕАКЦИОННО-ДИФФУЗИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ С ПЕРЕМЕННЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ: МЕТОД ПОИСКА ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ В НЕЯВНОЙ ФОРМЕ

© 2019 г. А. Д. Полянин^{1,2,3,*}

¹ Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, 119526, Москва, Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409, Москва, Россия

³ Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, 105009, Москва, Россия

*e-mail: polyanin@ipmnet.ru

Поступила в редакцию 25.12.2018 г.

После доработки 25.12.2018 г.

Принята к публикации 16.01.2019 г.

Рассматриваются различные классы нелинейных уравнений реакционно-диффузионного типа с переменными коэффициентами $c(x)u_t = [a(x)f(u)u_x]_x + b(x)g(u)$, которые допускают точные решения. Излагается новый метод поиска точных решений таких и более сложных нелинейных уравнений математической физики, который основан на представлении решения в неявной форме $\int h(u)du = \xi(x)\omega(t) + \eta(x)$, где $h(u)$, $\xi(x)$, $\eta(x)$, $\omega(t)$ — искомые функции, конкретный вид которых определяется в ходе дальнейшего анализа возникающих функционально-дифференциальных уравнений. Приведены примеры конкретных нелинейных уравнений реакционно-диффузионного типа и их точных решений. Основное внимание уделяется нелинейным уравнениям достаточно общего вида, которые содержат несколько произвольных функций, зависящих от искомой функции u и пространственной переменной x . Описано много новых точных решений типа обобщенной бегущей волны и решений с функциональным разделением переменных. Важно отметить, что решения подобного типа обычно являются неинвариантными (т.е. они не могут быть получены с помощью методов классического группового анализа дифференциальных уравнений).

Ключевые слова: нелинейные реакционно-диффузионные уравнения, нелинейные уравнения с переменными коэффициентами, точные решения в неявном виде, решения типа обобщенной бегущей волны, решения с функциональным разделением переменных

DOI: 10.1134/S2304487X1903009X

1. ВВЕДЕНИЕ

1.1. Краткий обзор литературы

Преобразования и точные решения различных классов нелинейных уравнений конвективного тепло- и массопереноса

$$u_t = [f_1(u)u_x]_x + f_2(u)u_x + f_3(u) \quad (1)$$

и некоторых других нелинейных уравнений, не зависящих явно от переменных x , t , рассматривались во многих работах (см., например, [1–19] и цитируемую в них литературу). Для построения точных решений чаще всего использовались классический и неклассические методы исследования симметрий [1–3, 5, 7, 10, 14, 15, 17–19], методы обобщенного и функционального разделения переменных [9, 11, 14, 16, 17], метод дифференциальных связей [6, 13, 14, 16, 17].

В общем случае уравнение (1) допускает решения типа бегущей волны $u = U(kx + \lambda t)$ [2] и при

$f_2(u) = f_3(u) = 0$ имеет автомodelное решение $u = U(xt^{-1/2})$ [1]. Помимо указанных случаев известны также уравнения вида (1), в которых по крайней мере одна из функций $f_n(u)$ является произвольной, допускающие другие точные решения [6, 17].

В [8, 17, 20–24] рассматривались нелинейные уравнения реакционно-диффузионного типа с переменными коэффициентами автономного вида

$$c(x)u_t = [a(x)f_1(u)u_x]_x + b(x)f_2(u). \quad (2)$$

В табл. 1 собраны некоторые уравнения вида (2), содержащие одну или две произвольные функции пространственной переменной и/или искомой величины, допускающие точные решения.

Замечание 1. Уравнения и решения, приведенные в табл. 1 с номерами 5–7, обобщают реакционно-диффузионные уравнения со степенными и экспоненциальными нелинейностями и их инва-

Таблица 1. Нелинейные уравнения реакционно-диффузионного типа, зависящие от произвольных функций, которые допускают точные решения. Здесь $a(x)$, $b(x)$, $f(u)$, $g(u)$ — произвольные функции, b_1 , b_2 , k , λ — свободные параметры

№	Уравнение	Вид решения или пояснение	Литература
1	$u_t = [a(x)u^k u_x]_x + b(x)u^{k+1}$	$u = \varphi(x)\psi(t)$	[8, 12]
2	$u_t = [a(x)e^{\lambda u} u_x]_x + b(x)e^{\lambda u}$	$u = \varphi(x) + \psi(t)$	[8, 12]
3	$u_t = [a(x)u_x]_x + b_1 u \ln u + b_2 u$	$u = \varphi(x)\psi(t)$	[12]
4	$u_t = (u^{-4/3} u_x)_x + b(x)u^{-1/3}$	уравнение приводится к виду $v_t = (v^{-4/3} v_z)_z$	[8, 12]
5	$u_t = [x^k f(u)u_x]_x + x^{k-2} g(u)$	$u = U(z)$, $z = xt^{1/(k-2)}$, $k \neq 2$	см. замечание 1
6	$u_t = [x^2 f(u)u_x]_x + g(u)$	$u = U(z)$, $z = \lambda t + \ln x$	см. замечание 1
7	$u_t = [e^{\lambda x} f(u)u_x]_x + e^{\lambda x} g(u)$	$u = U(z)$, $z = \lambda x + \ln t$, $\lambda \neq 0$	см. замечание 1
8	$u_t = [a(x)u_x]_x + [x^2/a(x)]g(u)$	$u = U(z)$, $z = t + \int [x/a(x)]dx$	[24]
9	$u_t = u_{xx} + \tanh^2(kx)g(u)$	$u = U(z)$, $z = t + k^{-2} \operatorname{Incosh}(kx)$	[24]

риантные решения, которые рассматривались в [20–22].

В [6, 17] были рассмотрены четыре уравнения вида

$$u_t = x^{-n} [x^n f_1(u)u_x]_x + f_2(u), \quad (3)$$

где функции $f_1(u)$ и $f_2(u)$ выражались через произвольную функцию $\varphi(u)$ (n — любое), допускающие точные решения с функциональным разделением переменных. Уравнение (3) заменами $z = (n+1)^{-n-1} x^{n+1}$ (при $n \neq -1$) и $z = -2 \ln(x/2)$ (при $n = -1$) приводится к уравнению вида (2) со степенной и экспоненциальной зависимостями от пространственной координаты:

$$u_t = [z^k f_1(u)u_z]_z + f_2(u), \quad k = 2n/(n+1) \quad (n \neq -1);$$

$$u_t = [e^z f_1(u)u_z]_z + f_2(u) \quad (n = -1).$$

В [20–22] для анализа и построения точных решений уравнений вида (2) со степенными и экспоненциальными нелинейностями использовались методы группового анализа.

В [25–29] исследовались симметрии и были приведены некоторые точные решения нелинейных уравнений конвективно-диффузионного типа с переменными коэффициентами автономно-го вида

$$c(x)u_t = [a(x)f_1(u)u_x]_x + b(x)f_2(u)u_x.$$

Другие родственные и более сложные нелинейные эволюционные уравнения рассматривались в [17, 30–32]. В [17, 33] описано много систем уравнений реакционно-диффузионного типа, до-

пускающих точные решения (в цитируемых книгах приведен обширный список публикаций на эту тему).

Отметим также, что в последнее время большое внимание уделяется изучению наследственных систем, которые моделируются реакционно-диффузионными уравнениями

$$u_t = au_{xx} + f(u, w), \quad w = u(x, t - \tau),$$

где $\tau > 0$ — время запаздывания. Точные решения таких и более сложных уравнений получены в [34–42].

В данной статье будут рассматриваться допускающие точные решения нелинейные уравнения реакционно-диффузионного типа, которые зависят от одной или нескольких произвольных функций.

1.2. Используемая терминология

В данной статье термин *точное решение* будет использоваться в отношении нелинейных уравнений с частными производными, если его решение выражается:

- (i) в элементарных функциях;
- (ii) в замкнутом виде с использованием определенных или/и неопределенных интегралов;
- (iii) через решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) или систем таких уравнений.

Допускаются также комбинации случаев (i)–(iii).

2. НЕЛИНЕЙНЫЕ УРАВНЕНИЯ РЕАКЦИОННО-ДИФFUЗИОННОГО ТИПА. МЕТОД ПОИСКА ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ

2.1. Класс рассматриваемых нелинейных уравнений с переменными коэффициентами.

Предварительные замечания

Будем рассматривать одномерные нелинейные уравнения реакционно-диффузионного типа с переменными коэффициентами

$$c(x)u_t = [a(x)f(u)u_x]_x + b(x)g(u). \quad (4)$$

Далее основное внимание будет уделено уравнениям достаточно общего вида, которые зависят от одной или двух произвольных функций.

Замечание 2. При $a(x) = c(x) = x^n$ уравнение (4) описывает реакционно-диффузионные процессы с радиальной симметрией в плоском (при $n = 1$) и трехмерном (при $n = 2$) случаях (x — радиальная координата).

Рассмотрим сначала наиболее простое нелинейное уравнение данного вида

$$u_t = [f(u)u_x]_x, \quad (5)$$

которое содержит произвольную функцию $f(u)$. Поскольку коэффициенты этого уравнения не зависят явно от x и t , оно допускает точное решение типа бегущей волны

$$u = u(z), \quad z = \lambda t + kx, \quad (6)$$

где k и λ — произвольные постоянные. Подставив (6) в (5), получим ОДУ $\lambda u'_z = k^2 [f(u)u'_z]_z$. Интегрируя, находим его решение в неявном виде

$$k^2 \int \frac{f(u)du}{\lambda u + C_1} = \lambda t + kx + C_2, \quad (7)$$

где C_1 и C_2 — произвольные постоянные. В правой части (7) была сделана замена z на исходные переменные с помощью (6).

Ниже будет описан новый метод поиска точных решений нелинейных уравнений математической физики, основанный на обобщении решения (7).

2.2. Общее описание метода поиска точных решений в неявном виде

Точные решения нелинейного дифференциального уравнения в частных производных

$$G(x, u_x, u_t, u_{xx}, u_{xt}, u_{tt}, \dots) = 0, \quad (8)$$

ищутся в неявном виде

$$\int h(u)du = \xi(x)\omega(t) + \eta(x), \quad (9)$$

где функции $h(u)$, $\xi(x)$, $\eta(x)$, $\omega(t)$ определяются в ходе дальнейшего анализа. Представление решения в виде (9) основано на естественном обобщении

решения (7), которое осуществляется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{k^2 f(u)}{\lambda u + C_1} &\Rightarrow h(u), \quad \lambda \Rightarrow \xi(x), \\ t &\Rightarrow \omega(t), \quad kx + C_2 \Rightarrow \eta(x). \end{aligned}$$

Далее аргументы функций $a = a(x)$, $b = b(x)$, $c = c(x)$, $f = f(u)$, $g = g(u)$, $h = h(u)$, $\xi = \xi(x)$, $\eta = \eta(x)$, $\omega = \omega(t)$, которые входят в уравнение (4) и решение (9), часто будут опускаться.

Опишем процедуру построения точного решения в неявном виде. Сначала, используя (9), вычисляются производные u_x , u_t , u_{xx} , ..., которые выражаются в терминах функций h , ξ , η , ω и их производных. Затем полученные выражения для производных подставляются в уравнение (8), после чего исключается переменная t с помощью (9). В результате (при подходящем выборе функции ω , см. далее) приходим к функционально-дифференциальному уравнению билинейного вида

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \phi_j[x] \psi_j[u] &= 0, \\ \phi_j[x] &\equiv \phi_j(x, \xi, \eta, \xi'_x, \eta'_x, \xi''_{xx}, \eta''_{xx} \dots), \\ \psi_j[u] &\equiv \psi_j(u, h, h'_u, h''_{uu}, \dots). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $\phi_j[x]$ и $\psi_j[u]$ — дифференциальные формы (в некоторых случаях функциональные коэффициенты), зависящие соответственно только от x и u . Считается, что все $\phi_j[u]$ для любых $h = h(u)$ одновременно не обращаются в нуль. Справедливо следующее утверждение.

Утверждение. Функционально-дифференциальные уравнения вида (10) могут допускать решения только в тех случаях, когда формы $\psi_j[u]$ ($j = 1, \dots, N$) связаны линейными соотношениями [14, 17]:

$$\sum_{j=1}^{m_i} k_{ij} \psi_j[u] = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (11)$$

где k_{ij} — некоторые постоянные, $2 \leq m_i \leq N$, $1 \leq n \leq N - 1$. При этом надо рассматривать также вырожденные случаи, когда помимо линейных соотношений отдельные дифференциальные формы $\psi_j[u]$ обращаются в нуль.

Аналогичное утверждение справедливо также для форм $\phi_j[x]$.

В разд. 3 и 4 сформулированное утверждение будет использовано для построения точных решений некоторых функционально-дифференциальных уравнений вида (10), которые возникают при поиске решений соответствующих нелиней-

ных уравнений реакционно-диффузионного типа (4).

Замечание 3. Поиск решения в неявном виде с интегральным членом в левой части (9) часто приводит к уравнениям для определения функции h более низкого порядка, чем при поиске точных решений в явном виде. Кроме того, неявная форма записи решения обычно приводит к более простым явным представлениям функций g и f через h (при поиске точных решений в явном виде функции g и f нередко выражаются через h в параметрической форме [17]). Отметим также, что различные линейные соотношения вида (11) в случае общего положения соответствуют различным решениям рассматриваемого уравнения.

2.3. Вывод функционально-дифференциального уравнения

Дифференцируя (9) по t и x , имеем

$$\begin{aligned} hu_t &= \xi \omega'_t \Rightarrow u_t = \frac{\xi \omega'_t}{h}; \\ hu_x &= \xi'_x \omega + \eta'_x \Rightarrow u_x = \frac{\xi'_x \omega + \eta'_x}{h}; \\ (afu_x)_x &= \left[(a\xi'_x \omega + a\eta'_x) \frac{f}{h} \right]_x = \\ &= [(a\xi'_x)'_x \omega + (a\eta'_x)'_x] \frac{f}{h} + a(\xi'_x \omega + \eta'_x)^2 \frac{1}{h} \left(\frac{f}{h} \right)'_u. \end{aligned}$$

Подставив эти выражения в (4), получим функционально-дифференциальное уравнение

$$\omega'_t = \Phi_1(x, u)\omega^2 + \Phi_2(x, u)\omega + \Phi_3(x, u), \quad (12)$$

где функции Φ_n не зависят явно от t и определяются формулами

$$\begin{aligned} \Phi_1(x, u) &= \frac{a(\xi'_x)^2}{c\xi} \left(\frac{f}{h} \right)'_u, \\ \Phi_2(x, u) &= \frac{1}{c\xi} \left[(a\xi'_x)'_x f + 2a\xi'_x \eta'_x \left(\frac{f}{h} \right)'_u \right], \\ \Phi_3(x, u) &= \frac{1}{c\xi} \left[(a\eta'_x)'_x f + a(\eta'_x)^2 \left(\frac{f}{h} \right)'_u + bgh \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

Уравнение (12)–(13) зависит от трех переменных t , x , u , которые связаны одним соотношением (9), и содержит искомые функции и их производные, зависящие от разных аргументов. Это уравнение является более сложным, чем уравнение вида (10).

Далее будут описаны несколько различных путей построения точных решений функционально-дифференциального уравнения (12)–(13).

3. ПРЯМАЯ РЕДУКЦИЯ, ПРИВОДЯЩАЯ К ОДУ ДЛЯ ФУНКЦИИ ω

3.1. Описание метода. Анализ уравнения в невырожденном случае

Прямая редукция заключается в том, что в уравнении (12) полагается

$$\Phi_1(x, u) = A_1, \quad \Phi_2(x, u) = A_2, \quad \Phi_3(x, u) = A_3, \quad (14)$$

где A_n — свободные постоянные. В результате приходим к автономному обыкновенному дифференциальному уравнению для функции $\omega = \omega(t)$:

$$\omega'_t = A_1 \omega^2 + A_2 \omega + A_3. \quad (15)$$

Перейдем к анализу переопределенной системы (14), состоящей из трех функционально-дифференциальных уравнений.

1°. *Невырожденный случай.* Рассмотрим сначала невырожденный случай, соответствующий значению $A_1 \neq 0$. Разделяя переменные в первом уравнении (14), после интегрирования получим

$$f = B_1 u h + B_2 h, \quad \xi = \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{A_1}{B_1}} \int \sqrt{\frac{c}{a}} dx + B_3 \right)^2, \quad (16)$$

где B_1 , B_2 , B_3 — произвольные постоянные. Из второго уравнения (14) с учетом первого соотношения (16) находим $f = C_1$ и $h = C_1(B_1 u + B_2)^{-1}$, где C_1 — произвольная постоянная. Из третьего уравнения (14) следует, $g = C_2(B_1 u + B_2)$. Таким образом, невырожденный случай неинтересен, поскольку приводит к линейному уравнению.

2°. *Вырожденные случаи.* При $A_1 = 0$ получим уравнение $\Phi_1 = 0$, которое определяет два вырожденных случая: (i) $\xi'_x = 0$ и (ii) $(f/h)'_u = 0$. Без ограничения общности в этих случаях можно положить (i) $\xi = 1$ и (ii) $h = f$. Вырожденные случаи рассмотрим далее поочередно в разд. 3.2 и 3.3.

3.2. Точные решения типа обобщенной бегущей волны в вырожденном случае при $\xi = 1$

Полагая $\xi = 1$ в (13), имеем $\Phi_1 = \Phi_2 = 0$. В этом случае уравнение (12) представляет собой уравнение с разделенными переменными (левая часть зависит от t , а правая — от x и u), что дает $\omega(t) = kt$, где $k = A_3$ — произвольная постоянная. Рассматриваемая ситуация соответствует решению типа обобщенных бегущих волн, заданных в неявной форме

$$\int h(u) du = kt + \int \theta(x) dx. \quad (17)$$

Здесь подынтегральные функции $h(u)$ и $\theta(x) = \eta'_x(x)$ будут определяться в ходе дальнейшего анализа из функционально-дифференциального уравне-

ния (12), которое можно представить в следующем виде:

$$(a\theta)'_x f + a\theta^2 \left(\frac{f}{h}\right)'_u + bgh - kc = 0. \quad (18)$$

Уравнение (18) относится к функционально-дифференциальным уравнениям билинейного вида (10).

Решение 1. Уравнению (18) можно удовлетворить, если положить

$$f = A, \quad g = \frac{1}{h} \left(\frac{f}{h}\right)'_u, \quad A(a\theta)'_x - kc = 0, \quad b = -a\theta^2, \quad (19)$$

где A — произвольная постоянная.

Из формул (19), полагая в них $c(x) = 1$, $A = k = 1$, в частности, можно получить нелинейное уравнение реакционно-диффузионного типа

$$u_t = [a(x)u_x]_x - \frac{x^2}{a(x)} g(u), \quad (20)$$

где $a(x)$ — произвольная функция, а функция $g(u)$ следующим образом выражается через произвольную функцию $h = h(u)$:

$$g(u) = -h^{-3} h'_u. \quad (21)$$

Уравнение (20) при условии (21) допускает точное решение

$$\int h(u) du = t + \int \frac{x dx}{a(x)} + C_1. \quad (22)$$

Разрешив (21) относительно h , имеем $h(u) = \left(2 \int g(u) du + C_2\right)^{-1/2}$. Исключив с помощью полученного выражения функцию h в (22), представим решение уравнения (20) в виде

$$\int \left(2 \int g(u) du + C_2\right)^{-1/2} du = t + \int \frac{x dx}{a(x)} + C_1. \quad (23)$$

Здесь $a(x)$ и $g(u)$ — произвольные функции, C_1 и C_2 — произвольные постоянные.

Пример 1. Точные решения уравнения

$$u_t = (x^n u_x)_x - x^{2-n} g(u)$$

определяются по формуле (23) при $a(x) = x^n$.

Замечание 4. Уравнение (20) и его решение (23), содержащие две произвольные функции, из других соображений были получены в [24].

Решение 2. Уравнению (18) можно удовлетворить, если положить

$$A f = \left(\frac{f}{h}\right)'_u, \quad g = \frac{1}{h}, \quad (a\theta)'_x + A a \theta^2 = 0, \quad b = kc, \quad (24)$$

где A — произвольная постоянная. Полагая $c = 1$ в (24), можно получить нелинейное уравнение реакционно-диффузионного типа

$$u_t = [a(x)f(u)u_x]_x + g(u), \quad (25)$$

где $a(x)$ — произвольная функция, а функции $f(u)$ и $g(u)$ следующим образом выражаются через произвольную функцию $h = h(u)$:

$$f(u) = B h \exp\left(A \int h du\right), \quad g(u) = \frac{k}{h}. \quad (26)$$

Уравнение (25)–(26) допускает точное решение

$$\int h(u) du = kt + \frac{1}{A} \ln\left(C_1 \int \frac{dx}{a(x)} + C_2\right). \quad (27)$$

В формулы (26) и (27) входят произвольные функции $a(x)$, $h(u)$ и произвольные постоянные A , B , C_1 , C_2 , k .

Пример 2. Полагая $h = 1/u$, $A = m + 1$, $B = 1$ в (26) и (27), получим реакционно-диффузионное уравнение со степенной нелинейностью

$$u_t = [a(x)u^m u_x]_x + ku, \quad m \neq -1, \quad (28)$$

точное решение которого имеет вид

$$u = e^{kt} \left(C_1 \int \frac{dx}{a(x)} + C_2\right)^{1/(m+1)},$$

где C_1 , C_2 — произвольные постоянные.

Замечание 6. Уравнение

$$u_t = [a(x)e^{\lambda u} u_x]_x + k \quad (29)$$

имеет точное решение

$$u = kt + \frac{1}{\lambda} \ln\left(C_1 \int \frac{dx}{a(x)} + C_2\right).$$

Решение 3. Уравнению (18) можно удовлетворить, если положить

$$\left(\frac{f}{h}\right)'_u - A = 0, \quad g = -\frac{f}{h}, \quad A a \theta^2 = kc, \quad (a\theta)'_x = b, \quad (30)$$

где A — произвольная постоянная. Полагая $c(x) = 1$ можно получить нелинейное реакционно-диффузионное уравнение

$$u_t = [a(x)F(u)u_x]_x \mp \frac{a'_x(x)}{\sqrt{a(x)}} G(u), \quad (31)$$

где функции $F(u)$ и $G(u)$ следующим образом выражаются через произвольную функцию $h = h(u)$:

$$F(u) = (Au + B)h(u), \quad G(u) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{k}{A}} (Au + B). \quad (32)$$

Уравнения (31)–(32) допускают точные решения

$$\int h(u) du = kt \pm \sqrt{\frac{k}{A}} \int \frac{dx}{\sqrt{a(x)}} + C. \quad (33)$$

В формулы (32) и (33) входят произвольные постоянные A , B , C .

Пример 3. Полагая в (31)–(33) $A = 1$, $B = 0$, $k = 4$, находим $F(u) = uh(u)$, $G(u) = u$. С учетом этого, заменяя h на F/u в (33), а затем переобозначая F на f , получим уравнения

$$u_t = [a(x)f(u)u_x]_x \mp \frac{a'_x(x)}{\sqrt{a(x)}}u, \quad (34)$$

которые содержат две произвольные функции $a(x)$ и $f(u)$ и допускают следующие точные решения в неявном виде:

$$\int \frac{f(u)}{u} du = 4t \pm 2 \int \frac{dx}{\sqrt{a(x)}} + C. \quad (35)$$

Полагая в (34) $a(x) = \frac{1}{4}\alpha^2\beta^{-2}x^{2\beta}$ и $a(x) = \frac{1}{4}\alpha^2\beta^{-2}e^{2\beta x}$, получим уравнения

$$u_t = [x^{2\beta}f_1(u)u_x]_x + \alpha x^{\beta-1}u, \quad f_1(u) = \frac{1}{4}\alpha^2\beta^{-2}f(u),$$

$$u_t = [e^{2\beta x}f_1(u)u_x]_x + \alpha e^{\beta x}u, \quad f_1(u) = \frac{1}{4}\alpha^2\beta^{-2}f(u),$$

точные решения которых находятся по формуле (35).

Решение 4. Рассмотрим теперь вырожденный случай, соответствующий обращению в нуль дифференциальной формы $(f/h)'_u$ в (18). В этом случае уравнение (18) имеет решения при выполнении условий

$$h = f, \quad g = A + \frac{B}{f}, \quad (36)$$

$$(a\theta)'_x + Ab = 0, \quad Bb - kc = 0,$$

где A и B – произвольные постоянные. Из соотношений (36) при $b(x) = c(x) = 1$ следует, что уравнение

$$u_t = [a(x)f(u)u_x]_x + A + \frac{k}{f(u)}, \quad (37)$$

которое содержит две произвольные функции $a(x)$ и $f(u)$, имеет точное решение типа обобщенной бегущей волны

$$\int f(u)du = kt - A \int \frac{x dx}{a(x)} + C_1 \int \frac{dx}{a(x)} + C_2, \quad (38)$$

где C_1, C_2 – произвольные постоянные. В частном случае $a(x) = 1$ уравнение (37) и его решение (38) переходят в уравнение и решение, полученные в [6].

Замечание 7. Прямой проверкой можно убедиться, что более общее, чем (37), уравнение

$$\zeta = \begin{cases} C_2 \cos(mx) + C_3 \sin(mx) & \text{при } A_1 k(A_2 A_3 - A_1 A_4) > 0, \\ C_2 \cosh(mx) + C_3 \sinh(mx) & \text{при } A_1 k(A_2 A_3 - A_1 A_4) < 0, \end{cases} \quad (46)$$

$$u_t = [a(x)f(u)u_x]_x + b(x) + \frac{k}{f(u)},$$

которое содержит три произвольные функции $a(x), b(x), f(u)$, допускает точное решение в неявном виде

$$\int f(u)du = kt - \int \frac{1}{a(x)} \left(\int b(x)dx \right) dx + C_1 \int \frac{dx}{a(x)} + C_2.$$

Решение 5. Уравнению (18) можно удовлетворить, если положить

$$g = A_1 \frac{f}{h} + A_2 \frac{1}{h}, \quad \left(\frac{f}{h} \right)'_u = A_3 f + A_4, \quad (39)$$

$$(a\theta)'_x + A_3 a\theta^2 + A_1 b = 0, \quad A_4 a\theta^2 - kc + A_2 b = 0, \quad (40)$$

где A_1, A_2, A_3, A_4 – произвольные постоянные. Из уравнений (39) получим представления функций g и f через h :

$$f = hE \left(A_4 \int \frac{du}{E} + C_1 \right), \quad E = \exp \left(A_3 \int h du \right), \quad (41)$$

$$g = A_1 C_1 E + A_1 A_4 E \int \frac{du}{E} + A_2 \frac{1}{h},$$

где C_1 – произвольная постоянная.

Уравнения (40) при заданных зависимостях $a = a(x)$ и $c = c(x)$ позволяют найти функции $b(x)$ и $\theta(x)$. Умножим первое уравнение (40) на A_2 , а второе – на $-A_1$ и сложим. В результате для функции θ получим ОДУ первого порядка с квадратичной нелинейностью

$$A_2 a\theta'_x + (A_2 A_3 - A_1 A_4) a\theta^2 + A_2 a'_x \theta + A_1 kc = 0, \quad (42)$$

которое является уравнением Риккати [43]. С помощью подстановки

$$\theta = \lambda \frac{\zeta'_x}{\zeta}, \quad \lambda = \frac{A_2}{A_2 A_3 - A_1 A_4} \quad (A_2 A_3 - A_1 A_4 \neq 0) \quad (43)$$

оно приводится к линейному ОДУ второго порядка

$$A_2 \lambda (a\zeta'_x)'_x + A_1 kc \zeta = 0. \quad (44)$$

Точные решения уравнения (44) для некоторых функций $a = a(x)$ и $c = c(x)$ можно найти в [43, 44].

Используя последнее соотношение (40), можно выразить функциональный коэффициент b через θ :

$$b = -\frac{1}{A_2} (A_4 a\theta^2 - kc). \quad (45)$$

Пример 4. При $a(x) = c(x) = 1$ общее решение уравнения (44) имеет вид

где C_2 и C_3 — произвольные постоянные, $m = \sqrt{|A_1 k|/|A_2 \lambda|}$. В частности, полагая $A_1 = A_2 = A_4 = 1$, $A_3 = 2$, $C_2 = 1$, $C_3 = 0$, $k = -1$ в формулах (43), (45) и (47), получим $m = \lambda = 1$, $\zeta = \cosh x$, $\theta = \tanh x$, $b = -(1 + \tanh^2 x)$.

3.3. Точные решения типа обобщенной бегущей волны в вырожденном случае при $h = f$

При $h = f$ в системе (14), где Φ_n определяются формулами (13), первое уравнение удовлетворяется тождественно при $A_1 = 0$, а два других уравнения принимают вид

$$(a\xi'_x)'_x f = A_2 c \xi, \quad (a\eta'_x)'_x f + bfg = A_3 c \xi. \quad (47)$$

Анализ показывает, что надо рассмотреть три ситуации, которые приводят к разным результатам.

В невырожденном случае при $(a\xi'_x)'_x \neq 0$ из уравнений (47) следует, что $f = \text{const}$ и $g = \text{const}$. Этот случай неинтересен, поскольку соответствует линейному уравнению (4).

Решение 6. В вырожденном случае, который соответствует значению $A_2 = 0$, без ограничения общности можно положить $A_3 = 1$. Тогда решением уравнения (15) является линейная функция $\omega(t) = t$, а первое уравнение системы (47) принимает вид

$$(a\xi'_x)'_x = 0. \quad (48)$$

Интегрируя (48), находим связь между функциями $a = a(x)$ и $\xi = \xi(x)$:

$$\xi = C_1 \int \frac{dx}{a(x)} + C_2, \quad (49)$$

где C_1 и C_2 — произвольные постоянные.

Второе уравнение (47) в вырожденном случае (48) имеет точные решения при выполнении условий

$$g = k_1 + k_2 f^{-1}, \quad (a\eta'_x)'_x + k_1 b = 0, \quad k_2 b - c \xi = 0, \quad (50)$$

где k_1 и k_2 — произвольные постоянные. Из соотношений (49), (50) следует, что нелинейное реакционно-диффузионное уравнение

$$c(x)u_t = [a(x)f(u)u_x]_x + c(x)\xi(x) \left[k + \frac{1}{f(u)} \right], \quad k = \frac{k_1}{k_2}, \quad (51)$$

где $a(x)$, $c(x)$, $f(u)$ — произвольные функции, а функция $\xi = \xi(x)$ определяется по формуле (49), допускает точное решение типа обобщенной бегущей волны в неявном виде

$$\int f(u)du = \xi(x)t + \eta(x), \quad \eta(x) = -k \int \frac{1}{a(x)} \left(\int c(x)\xi(x)dx \right) dx + C_3 \int \frac{dx}{a(x)} + C_4, \quad (52)$$

C_3 и C_4 — произвольные постоянные.

Пример 5. Положим $a(x) = c(x) = 1$ в уравнении (51) и $C_1 = 1$, $C_2 = 0$ — в формулах (49) и (52). В результате получим уравнение

$$u_t = [f(u)u_x]_x + x \left[k + \frac{1}{f(u)} \right], \quad (53)$$

которое содержит произвольную функцию $f(u)$ и произвольную постоянную k и допускает точное решение типа обобщенной бегущей волны

$$\int f(u)du = xt - \frac{1}{6} kx^3 + C_3 x + C_4.$$

В частном случае $f(u) = e^u$ уравнение (53) принимает вид

$$u_t = (e^u u_x)_x + x(k + e^{-u}).$$

Его точное решение выражается в явном виде $u = \ln \left(xt - \frac{1}{6} kx^3 + C_3 x + C_4 \right)$.

4. МОДИФИЦИРОВАННЫЕ РЕДУКЦИИ, ПРИВОДЯЩИЕ К ДРУГИМ ОДУ ДЛЯ ФУНКЦИИ ω

4.1. Предварительные замечания

Полученные в разд. 3 точные решения не исчерпывают все решения вида (9) нелинейного реакционно-диффузионного уравнения (4). Другие решения могут быть получены путем различных модификаций определяющего функционально-дифференциального уравнения (12), основанных на использовании соотношения (9).

4.2. Модифицированная редукция, приводящая к $\omega = I$

В слагаемом $\Phi_2(x, u)\omega$ в правой части уравнения (12) исключим ω с помощью (9). В результате приходим к модифицированному функционально-дифференциальному уравнению

$$\begin{aligned} \omega'_t &= \Phi_1(x, u)\omega^2 + \Psi_1(x, u), \\ \Psi_1(x, u) &= \Phi_2(x, u) \left[\frac{H(u) - \eta(x)}{\xi(x)} \right] + \Phi_3(x, u), \\ H(u) &= \int h(u)du, \end{aligned} \quad (54)$$

где функции $\Phi_n = \Phi_n(x, u)$ определены в (13).

Модифицированная редукция заключается в том, что в уравнении (54) полагается

$$\Phi_1(x, u) = A_1, \quad \Psi_1(x, u) = A_2, \quad (55)$$

где A_1 и A_2 — свободные постоянные. В результате приходим к автономному обыкновенному дифференциальному уравнению для функции $\omega = \omega(t)$:

$$\omega_t' = A_1 \omega^2 + A_2. \quad (56)$$

Далее рассмотрим только вырожденные случаи, которые реализуются при $A_1 = 0$ в (55) и (56) и определяют две возможности: (i) $\xi = 1$ или (ii) $h = f$. Рассмотрим их по порядку.

(i) При $\xi = 1$ получим тем же самые решения, которые описаны в разд. 3.2.

(ii) При $f = h$ в уравнении (56) можно положить $A_2 = 1$, что дает $\omega(t) = t$. Второе уравнение (55) в этом случае приводится к виду

$$\xi(a\eta_{|x}')_x - \eta(a\xi_x')_x + b\xi g - c\xi^2 f^{-1} + (a\xi_x')_x F = 0, \quad F = \int f(u)du, \quad (57)$$

и является частным случаем уравнения (10) при $N = 5$.

Решение 7. Функционально-дифференциальное уравнение (57) допускает решения при выполнении условий

$$g = k_1 + k_2 f^{-1} + k_3 F, \quad F = \int f(u)du, \quad (58)$$

$$\xi(a\eta_{|x}')_x - \eta(a\xi_x')_x + k_1 b \xi = 0, \quad (59)$$

$$k_2 b - c\xi = 0, \quad (60)$$

$$(a\xi_x')_x + k_3 b \xi = 0, \quad (61)$$

где $f(u)$ — произвольная функция, а k_1, k_2, k_3 — произвольные постоянные. Считая заданными функции $a = a(x)$ и $c = c(x)$ и исключая b из уравнений (60) и (61), приходим к уравнению типа Эмдена—Фаулера для определения функции ξ :

$$(a\xi_x')_x + \frac{k_3}{k_2} c \xi^2 = 0. \quad (62)$$

Уравнение (59) является линейным неоднородным обыкновенным дифференциальным уравнением относительно функции η , которое допускает частное решение $\eta_p = -k_1/k_3$ (при подстановке этого значения уравнение (59) совпадает с уравнением (61)). Укороченное однородное уравнение (59), соответствующее значению $k_1 = 0$, имеет частное решение $\eta_0 = \xi$. Поэтому порядок этого уравнения может быть понижен [43, 44]. Используя указанные обстоятельства, находим общее решение уравнения (59):

$$\eta = C_1 \xi + C_2 \xi \int \frac{dx}{a\xi^2} - \frac{k_1}{k_3}, \quad (63)$$

где C_1 и C_2 — произвольные постоянные. Функциональный коэффициент b определяется из уравнения (60).

Подводя итоги, получим нелинейное уравнение реакционно-диффузионного типа

$$c(x)u_t = [a(x)f(u)u_x]_x + c(x)\xi(x) \left[k_1 + \frac{1}{f(u)} + k_3 \int f(u)du \right], \quad (64)$$

где $a(x)$, $c(x)$, $f(u)$ — произвольные функции, а функция $\xi = \xi(x)$ удовлетворяет уравнению (62) при $k_2 = 1$, допускающее точное решение вида

$$\int f(u)du = \xi(x)t + \eta(x), \quad (65)$$

в котором функция $\eta(x)$ определяется формулой (63).

Замечание 8. Уравнение (64) является обобщением уравнения (51).

Пример 6. При $a(x) = c(x) = k_2 = 1$ уравнение (62) имеет точное решение $\xi = -(6/k_3)x^{-2}$. Соответствующая этим решениям функция η (63) принимает вид $\eta = A_1 x^{-2} + A_2 x^3 - (k_1/k_3)$, где A_1 и A_2 — произвольные постоянные, которые можно выразить через C_1, C_2 и k_3 .

4.3. Простейшая редукция при $\omega = ke^{\lambda t}$. Решения с обобщенным разделением переменных

Вернемся к рассмотренному в разд. 3.2 уравнению, которое было получено подстановкой $\xi = 1$ в (13). В этом случае $\Phi_1 = \Phi_2 = 0$ и уравнение (12) можно было путем разделения переменных привести к виду

$$\omega_t' = \frac{1}{c} \left[(a\eta_{|x}')_x f + a(\eta_{|x}')^2 \left(\frac{f}{h} \right)_u + bgh \right]. \quad (66)$$

В разделе разд. 3.2 исследовался простейший случай линейной зависимости $\omega(t) = kt$, что сразу приводило к функционально-дифференциальному уравнению с двумя переменными типа (10).

В формулу (9) искомая функция $\omega(t)$ входит линейным образом. Если положить $\omega(t) = ke^{\lambda t}$ (k — произвольная постоянная), то решение принимает вид

$$H(u) = ke^{\lambda t} + \eta(x), \quad H(u) = \int h(u)du \quad (67)$$

и функцию $e^{\lambda t}$ можно исключить из уравнения (66) с помощью (67). В результате приходим к функционально-дифференциальному уравнению вида (10) при $N = 5$:

$$\lambda\eta - \lambda H + \frac{(a\eta'_x)'}{c}f + \frac{a(\eta'_x)^2}{c}\left(\frac{f}{h}\right)' + \frac{b}{c}gh = 0. \quad (68)$$

Замечание 9. Уравнение (68) можно вывести из других соображений. Действительно, представив (9) в виде соотношения

$$\xi\omega/(H - \eta) = 1, \quad (69)$$

умножим правую часть уравнения (66) на $\xi\omega/(H - \eta)$. В результате после элементарных преобразований с учетом равенства $\xi = 1$, имеем

$$\frac{\omega'_t}{\omega} = \frac{1}{c(H - \eta)} \left[(a\eta'_x)'_x f + a(\eta'_x)^2 \left(\frac{f}{h}\right)'_u + bgh \right]. \quad (70)$$

В уравнении (70) переменные разделены: его левая часть зависит только от t , а правая — от x и u . Приравняв обе части (70) константе λ , получим два уравнения. Левая часть (70) дает уравнение $\omega'_t/\omega = \lambda$, которое имеет решение $\omega = ke^{\lambda t}$. Правая часть (70) приводит к уравнению (68).

Решение 8. Уравнению (68) можно удовлетворить, если положить

$$f = C_1 u h + C_2 h, \quad g = \lambda \frac{H}{h} - C_1 C_3 u - C_2 C_3, \quad (71)$$

$$b = c, \quad (a\eta'_x)'_x = C_3 c, \quad C_1 a(\eta'_x)^2 + \lambda c \eta = 0,$$

где C_1, C_2, C_3 — произвольные постоянные. В соотношения (71) входят две произвольные функции h и c , а функции f, g, a, η через них выражаются.

Общее решение системы, состоящей из двух последних уравнений (71), имеет вид

$$\begin{aligned} a(x) &= \frac{C_5}{c(x)} \left[C_3 \int c(x) dx + C_4 \right]^{2+\lambda/(C_1 C_3)}, \\ \eta(x) &= -\frac{C_1}{C_5 \lambda} \left[C_3 \int c(x) dx + C_4 \right]^{-\lambda/(C_1 C_3)}, \end{aligned} \quad (72)$$

где C_4, C_5 — произвольные постоянные.

Пример 7. Полагая в (72) $c(x) = 1$, $C_1 = C_3 = C_5 = 1$, $C_2 = C_4 = 0$, $\lambda = n - 2$, получим $a(x) = x^n$, $\eta(x) = x^{2-n}/(2-n)$. Поэтому уравнение реакционно-диффузионного типа

$$\begin{aligned} u_t &= [x^n f(u) u_x]_x + g(u), \\ f &= u h(u), \quad g = \frac{(n-2)}{h(u)} \int h(u) du - u, \end{aligned} \quad (73)$$

где $h(u)$ — произвольная функция, $n \neq 2$ — произвольная постоянная, допускает точное решение с обобщенным разделением переменных в неявном виде

$$\int h(u) du = k e^{(n-2)t} + \frac{x^{2-n}}{2-n}, \quad (74)$$

k — произвольная постоянная. Уравнение (73) с учетом соотношения $h = f/u$ можно представить в явной форме

$$u_t = [x^n f(u) u_x]_x - u + \frac{(n-2)u}{f(u)} \int \frac{f(u)}{u} du,$$

а его решение записывается так:

$$\int \frac{f(u)}{u} du = k e^{(n-2)t} + \frac{x^{2-n}}{2-n}.$$

Решение 9. Уравнению (68) можно удовлетворить другим способом, если положить

$$f = 1, \quad g = \lambda \frac{H}{h} + C_1 \frac{h'_u}{h^3}, \quad (75)$$

$$b = c, \quad (a\eta'_x)'_x + \lambda c \eta = 0, \quad a(\eta'_x)^2 - C_1 c = 0,$$

где C_1 — произвольная постоянная. В соотношения (75) входят две произвольные функции h и c , а функции g, a, η через них выражаются.

Общее решение системы, состоящей из двух последних уравнений (75), имеет вид

$$\begin{aligned} a(x) &= \frac{C_4^2}{C_1 c(x)} \exp\left(-\frac{\lambda}{C_1} \eta^2\right), \\ \int \exp\left(-\frac{\lambda}{2C_1} \eta^2\right) d\eta &= \frac{C_1}{C_4} \int c(x) dx + C_5, \end{aligned} \quad (76)$$

где C_4, C_5 — произвольные постоянные (это решение можно представить в терминах функции, обратной интегралу вероятностей).

Замечание 10. Если в последних двух уравнениях (75) считать заданной функцию $\eta = \eta(x)$, то ее решение дается формулами

$$\begin{aligned} a(x) &= \frac{C_4}{\eta'_x(x)} \exp\left(-\frac{\lambda}{2C_1} \eta^2\right), \\ c(x) &= \frac{C_4}{C_1} \eta'_x(x) \exp\left(-\frac{\lambda}{2C_1} \eta^2\right). \end{aligned}$$

4.4. Модифицированная редукция, приводящая к $\omega = e^{\lambda t}$. Решение с обобщенным разделением переменных

Поскольку (9) можно представить в виде равенства (69) заменим в (12) член Φ_3 на $\xi\omega\Phi_3/(H - \eta)$. В результате приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \omega'_t &= \Phi_1(x, u)\omega^2 + [\Phi_2(x, u) + \Psi_2(x, u)]\omega, \\ \Psi_2(x, u) &= \frac{\xi(x)\Phi_3(x, u)}{H(u) - \eta(x)}, \quad H(u) = \int h(u) du, \end{aligned} \quad (77)$$

где функции $\Phi_n = \Phi_n(x, u)$ определены в (13).

Далее ограничимся анализом вырожденного случая $h = f$, что соответствует $\Phi_1 = 0$. Поскольку в полученном укороченном уравнении (77) переменные разделяются, находим $\omega = e^{\lambda t}$. В результате уравнение (77) преобразуется к виду

$$\frac{\lambda}{f} = \frac{(a\xi'_x)'_x}{c\xi} + \left[\frac{(a\eta'_x)'_x}{c} + \frac{b}{c}g \right] \frac{1}{F - \eta}, \quad F = \int f du. \quad (78)$$

Уравнению (78) можно удовлетворить, если положить

$$\begin{aligned} (a\xi'_x)'_x &= -k_1 c \xi, & \eta &= -k_2, \\ b &= c, & g &= \left(\frac{\lambda}{f} + k_1 \right) (F + k_2), \end{aligned} \quad (79)$$

где k_1 и k_2 — произвольные постоянные.

Решение 10. Из соотношений (79) следует, что нелинейное реакционно-диффузионное уравнение

$$\begin{aligned} c(x)u_t &= [a(x)f(u)u_x]_x + \\ &+ c(x) \left[\frac{\lambda}{f(u)} + k_1 \right] \left[\int f(u)du + k_2 \right], \end{aligned} \quad (80)$$

где $a(x)$, $c(x)$, $f(u)$ — произвольные функции, а k_1 , k_2 , λ — произвольные постоянные, допускает точное решение с обобщенным разделением переменных в неявной форме

$$\int f(u)du = \xi(x)e^{\lambda t} - k_2. \quad (81)$$

Здесь функция $\xi = \xi(x)$ определяется путем решения линейного обыкновенного дифференциального уравнения $[a(x)\xi'_x]'_x + k_1 c(x)\xi = 0$.

4.5. Модифицированная редукция, приводящая к $\omega = t^\beta$. Решение с обобщенным разделением переменных

Учитывая равенство (69), заменим в (12) два последних члена Φ_2 и Φ_3 соответственно на $\Phi_2[\xi\omega/(H - \eta)]^{n-1}$ и $\Phi_3[\xi\omega/(H - \eta)]^n$, где $n \neq 1$ — произвольная постоянная. В результате приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \omega'_r &= \Phi_1(x, u)\omega^2 + \Theta(x, u)\omega^n, \\ \Theta(x, u) &= \Phi_2(x, u) \left[\frac{\xi(x)}{H(u) - \eta(x)} \right]^{n-1} + \\ &+ \Phi_3(x, u) \left[\frac{\xi(x)}{H(u) - \eta(x)} \right]^n, \end{aligned} \quad (82)$$

где функции $\Phi_n = \Phi_n(x, u)$ определены в (13).

Как и ранее, ограничимся анализом вырожденного случая $h = f$, что соответствует $\Phi_1 = 0$. Поскольку в полученном укороченном уравне-

нии (82) переменные разделяются, можно положить $\omega = t^{1/(1-n)}$. В результате уравнение (82) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \frac{1}{(n-1)f} &= \frac{(a\xi'_x)'_x}{c\xi^{2-n}} \frac{1}{(F - \eta)^{n-1}} + \\ &+ \left[\frac{(a\eta'_x)'_x}{c\xi^{1-n}} + \frac{b}{c\xi^{1-n}}g \right] \frac{1}{(F - \eta)^n}, \end{aligned} \quad (83)$$

где $F = \int f du$. Уравнению (83) можно удовлетворить, если положить

$$\begin{aligned} (a\xi'_x)'_x &= -k_1 c \xi^{2-n}, & \eta &= -k_2, & b &= c \xi^{1-n}, \\ g &= k_1(F + k_2) + \frac{(F + k_2)^n}{(n-1)f}, \end{aligned} \quad (84)$$

где k_1 и k_2 — произвольные постоянные.

Решение 11. Из соотношений (84) следует, что нелинейное реакционно-диффузионное уравнение

$$\begin{aligned} c(x)u_t &= [a(x)f(u)u_x]_x + \\ &+ c(x)\xi^{1-n} \left\{ k_1[F(u) + k_2] + \frac{[F(u) + k_2]^n}{(n-1)f(u)} \right\}, \end{aligned} \quad (85)$$

где $a(x)$, $c(x)$, $f(u)$ — произвольные функции, а k_1 , k_2 , λ — произвольные постоянные, $F(u) = \int f(u)du$, допускает точное решение с обобщенным разделением переменных в неявной форме

$$\int f(u)du = \xi(x)t^{1/(1-n)} - k_2. \quad (86)$$

Здесь функция $\xi = \xi(x)$ в (85) и (86) описывается нелинейным обыкновенным дифференциальным уравнением

$$[a(x)\xi'_x]'_x + k_1 c(x)\xi^{2-n} = 0. \quad (87)$$

Отметим, что при $n = 2$ общее решение уравнения (87) имеет вид

$$\xi = -k_1 \int \frac{1}{a(x)} \left(\int c(x)dx \right) dx + C_1 \int \frac{dx}{a(x)} + C_2,$$

где C_1 и C_2 — произвольные постоянные.

Пример 8. Полагая в (85)–(87) $a(x) = c(x) = 1$, $k_1 = 0$, $C_1 = 1$, $C_2 = 0$, получим уравнение

$$\begin{aligned} u_t &= [f(u)u_x]_x + x^{1-n} \frac{[F(u) + k_2]^n}{(n-1)f(u)}, \\ F(u) &= \int f(u)du, \end{aligned} \quad (88)$$

которое допускает точное решение в неявном виде $\int f(u)du = xt^{1/(1-n)} - k_2$. Это решение является инвариантным решением автомодельного ви-

да, которое обращает в нуль слагаемое $[f(u)u_x]_x$ в уравнении (88).

5. КРАТКИЕ ВЫВОДЫ

Описаны различные классы нелинейных уравнений реакционно-диффузионного типа с переменными коэффициентами, которые допускают точные решения. Решения ищутся в виде неявной зависимости, которая содержит несколько свободных функций (эти функции определяются в ходе дальнейшего анализа). Особое внимание уделено нелинейным реакционно-диффузионным уравнениям общего вида, которые зависят от одной или нескольких произвольных функций. Получено много новых точных решений типа обобщенной бегущей волны и решений с функциональным разделением переменных.

Работа выполнена по теме государственного задания (№ госрегистрации АААА-А17-117021310385-6) и при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-29-10025).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Овсянников Л.В. Групповые свойства уравнений нелинейной теплопроводности // Доклады АН СССР. 1959. Т. 125. № 3. С. 492–495.
2. Дородницын В.А. Об инвариантных решениях уравнения нелинейной теплопроводности с источником // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1982. Т. 22. № 6. С. 1393–1400.
3. Galaktionov V.A., Dorodnitsyn V.A., Yelenin G.G., Kurdyumov S.P., Samarskii A.A. A quasilinear equation of heat conduction with a source: peaking, localization, symmetry, exact solutions, asymptotic behavior, structures // J. Soviet Math. 1988. V. 41. № 5. P. 1222–1292.
4. Kudryashov N.A. On exact solutions of families of Fisher equations // Theor. Math. Phys. 1993. V. 94. № 2. P. 211–218.
5. Clarkson P.A., Mansfield E.L. Symmetry reductions and exact solutions of a class of nonlinear heat equations // Phys. D. 1994. V. 70. P. 250–288.
6. Galaktionov V.A. Quasilinear heat equations with first-order sign-invariants and new explicit solutions // Nonlinear Anal. Theory. Methods. Appl. 1994. V. 23. P. 1595–621.
7. Ibragimov N.H. (Editor). CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations. Symmetries, Exact solutions and Conservation Laws, Vol. 1. Boca Raton: CRC Press, 1994.
8. Зайцев В.Ф., Полянин А.Д. Справочник по дифференциальным уравнениям с частными производными: Точные решения. М.: Международная программа образования, 1996.
9. Doyle Ph.W., Vassiliou P.J. Separation of variables for the 1-dimensional non-linear diffusion equation // Int. J. Non-Linear Mech. 1998. V. 33. № 2. P. 315–326.
10. Hood S. On direct, implicit reductions of a nonlinear diffusion equation with an arbitrary function – generalizations of Clarkson's and Kruskal's method // IMA J. Appl. Math. 2000. V. 64. № 3. P. 223–244.
11. Estevez P.G., Qu C., Zhang S. Separation of variables of a generalized porous medium equation with nonlinear source // J. Math. Anal. Appl. 2002. V. 275. P. 44–59.
12. Полянин А.Д., Зайцев В.Ф. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики. М.: Физматлит, 2002.
13. Kaptsov O.V., Verevkin I.V. Differential constraints and exact solutions of nonlinear diffusion equations // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. V. 36. P. 1401–1414.
14. Полянин А.Д., Зайцев В.Ф., Журов А.И. Методы решения нелинейных уравнений математической физики и механики. М.: Физматлит, 2005.
15. Cherniha R.M., Plukhin O. New conditional symmetries and exact solutions of nonlinear reaction–diffusion–convection equations // J. Physics A: Math. Theor. 2007. V. 40. № 33. P. 10049–10070.
16. Galaktionov V.A., Svirshchevskii S.R. Exact Solutions and Invariant Subspaces of Nonlinear Partial Differential Equations in Mechanics and Physics. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2007.
17. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations, 2nd Edition. Boca Raton: CRC Press, 2012 (see also 1st Edition, 2004).
18. Cherniha R.M., Plukhin O. New conditional symmetries and exact solutions of reaction–diffusion–convection equations with exponential nonlinearities // J. Math. Anal. Appl. 2013. V. 403. P. 23–37.
19. Cherniha R., Serov M., Plukhin O. Nonlinear Reaction–Diffusion–Convection Equations: Lie and Conditional Symmetry, Exact Solutions and Their Applications. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2018.
20. Vaneeva O.O., Johnpillai A.G., Popovych R.O., Sophocleous C. Extended group analysis of variable coefficient reaction–diffusion equations with power nonlinearities // J. Math. Anal. Appl. 2007. V. 330. № 2. P. 1363–1386.
21. Vaneeva O.O., Popovych R.O., Sophocleous C. Enhanced group analysis and exact solutions of variable coefficient semilinear diffusion equations with a power source // Acta Applicandae Mathematicae. 2009. V. 106. № 1. P. 1–46.
22. Vaneeva O.O., Popovych R.O., Sophocleous C. Extended group analysis of variable coefficient reaction–diffusion equations with exponential nonlinearities // J. Math. Anal. Appl. 2012. V. 396. P. 225–242.
23. Vaneeva O., Zhalij A. Group classification of variable coefficient quasilinear reaction–diffusion equations // Publications de L'Institut Mathématique (Nouvelle série). 2013. V. 94. № 108. P. 81–90.
24. Polyanin A.D. Functional separable solutions of nonlinear reaction–diffusion equations with variable coefficients // Appl. Math. Comput. 2019. V. 347. P. 282–292.
25. Gandarias M.L., Romero J.L., Díaz J.M. Nonclassical symmetry reductions of a porous medium equation with convection // J. Phys. A: Math. Gen. 1999. V. 32. P. 1461–1473.

26. *Popovych R.O., Ivanova N.M.* New results on group classification of nonlinear diffusion–convection equations // *J. Physics A: Math. General.* 2004. V. 37. № 30. P. 7547–7565.
27. *Ivanova N.M., Sophocleous C.* On the group classification of variable-coefficient nonlinear diffusion-convection equations // *J. Comput. Applied Math.* 2006. V. 197. № 2. P. 322–344.
28. *Ivanova N.M.* Exact solutions of diffusion-convection equations // *Dynamics of PDE.* 2008. V. 5. № 2. P. 139–171.
29. *Vaneeva O.O., Popovych R.O., Sophocleous C.* Group analysis of variable coefficient diffusion-convection equations. I. Enhanced group classification // *Lobachevskii J. Mathematics.* 2010. V. 31. № 2. P. 100–122.
30. *Basarab-Horwath P., Lahno V., Zhdanov R.* The structure of Lie algebras and the classification problem for partial differential equations // *Acta Appl. Math.* 2001. V. 69. P. 43–94.
31. *Лагно В.И., Спичак С.В., Стогний В.И.* Симметричный анализ уравнений эволюционного типа. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004.
32. *Jia H., Zhao W.X.X., Li Z.* Separation of variables and exact solutions to nonlinear diffusion equations with x -dependent convection and absorption // *J. Math. Anal. Appl.* 2008. V. 339. P. 982–995.
33. *Cherniha R., Davydovych V.* Nonlinear Reaction-Diffusion Systems: Conditional Symmetry, Exact Solutions and Their Applications in Biology. Springer, 2017.
34. *Meleshko S.V., Moyo S.* On the complete group classification of the reaction–diffusion equation with a delay // *J. Math. Anal. Appl.* 2008. V. 338. P. 448–466.
35. *Polyanin A.D., Zhurov A.I.* Exact solutions of linear and non-linear differential-difference heat and diffusion equations with finite relaxation time // *Int. J. Non-Linear Mech.* 2013. V. 54. P. 115–126.
36. *Polyanin A.D., Zhurov A.I.* Exact separable solutions of delay reaction-diffusion equations and other nonlinear partial functional-differential equations // *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 2014. V. 19. № 3. P. 409–416.
37. *Polyanin A.D., Zhurov A.I.* Functional constraints method for constructing exact solutions to delay reaction-diffusion equations and more complex nonlinear equations // *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 2014. V. 19. № 3. P. 417–430.
38. *Polyanin A.D., Zhurov A.I.* New generalized and functional separable solutions to non-linear delay reaction-diffusion equations // *Int. J. Non-Linear Mech.* 2014. V. 59. P. 16–22.
39. *Polyanin A.D., Zhurov A.I.* Nonlinear delay reaction-diffusion equations with varying transfer coefficients: Exact methods and new solutions // *Appl. Math. Letters* 2014. V. 37. P. 43–48.
40. *Polyanin A.D., Zhurov A.I.* The functional constraints method: Application to non-linear delay reaction-diffusion equations with varying transfer coefficients // *Int. J. Non-Linear Mech.* 2014. V. 67. P. 267–277.
41. *Polyanin A.D., Sorokin V.G.* Nonlinear delay reaction-diffusion equations: Traveling-wave solutions in elementary functions // *Appl. Math. Letters* 2015. V. 46. P. 38–43.
42. *Polyanin A.D.* Generalized traveling-wave solutions of nonlinear reaction–diffusion equations with delay and variable coefficients // *Appl. Math. Letters* 2019. V. 90. P. 49–53.
43. *Polyanin A.D., Zaitsev V.F.* Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations, 2nd Edition. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2003.
44. *Polyanin A.D., Zaitsev V.F.* Handbook of Ordinary Differential Equations: Exact Solutions, Methods, and Problems. Boca Raton: CRC Press, 2018.

Vestnik Nacional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 3, pp. 323–336

Nonlinear Reaction–Diffusion Equations with Variable Coefficients: Method for Finding Exact Solutions in an Implicit Form

A. D. Polyanin^{a,b,c,#}

^a *Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119526 Russia*

^b *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*

^c *Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005 Russia*

[#]*e-mail: polyanin@ipmnet.ru*

Received December 21, 2018; accepted January 16, 2019

Abstract—Various classes of nonlinear reaction–diffusion equations with variable coefficients $c(x)u_t = [a(x)f(u)u_x]_x + b(x)g(u)$, which admit exact solutions, have been considered. A new method has been presented for finding exact solutions of such and more complex nonlinear equations of mathematical physics, which is based on the representation of the solution in the implicit form $\int h(u)du = \xi(x)\omega(t) + \eta(x)$,

where the functions $h(u)$, $\xi(x)$, $\eta(x)$, and $\alpha(t)$ are determined during the study of arising functional differential equations. Examples of specific reaction–diffusion equations and their exact solutions are given. The main attention is paid to nonlinear equations of a sufficiently general form, which contain several arbitrary functions that depend on the desired function u and the spatial variable x . Many new generalized traveling-wave solutions and functional separable solutions are described. It is important to note that solutions of such types are usually noninvariant (i.e., they cannot be obtained by classical Lie group analysis of differential equations).

Keywords: nonlinear reaction–diffusion equations, nonlinear equations with variable coefficients, exact solutions in an implicit form, generalized traveling-wave solutions, functional separable solutions

DOI: 10.1134/S2304487X1903009X

REFERENCES

1. Ovsiannikov L.V., Gruppovye svoystva uravneniy nelineynoy teploprovodnosti (Group properties of nonlinear heat equations), *Doklady Acad. Nauk USSR*, 1959, vol. 125, no. 3, pp. 492–495 (in Russian).
2. Dorodnitsyn V.A., Ob invariantnykh resheniyakh uravneniya nelineynoy teploprovodnosti s istochnikom (On invariant solutions of the nonlinear heat equation with a source), *Zhurnal Vychislitel'noi Matematiki i Matematicheskoi Fiziki*, 1982, vol. 22, no. 6, pp. 1393–1400 (in Russian).
3. Galaktionov V.A., Dorodnitsyn V.A., Yelenin G.G., Kurdyumov S.P., Samarskii A.A., A quasilinear equation of heat conduction with a source: peaking, localization, symmetry, exact solutions, asymptotic behavior, structures, *J. Soviet Math.*, 1988, vol. 41, no. 5, pp. 1222–1292.
4. Kudryashov N.A., On exact solutions of families of Fisher equations, *Theor. Math. Phys.*, 1993, vol. 94, no. 2, pp. 211–218.
5. Clarkson P.A., Mansfield E.L., Symmetry reductions and exact solutions of a class of nonlinear heat equations, *Phys. D*, 1994, vol. 70, pp. 250–288.
6. Galaktionov V.A., Quasilinear heat equations with first-order sign-invariants and new explicit solutions, *Nonlinear Anal. Theory. Methods. Appl.*, 1994, vol. 23, pp. 1595–621.
7. Ibragimov N.H. (Ed.), *CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations. Symmetries, Exact solutions and Conservation Laws*, vol. 1, Boca Raton: CRC Press, 1994.
8. Zaitsev V.F., Polyanin A.D., *Spravochnik po differentsial'nym uravneniyam s chastnymi proizvodnymi: tochnyye resheniya* (Handbook of Partial Differential Equations: Exact Solutions), Moscow, International Program of Education, 1996 (in Russian).
9. Doyle Ph.W., Vassiliou P.J., Separation of variables for the 1-dimensional non-linear diffusion equation, *Int. J. Non-Linear Mech.*, 1998, vol. 33, no. 2, pp. 315–326.
10. Hood S., On direct, implicit reductions of a nonlinear diffusion equation with an arbitrary function – generalizations of Clarkson's and Kruskal's method, *IMA J. Appl. Math.*, 2000, vol. 64, no. 3, pp. 223–244.
11. Estevez P.G., Qu C., Zhang S., Separation of variables of a generalized porous medium equation with nonlinear source, *J. Math. Anal. Appl.*, 2002, vol. 275, pp. 44–59.
12. Polyanin A.D., Zaitsev V.F., *Spravochnik po nelineynym uravneniyam matematicheskoy fiziki* (Handbook of nonlinear equations of mathematical physics), Moscow, Fizmatlit, 2002 (in Russian).
13. Kaptsov O.V., Verevkin I.V., Differential constraints and exact solutions of nonlinear diffusion equations, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 2003, vol. 36, pp. 1401–1414.
14. Polyanin A.D., Zaitsev V.F., Zhurov A.I., *Metody resheniya nelineynykh uravnenii matematicheskoi fiziki i mekhaniki* (Solution methods for nonlinear equations of mathematical physics and mechanics), Moscow, Fizmatlit, 2005 (in Russian).
15. Cherniha R.M., Pliukhin O., New conditional symmetries and exact solutions of nonlinear reaction–diffusion–convection equations, *J. Physics A: Math. Theor.*, 2007, vol. 40, no. 33, pp. 10049–10070.
16. Galaktionov V.A., Svirshchevskii S.R., *Exact Solutions and Invariant Subspaces of Nonlinear Partial Differential Equations in Mechanics and Physics*, Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2006.
17. Polyanin A.D., Zaitsev V.F., *Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations*, 2nd Ed., Boca Raton: CRC Press, 2012 (see also 1st Edition, 2004).
18. Cherniha R.M., Pliukhin O., New conditional symmetries and exact solutions of reaction–diffusion–convection equations with exponential nonlinearities, *J. Math. Anal. Appl.*, 2013, vol. 403, pp. 23–37.
19. Cherniha R., Serov M., Pliukhin O., *Nonlinear Reaction-Diffusion-Convection Equations: Lie and Conditional Symmetry, Exact Solutions and Their Applications*, Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2018.
20. Vaneeva O.O., Johnpillai, A.G., Popovycha R.O., Sophocleous C., Extended group analysis of variable coefficient reaction–diffusion equations with power nonlinearities, *J. Math. Anal. Appl.*, 2007, vol. 330, no. 2, pp. 1363–1386.
21. Vaneeva O.O., Popovych R.O., Sophocleous C., Enhanced group analysis and exact solutions of variable coefficient semilinear diffusion equations with a power source, *Acta Applicandae Mathematicae*, 2009, vol. 106, no. 1, pp. 1–46.
22. Vaneeva O.O., Popovych R.O., Sophocleous C., Extended group analysis of variable coefficient reaction–diffusion equations with exponential nonlinearities, *J. Math. Anal. Appl.*, 2012, vol. 396, pp. 225–242.
23. Vaneeva O., Zhalij A., Group classification of variable coefficient quasilinear reaction–diffusion equations,

- Publications de L'Institut Mathématique (Nouvelle série)*, 2013, vol. 94, no. 108, pp. 81–90.
24. Polyanin A.D., Functional separable solutions of nonlinear reaction–diffusion equations with variable coefficients, *Appl. Math. Comput.*, 2019, vol. 347, pp. 282–292.
 25. Gandarias M.L., Romero J.L., Díaz J.M., Nonclassical symmetry reductions of a porous medium equation with convection, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1999, vol. 32, 1461–1473.
 26. Popovych R.O., Ivanova N.M., New results on group classification of nonlinear diffusion–convection equations, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 2004, vol. 37, no. 30, pp. 7547–7565.
 27. Ivanova N.M., Sophocleous C., On the group classification of variable-coefficient nonlinear diffusion–convection equations, *J. Comput. Applied Math.*, 2006, vol. 197, no. 2, pp. 322–344.
 28. Ivanova N.M., Exact solutions of diffusion–convection equations, *Dynamics of PDE*, 2008, vol. 5, no. 2, pp. 139–171.
 29. Vaneeva O.O., Popovych R.O., Sophocleous C., Group analysis of variable coefficient diffusion–convection equations. I. Enhanced group classification, *Lobachevskii J. Mathematics*, 2010, vol. 31, no. 2, pp. 100–122.
 30. Basarab-Horwath P., Lahno V., Zhdanov R., The structure of Lie algebras and the classification problem for partial differential equations, *Acta Appl. Math.*, 2001, vol. 69, pp. 43–94.
 31. Lagno V.I., Spichak S.V., Stognii V.I., *Simmetriyny analiz uravneniy evolyutsionnogo tipa* (Symmetry analysis of evolution type equations), Moskva–Izhevsk: Institute of Computer Sciences, 2004 (in Russian).
 32. Jia H., Zhao W.X.X., Li Z., Separation of variables and exact solutions to nonlinear diffusion equations with x -dependent convection and absorption, *J. Math. Anal. Appl.*, 2008, vol. 339, pp. 982–995.
 33. Cherniha R., Davydovych V., *Nonlinear Reaction-Diffusion Systems: Conditional Symmetry, Exact Solutions and Their Applications in Biology*, Springer, 2017.
 34. Meleshko S.V., Moyo S., On the complete group classification of the reaction–diffusion equation with a delay, *J. Math. Anal. Appl.*, 2008, vol. 338, pp. 448–466.
 35. Polyanin A.D., Zhurov A.I., Exact solutions of linear and non-linear differential-difference heat and diffusion equations with finite relaxation time, *Int. J. Non-Linear Mech.*, 2013, vol. 54, pp. 115–126.
 36. Polyanin A.D., Zhurov A.I., Exact separable solutions of delay reaction–diffusion equations and other nonlinear partial functional-differential equations, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 2014, vol. 19, no. 3, pp. 409–416.
 37. Polyanin A.D., Zhurov A.I., Functional constraints method for constructing exact solutions to delay reaction–diffusion equations and more complex nonlinear equations, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 2014, vol. 19, no. 3, pp. 417–430.
 38. Polyanin A.D., Zhurov A.I., New generalized and functional separable solutions to non-linear delay reaction–diffusion equations, *Int. J. Non-Linear Mech.*, 2014, vol. 59, pp. 16–22.
 39. Polyanin A.D., Zhurov A.I., Nonlinear delay reaction–diffusion equations with varying transfer coefficients: Exact methods and new solutions, *Appl. Math. Letters*, 2014, vol. 37, pp. 43–48.
 40. Polyanin A.D., Zhurov A.I., The functional constraints method: Application to non-linear delay reaction–diffusion equations with varying transfer coefficients, *Int. J. Non-Linear Mech.*, 2014, vol. 67, pp. 267–277.
 41. Polyanin A.D., Sorokin V.G., Nonlinear delay reaction–diffusion equations: Traveling-wave solutions in elementary functions, *Appl. Math. Letters*, 2015, vol. 46, pp. 38–43.
 42. Polyanin A.D., Generalized traveling-wave solutions of nonlinear reaction–diffusion equations with delay and variable coefficients, *Appl. Math. Letters*, 2019, vol. 90, pp. 49–53.
 43. Polyanin A.D., Zaitsev V.F., *Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations*, 2nd Ed., Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2003.
 44. Polyanin A.D., Zaitsev V.F., *Handbook of Ordinary Differential Equations: Exact Solutions, Methods, and Problems*, Boca Raton: CRC Press, 2018.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

УДК 517.9

АНАЛИТИЧЕСКИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ СВОЙСТВА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ БАЛАНСА ИНСУЛИН–ГЛЮКОЗА В КРОВИ ЧЕЛОВЕКА

© 2019 г. К. В. Кан^{1,*}, Н. А. Кудряшов^{1,**}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

*e-mail: kan_13@mail.ru

**e-mail: nakudr@gmail.com

Поступила в редакцию 13.05.2019 г.

После доработки 23.05.2019 г.

Принята к публикации 28.05.2019 г.

Математическая модель баланса инсулин–глюкоза описывает изменение концентраций инсулина и глюкозы в крови человека с течением времени. Важность моделей подобного рода состоит в том, что исследование концентраций указанных веществ в крови человека помогает в изучении методов лечения такого серьезного заболевания, как сахарный диабет. В работе представлены численные и аналитические свойства рассматриваемой модели, которая представляет собой систему из двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка в совокупности с начальными условиями. Проведена проверка системы на тест Пенлеве в двух частных случаях, предполагающих, что уровень концентрации глюкозы находится вне допустимого интервала значений: гипогликемия и гипергликемия. Найдены частные аналитические решения с учетом условий, при которых система проходит тест Пенлеве. Получены асимптотические решения для случаев гипогликемии и гипергликемии. В случае гипергликемии решение описывается гипергеометрическими функциями Куммера и Трикоми. Построены и проанализированы графики аналитических решений. С помощью метода Рунге–Кутты четвертого порядка найдены численные решения системы с учетом различных внешних источников глюкозы. Построены графики численных решений, показавшие колебания концентрации глюкозы, соответствующие результатам медицинских исследований в области лечения сахарного диабета.

Ключевые слова: модель баланса инсулин–глюкоза, нелинейные дифференциальные уравнения, тест Пенлеве, численное решение, точные решения, асимптотики

DOI: 10.1134/S2304487X19040059

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из заболеваний, не поддающихся полному излечению, является сахарный диабет (СД). В 2011 году на Первой глобальной министерской конференции по здоровому образу жизни и неинфекционным заболеваниям СД наряду с сердечно-сосудистыми, онкологическими и заболеваниями легких, определен как неинфекционное заболевание, требующее принятия немедленных действий по его профилактике [1].

Исследования и поиск новых методов лечения СД связаны с изучением баланса между инсулином и глюкозой. Методы математического моделирования помогают понять динамики концентраций инсулина и глюкозы в крови человека. Более подробная информация о направлениях в

математическом моделировании системы баланса инсулин–глюкоза дана в [2, 3].

Математическая модель представляет собой совокупность дифференциальных уравнений и начальных условий. Очевидно, что при этом встает вопрос о том, какими свойствами обладает система с математической точки зрения, так как эта информация помогает лучше понимать как саму модель в целом, так и то, какие ограничения на параметры необходимо задать для получения наиболее близких к реальным данным значений.

В данной работе в качестве основы для исследования на аналитические и численные свойства взята математическая модель из [4], которая имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
u_t &= \alpha(v - v_0)\theta(v - v_0) - \beta vu, \\
v_t &= \gamma(v_0 - v)\theta(v_0 - v) - \sigma vu - \\
&\quad - \mu(v - v_{cr})\theta(v - v_{cr}) + S(t), \\
u(0) &= d_1, \\
v(0) &= d_2,
\end{aligned} \quad (1.1)$$

где u — инсулин, v — глюкоза, $S(t)$ — внешний источник глюкозы и $\alpha, \beta, \gamma, \sigma, \mu, v_0, v_{cr}, d_1, d_2$ — положительные параметры.

Данная система при заданных начальных условиях позволяет смоделировать поведение глюкозы в крови человека с течением времени.

2. ПРОВЕРКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ БАЛАНСА ИНСУЛИН–ГЛЮКОЗА НА СВОЙСТВО ПЕНЛЕВЕ

С использованием алгоритма Ковалевской, описанного в [5], была проведена проверка системы (1.1) на тест Пенлеве в некоторых частных случаях. При этом полагаем, что внешний источник глюкозы отсутствует, т.е. $S(t) = 0$.

Рассмотрим систему (1.1) в случае, когда $v < v_0$.

В этом случае система (1.1) принимает вид:

$$\begin{aligned}
u_t &= -\beta vu, \\
v_t &= \gamma(v_0 - v) - \sigma vu.
\end{aligned} \quad (2.1)$$

Выражая из второго уравнения системы $u(t)$ и подставляя в первое, получаем уравнение следующего вида:

$$\beta\gamma v_0 v^2 - \beta\gamma v^3 - \beta v^2 v_t - \gamma v_0 v_t - v v_{tt} + v_t^2 = 0. \quad (2.2)$$

Выделим ведущие члены уравнения:

$$-\beta v^2 v_t - v v_{tt} + v_t^2 = 0. \quad (2.3)$$

С помощью замены

$$v(t) = \frac{a_0}{t^p}$$

определяем, что

$$p = 1; \quad a_0 = \frac{1}{\beta}.$$

Тогда вводя новую замену

$$v(t) = \frac{1}{\beta t} + Bt^{r-1}$$

и приравнявая полином при B первой степени нулю:

$$(r+1)(r-1) = 0,$$

находим индексы Фукса: $r_{1,2} = \begin{bmatrix} -1; \\ 1. \end{bmatrix}$

Это позволяет, в свою очередь, определить, какой вид имеет ряд Лорана в данном случае:

$$w(t) = \frac{1}{\beta t} + a_1. \quad (2.4)$$

Подставляя (2.4) в исходное уравнение (2.2), получаем следующее:

$$\begin{aligned}
&a_1^2 \beta \gamma (a_1 - v_0) + \frac{a_1 \gamma (3a_1 - 2v_0)}{t} - \\
&- \frac{a_1^2 \beta - 3a_1 \gamma + 2\gamma v_0}{\beta t^2} + \frac{\gamma}{\beta^2 t^3} = 0,
\end{aligned}$$

откуда видно, что исходное уравнение (2.2) проходит тест Пенлеве в том случае, если:

$$\gamma = 0.$$

Рассмотрим систему (1.1) в случае, когда $v > v_{cr}$.

Тогда система (1.1) принимает вид:

$$\begin{aligned}
u_t &= \alpha(v - v_0) - \beta vu, \\
v_t &= -\sigma vu - \mu(v - v_{cr}).
\end{aligned} \quad (2.5)$$

Аналогично, выражая из второго уравнения системы $u(t)$ и подставляя в первое, получаем уравнение следующего вида:

$$\begin{aligned}
&\mu v_{cr} v_t + v v_{tt} - v_t^2 + \sigma \alpha v^3 - \sigma \alpha v_0 v^2 + \\
&+ \beta \mu v^3 - \beta \mu v_{cr} v^2 + \beta v^2 v_t = 0.
\end{aligned} \quad (2.6)$$

Выделяем ведущие члены:

$$v v_{tt} - v_t^2 + \beta v^2 v_t = 0. \quad (2.7)$$

Производя замену

$$v(t) = \frac{a_0}{t^p},$$

получаем, что

$$a_0 = \frac{1}{\beta}, \quad p = 1.$$

Тогда в уравнение (2.7) подставляем

$$v(t) = \frac{1}{\beta t} + Bt^{r-1}$$

и приравнявая множитель при B нулю:

$$r^2 - r + 2 + r - 3 = 0,$$

находим индексы Фукса: $r_{1,2} = \begin{bmatrix} -1; \\ 1. \end{bmatrix}$

Следовательно, ряд Лорана будет иметь следующий вид:

$$w(t) = \frac{1}{\beta t} + a_1. \quad (2.8)$$

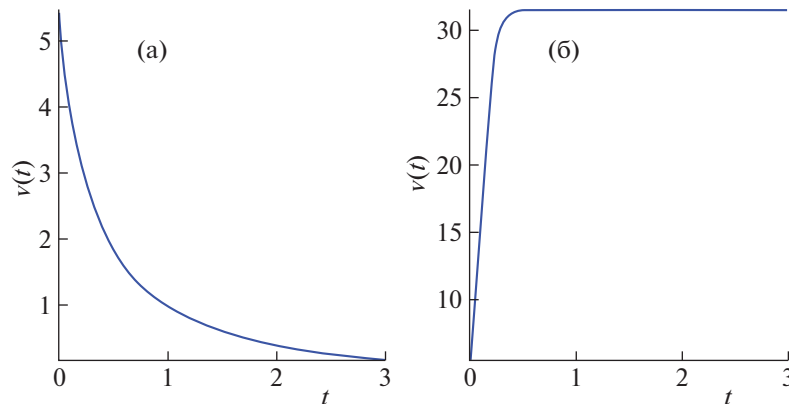


Рис. 1. Графики аналитического решения уравнения (3.2) при $\beta = 0.5$, $v(0) = 5.5$ (а) $C_1 < 0$ (б) $C_1 > 0$.

Подставляя его в исходное уравнение (2.6), получаем следующее:

$$\begin{aligned} & a_1^2(\sigma\alpha v_0 + \beta\mu v_{cr} - \sigma\alpha a_1 - \beta\mu a_1) + \\ & + \frac{a_1(2\sigma\alpha v_0 + 2\beta\mu v_{cr} - 3\sigma\alpha a_1 - 3\beta\mu a_1)}{\beta t} + \\ & + \frac{a_1^2\beta^2 + \sigma\alpha v_0 + 2\beta\mu v_{cr} - 3\sigma\alpha a_1 - 3\beta\mu a_1}{\beta^2 t^2} - \\ & - \frac{\sigma\alpha + \beta\mu}{\beta^3 t^3} = 0, \end{aligned}$$

откуда видно, что уравнение проходит тест Пенлеве в том случае, если:

$$\alpha\sigma + \beta\mu = 0.$$

3. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим систему (1.1) в случае, когда $v < v_0$.

С учетом условия, при котором система (1.1) проходит тест Пенлеве: $\gamma = 0$ уравнение (2.2) принимает вид:

$$v_t^2 - \beta v^2 v_t - v v_{tt} = 0. \quad (3.1)$$

После проведения ряда преобразований уравнение (3.1) сводится к уравнению Риккати:

$$v_t + \beta v^2 - C_1 v = 0. \quad (3.2)$$

Решение (3.2) имеет вид:

$$v(t) = \frac{C_1}{e^{-C_1 t} C_2 C_1 + \beta}.$$

Из графиков на рис. 1 видно, как уровень глюкозы достигает некоторой минимальной или максимальной отметки, после чего изменения концентрации становятся незначительными. В обоих случаях концентрация глюкозы доходит до уровня, при котором человек может впасть в гипогликемическую кому.

Рассмотрим систему (1.1) в случае, когда $v > v_{cr}$.

С учетом условия, при котором система (1.1) удовлетворяет тесту Пенлеве

$$\mu = -\frac{\alpha\sigma}{\beta},$$

уравнение (2.6) переписывается в виде:

$$\begin{aligned} & -\beta v v_{tt} + \beta v_t^2 - \beta^2 v^2 v_t + v_{cr} \alpha \sigma v_t + \\ & + \beta \alpha \sigma v^2 (\gamma - v_{cr}) = 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

После проведения ряда преобразований уравнение (3.3) сводится к виду:

$$\beta v_t = C_2 v + \alpha \beta \sigma (v_0 - v_{cr}) t v - \beta^2 v^2 - v_{cr} \alpha \sigma. \quad (3.4)$$

Решение (3.4) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} v(t) = & \frac{2f_1(t)C_2 h_1 T \left(\frac{h_1 - v_{cr}}{2h_1}, \frac{3}{2}, \frac{f_2^2(t)}{h_1 h_2} \right) + f_1(t)K \left(\frac{h_1 - v_{cr}}{2h_1}, \frac{3}{2}, \frac{f_2^2(t)}{h_1 h_2} \right)}{\beta^2 \left(2C_2 h_1 T \left(\frac{h_1 - v_{cr}}{2h_1}, \frac{3}{2}, \frac{f_2^2(t)}{h_1 h_2} \right) + K \left(\frac{h_1 - v_{cr}}{2h_1}, \frac{3}{2}, \frac{f_2^2(t)}{h_1 h_2} \right) \right) f_2(t)} - \\ & - \frac{2h_2 \left[C_2 h_1^2 T \left(-\frac{h_1 + v_{cr}}{2h_1}, \frac{3}{2}, \frac{f_2^2(t)}{h_1 h_2} \right) - \frac{1}{2} K \left(-\frac{h_1 + v_{cr}}{2h_1}, \frac{3}{2}, \frac{f_2^2(t)}{h_1 h_2} \right) \left(h_1 + \frac{v_{cr}}{2} \right) \right]}{\beta^2 \left(2C_2 h_1 T \left(\frac{h_1 - v_{cr}}{2h_1}, \frac{3}{2}, \frac{f_2^2(t)}{h_1 h_2} \right) + K \left(\frac{h_1 - v_{cr}}{2h_1}, \frac{3}{2}, \frac{f_2^2(t)}{h_1 h_2} \right) \right) f_2(t)}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

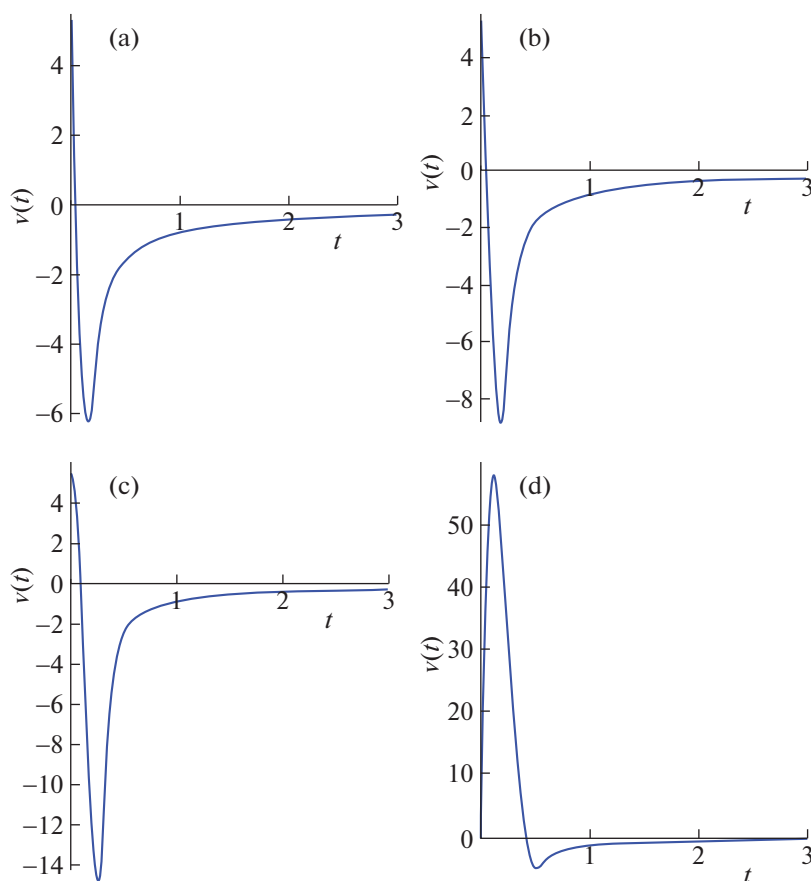


Рис. 2. Графики аналитического решения уравнения (3.4) при $\alpha = 3$, $\beta = 0.5$, $\sigma = 22\beta$, $v_0 = 5.5$, $v_{cr} = 10$, (a) $C_2 = 1$, (b) $C_2 = 5$, (c) $C_2 = 12$, (d) $C_2 = 25$.

где $K(a, b, z)$, $T(a, b, z)$ – сливающиеся гипергеометрические функции Куммера и Трикоми соответственно, имеющие следующий вид:

$$K(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{(n)} z^n}{b^{(n)} n!},$$

где $a^{(0)} = 1$, $a^{(n)} = a(a+1)(a+2)\dots(a+n-1)$;

$$T(a, b, z) = \frac{\Gamma(1-b)}{\Gamma(a+1-b)} K(a, b, z) + \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} z^{1-b} K(a+1-b, 2-b, z),$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция;

$$\begin{aligned} f_1(t) &= \sigma\alpha(t^2\sigma(v_0 - v_{cr})^2\alpha - v_0)\beta^2 + \\ &+ 2tC_1\alpha\sigma(v_0 - v_{cr})\beta + C_1^2; \\ f_2(t) &= C_1 + \alpha\beta\sigma(v_0 - v_{cr})t; \\ h_1 &= v_0 - v_{cr}; \\ h_2 &= 2\alpha\sigma\beta^2. \end{aligned}$$

Так же, как и на рис. 1, графики на рис. 2 показывают, как уровень глюкозы опускается или поднимается (случай (d)) до значения, при котором человек может впасть в гипогликемическую кому.

4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Численное решение производилось с помощью метода Рунге–Кутты четвертого порядка.

Результаты численного расчета с учетом того, что внешний источник глюкозы $S(t)$ представлен следующей зависимостью:

$$S(t) = Ae^{-\frac{(t-1)^2}{2D^2}},$$

где $D^2 = \frac{1}{32}$ – дисперсия, $A = 124$ – амплитуда, представлены на 3. Такие значения параметров соответствуют случаю, когда глюкоза эффективно усваивается в течение получаса, а суммарное потребление глюкозы 50 г. Расчеты производятся с учетом того, что объем крови равен 5 литрам [4].

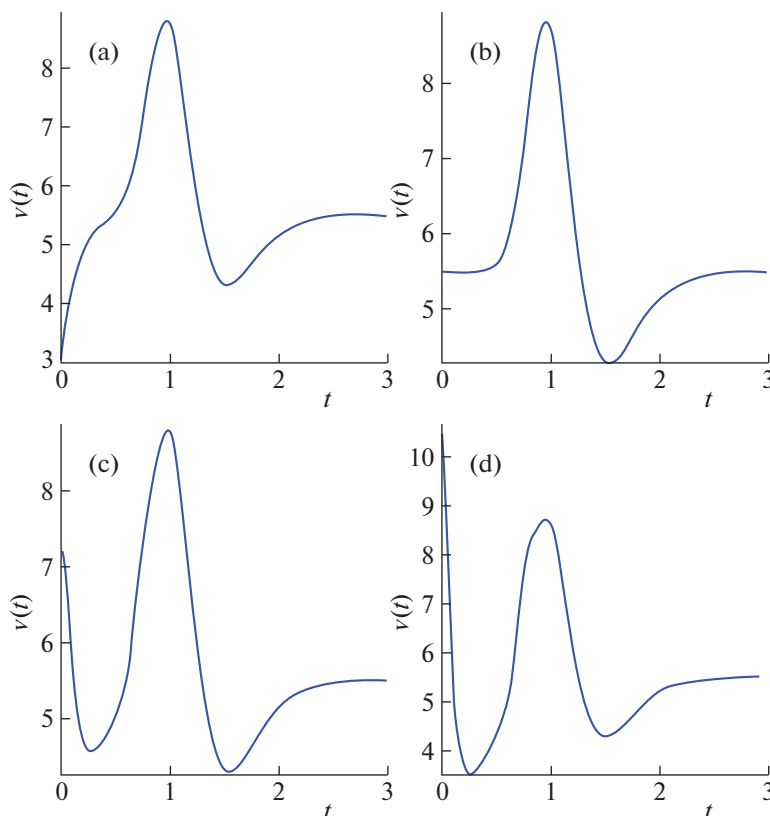


Рис. 3. Графики численного моделирования системы (1.1) при $\alpha = 2$, $\beta = 1.1$, $\sigma = 22\beta$, $\gamma = 7$, $\mu = 5$, $v_0 = 5.5$, $v_{cr} = 10$, (a) $v(0) = 3$, (b) $v(0) = 5.5$, (c) $v(0) = 7.2$, (d) $v(0) = 10.5$.

На рис. 3 можно заметить, как уровень глюкозы достигает максимума, после чего возвращается на отметку нижнего предела нормы уровня глюкозы ($v_0 = 5.5$ ммоль/л) вне зависимости от начальных условий. Данные графики подтверждают исследования, проведенные в [4, 7].

Рассмотрим результаты численного моделирования в случае, когда источник глюкозы $S(t)$ изменяется в соответствии с зависимостью:

$$S(t) = A \left(e^{-\frac{(t-8)^2}{2D^2}} + 2e^{-\frac{(t-14)^2}{2D^2}} + e^{-\frac{(t-20)^2}{2D^2}} \right),$$

где $D^2 = \frac{1}{2}$ — дисперсия, $A = 31$ — амплитуда,

представленные на рис. 4. Дисперсия (D^2) в данной формуле фактически характеризует скорость усвоения пищи [4]. Амплитуда рассчитывается исходя из среднесуточного потребления глюкозы по формуле [4]:

$$\frac{5 \cdot 4 \cdot \sqrt{\pi} V D A}{5.5} = 200, \quad (4.1)$$

где V — объем крови (5 литров), откуда

$$A = \frac{55}{\sqrt{\pi}} \approx 31.$$

Деление на 5.5 в (4.1) обусловлено тем, что нужно перевести выражение в граммы [6].

На рис. 4 можно заметить, как уровень глюкозы поднимается трижды, в соответствии с количеством слагаемых в математическом выражении внешнего источника глюкозы (потребление пищи: половина суточного приема пищи на обед и по четверти на завтрак и ужин [4]). Данные графики так же, как и на рис. 3, подтверждают исследования, проведенные в [4, 7].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе работы была рассмотрена математическая модель баланса инсулин–глюкоза, взятая из [4]. Была проведена проверка системы на тест Пенлеве в частных случаях: гипогликемия (уровень глюкозы опускается ниже минимальной отметки пределов нормы) и гипергликемия (уровень глюкозы поднимается выше максимальной отметки пределов нормы). В этих же частных случаях построены аналитические решения с пара-

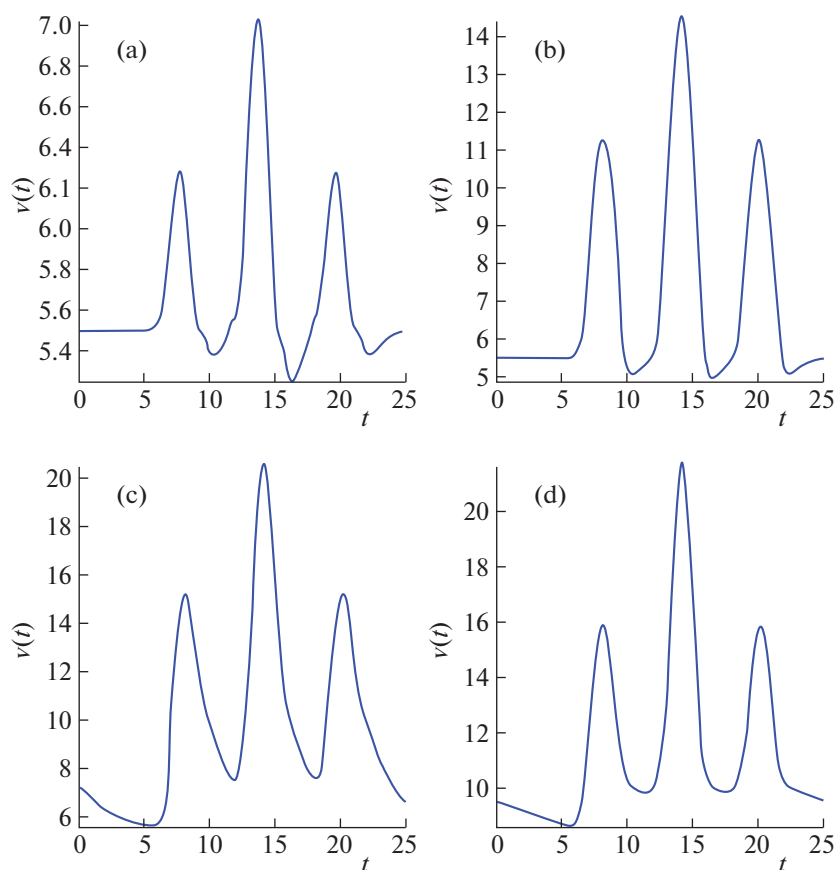


Рис. 4. Графики численного моделирования системы (1.1) при $\beta = 1.1$, $\sigma = 22\beta$, $\gamma = 7$, $\mu = 5$, $v_0 = 5.5$, $v_{cr} = 10$, (a) $\alpha = 2$, $v(0) = 5.5$, (b) $\alpha = 0.2$, $v(0) = 5.5$, (c) $\alpha = 0.02$, $v(0) = 7.2$, (d) $\alpha = 0.002$, $v(0) = 9.5$.

метрами, подобранными в соответствии с численным моделированием системы и сравнением результатов с [4]. Тем самым найдены асимптотики решения системы в обоих частных случаях.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда “Разработка методов исследования нелинейных математических моделей” № 18-11-00209.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дедов И.И. “Сахарный диабет — опаснейший вызов мировому сообществу”. Вестник РАМН. 2012. Вып. № 1. С. 7–12.
2. Карпельев В.А., Филиппов Ю.И., Тарасов Ю.В., Боярский М.Д., Майоров А.Ю., Шестакова М.В., Дедов И.И. Математическое моделирование системы регуляции гликемии у пациентов с сахарным диабетом. Вестник РАМН. 2015. Т. 70 (2.4). С. 549–560.
3. Athena Makroglou, Jiaxu Li, Yang Kuang. Mathematical models and software tools for the glucose-insulin regulatory system and diabetes: an overview, Applied Numerical Mathematics. 2006. V. 56. P. 559–573.
4. Широкова Н.А. “Математическое моделирование баланса инсулин-глюкоза в крови”. Математические структуры и моделирование. Омск, 2002. Вып. 10. С. 106–115.
5. Кудряшов Н.А. “Аналитические свойства модели Фитцхью–Нагумо и ее обобщений”. Вестник НИЯУ МИФИ. 2018. Т. 7. № 1. С. 52–69.
6. Вельтищев Ю.Е., Комаров Ф.И., Навашин С.М. и др. Справочник практического врача. 7-е изд. “Издательский дом ОНИКС”, “Альянс-В”. Москва, 2000.
7. Аметов А.С., Пуговкина Я.В., Черникова Н.А. “Гомеостаз глюкозы у здорового человека в различных условиях. Современный взгляд”. ЭНДОКРИНОЛОГИЯ: новости, мнения, обучение. 2016. Вып. № 1. С. 45–55.

Analytical and Numerical Properties of the Mathematical Model of the Insulin–Glucose Balance in Human Blood

K. V. Kan^{a, #} and N. A. Kudryashov^{a, ##}

^a National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[#]e-mail: kan_13@mail.ru

^{##}e-mail: nakudr@gmail.com

Received May 13, 2019; revised May 23, 2019; accepted May 28, 2019

Abstract—A mathematical model of the insulin–glucose balance has been proposed to describe the time dynamics of the insulin and glucose concentrations. The actuality of such models is that the analysis of these concentrations in human blood helps to study serious diseases treatment, e.g., diabetes. The numerical and analytical properties of the model, which is the system of two ordinary differential equations of the first order with the initial conditions, have been presented. The system has been examined for the Painlevé test in two special cases, suggesting that the glucose concentration is outside the allowable range: hypoglycemia and hyperglycemia. Particular analytical solutions have been found taking into account the conditions under which the system passes the Painlevé test. Asymptotic solutions have been obtained for the cases of hypoglycemia and hyperglycemia. In the case of hyperglycemia, the solution has been described by hypergeometric functions of Kummer and Tricomi. Graphs of analytical solutions have been constructed and analyzed. Numerical solutions of the system have been found by the fourth order Runge–Kutta method taking into account various external sources of glucose. Plots of numerical solutions have been obtained, showing fluctuations in the glucose concentration corresponding to the results of medical research in diabetes treatment.

Keywords: model of insulin–glucose balance, nonlinear differential equations, Painlevé test, exact solutions, numerical solutions, asymptotic solutions

DOI: 10.1134/S2304487X19040059

REFERENCES

1. Dedov I.I., Sakharnyy diabet — opasneyshiy vyzov mirovomu soobshchestvu; [Diabetes mellitus — a dangerous treat to the mankind]; *Annals of the Russian academy of medical sciences*, 2012, no. 1, pp. 7–12. (In Russian)
2. Karpel'ev V.A., Filippov Y.I., Tarasov Y.V., Boyarsky M.D., Mayorov A.Y., Shestakova M.V., Dedov I.I., Matematicheskoye modelirovaniye sistemy regulyatsii glikemii u patsiyentov s sakharnym diabetom; [Mathematical Modeling of the Blood Glucose Regulation System in Diabetes Mellitus Patients]; *Annals of the Russian academy of medical sciences*, 2015, 70 (2.4): 549–560. (In Russian).
3. Athena Makroglou, Jiaxu Li, Yang Kuang, Mathematical models and software tools for the glucose–insulin regulatory system and diabetes: an overview; *Applied Numerical Mathematics*, 2006, no. 56, pp. 559–573.
4. Shirokova N.A., Matematicheskoye modelirovaniye balansa insulin–glyukoza v krovi; [Mathematical modeling of balance insulin–glucose in the blood]; *Mathematical structures and modeling*, 2002, no. 10, pp. 106–115. (In Russian).
5. Kudryashov N.A., Analiticheskiye svoystva modeli FitzHugh–Nagumo i eye obobshcheniy; [Analytical Properties of the FitzHugh–Nagumo Model and Its Generalizations]; *Vestnik natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI"*, 2018, 7 (1.1): pp. 52–69. (In Russian.)
6. Veltishchev Yu.E., Komarov F.I., Navashin S.M. i dr.; *Spravochnik prakticheskogo vracha. 7th izd.*; [Reference practitioner]; Moscow, "Izdatelskiy dom ONIKS", "Alians-V", 2000.
7. Ametov A.S., Pugovkina Ya.V., Chernikova N.A., Gomeostaz glyukozy u zdorovogo cheloveka v razlichnykh usloviyakh. Sovremennyy vzglyad; [Glucose homeostasis in a healthy person under different conditions. The modern view]; *Endocrinology: news, opinions, training*, 2016, no. 1, pp. 45–55. (In Russian.)

КОМПЕНСАЦИЯ ИМПУЛЬСОВ ПОМЕХ В ТРОИЧНОМ КМОП МАЖОРИТАРНОМ ЭЛЕМЕНТЕ НА ЛОГИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТАХ И-НЕ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ОДИНОЧНЫХ ИОНИЗИРУЮЩИХ ЧАСТИЦ

© 2019 г. Ю. В. Катунин^{1,*}, В. Я. Стенин^{1,2,**}

¹ НИИ системных исследований РАН, Москва, 117218, Россия

² Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

*e-mail: katunin@cs.niisi.ras.ru

**e-mail: vystenin@mephi.ru

Поступила в редакцию 19.06.2019 г.

После доработки 19.06.2019 г.

Принята к публикации 25.06.2019 г.

Представлены результаты моделирования КМОП троичного мажоритарного элемента по 65-нм объемной технологии с мерами по повышению устойчивости к импульсам помех, возникающих при воздействии одиночных ионизирующих частиц. Воздействия на каждый транзистор элемента имитируются средствами TCAD в виде сбора транзисторами заряда с трека частицы. Моделируется сбор заряда с треков с направлением по нормали к поверхности кристалла. Линейная передача энергии на трек составляет 60 МэВ см²/мг. Исследуется КМОП троичный мажоритарный элемент, состоящий только из логических элементов И-НЕ. Применена топология с чередованием транзисторов каскадного соединения логических элементов И-НЕ, что обеспечивает повышение помехоустойчивости при сборе заряда с треков частиц. Этот элемент имеет меньше транзисторов, чем традиционный на логических элементах И и ИЛИ. Он может быть полезен при проектировании мажоритарной логики в 28–65 нм КМОП системах, устойчивых к воздействиям одиночных ядерных частиц.

Ключевые слова: импульс помехи, моделирование, нестационарное состояние, одиночная ядерная частица, помехоустойчивость, троичный мажоритарный элемент

DOI: 10.1134/S2304487X19040060

1. ВВЕДЕНИЕ

Результатом воздействия одиночных ядерных частиц на комбинационные логические элементы является образование импульсов помех [1], которые могут вызывать временные изменения логического состояния элемента. Повышение устойчивости к воздействиям одиночных ионизирующих частиц зависит от схем элементов и топологического их проектирования. Наиболее распространенным методом повышения помехоустойчивости комбинационной логики является тройное модульное резервирование (triple modular redundancy – TMR) [2]. При проектных нормах менее 100 нм в КМОП СБИС стало существенно проявляться диффузионное распределение заряда между транзисторами смежных логических элементов [3]. Этот эффект можно использовать при проектировании топологии логических элементов для коррекции импульса помехи с помощью частичного его гашения и в мажоритарной логике [4]. Это было успешно использовано в КМОП комбинационной логике суммирования

выходных сигналов ассоциативных ячеек памяти буфера трансляции адресов [5]. Как альтернативное решение задачи повышения помехоустойчивости, требующее детального исследования, является использование С-элементов для построения самокорректирующихся элементов многопоточной логики с тройным модульным резервированием [6]. Цель данной работы в получении количественных оценок помехоустойчивости троичного мажоритарного элемента путем виртуального экспериментального исследования средствами TCAD.

2. ЭЛЕМЕНТ С МАЖОРИТАРНОЙ ЛОГИКОЙ

При тройном модульном резервировании (TMR) элементы трех идентичных логических фаз используются для дублирующего вычисления одной логической функции. При возникновении помех от одиночных ионизирующих частиц выходные сигналы фаз могут отличаться. Троичные мажоритарные элементы (Triple Majority Gates –

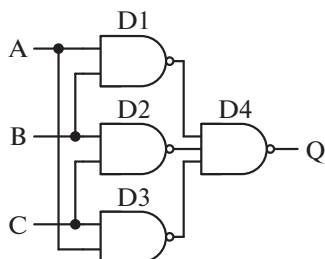


Рис. 1. Функциональная схема элемента с троичной мажоритарной логикой на основе только логических элементов И-НЕ.

TMG) используются для выбора правильного выходного сигнала по логике совпадения, по крайней мере, двух из трех входных сигналов TMG элемента. Однако и сами TMG элементы чувствительны к воздействиям одиночных ионизирующих частиц. Актуальна задача повышения сбоеустойчивости TMG элементов при одновременном повышении быстродействия и снижении аппаратных затрат в мажоритарном элементе. С этой точки зрения представляет интерес TMG элемент на основе только КМОП логических элементов И-НЕ, который содежит 18 транзисторов. На рис. 1 проведена функциональная схема TMG элемента из трех логических элементов 2И-НЕ и одного элемента 3И-НЕ.

На рис. 2 представлена схема троичного мажоритарного элемента на основе трех традиционных логических элементов 2И-НЕ и одного элемента 3И-НЕ, выполненных на КМОП транзисторах. Используя топологию с чередованием на кристалле транзисторов одного типа канала из каскадно включенных логических элементов, можно обеспечить ими совместный сбор заряда с трека одиночной ядерной частицы. Такое совместное расположение транзисторов должно обеспечить их зарядовую связь и коррекцию импульсов помех. Штриховые линии со стрелками на рис. 2 указывают на требуемые зарядовые связи транзисторов логических 2И-НЕ элементов D1, D2, D3 и 3И-НЕ элемента D4 для такой коррекции.

На рис. 3 приведен эскиз топологии троичного мажоритарного элемента с чередованием транзисторов трех логических элементов 2И-НЕ и одного элемента 3И-НЕ. Все транзисторы расположены в шести группах, при этом имеются три одинаковые по составу группы NМОП транзисторов (Gr1N–Gr3N) и три одинаковые группы PМОП транзисторов (Gr1P–Gr3P). В такой компоновке, на примере групп транзисторов Gr1N и Gr1P, следует, что в группе Gr1N транзистор N4.1 элемента D4 расположен между транзисторами N1.1 и N1.2 элемента D1, а в группе Gr1P транзистор P4.1 элемента D4 расположен между транзисто-

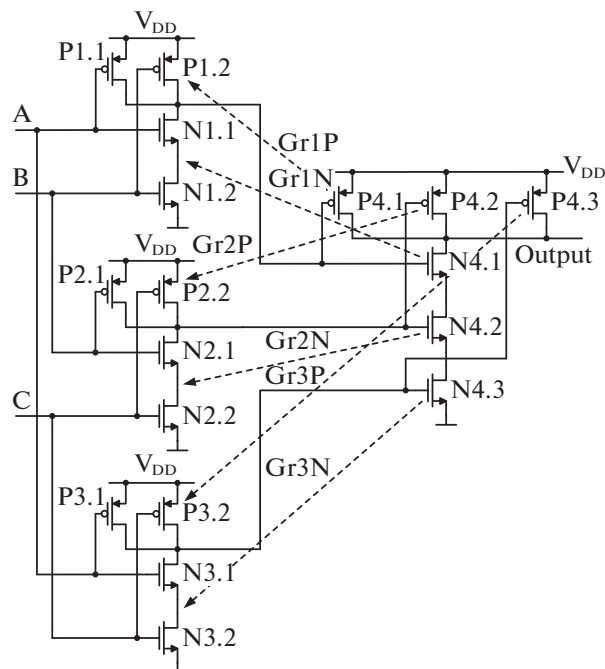


Рис. 2. Схема троичного мажоритарного элемента на основе трех логических элементов 2И-НЕ и одного элемента 3И-НЕ.

рами P1.1 и P1.2 элемента D1. Подобным образом образованы и группы Gr2N, Gr3N и Gr2P, Gr3P.

3. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 4 приведена 3D TCAD (Technology computer-aided design) приборная физическая модель троичного мажоритарного элемента (TMG) на основе логических И-НЕ элементов D1, D2, D3 и D4 (рис. 1). Это приборная модель содержит шесть групп транзисторов Gr1N–Gr3N и Gr1P–Gr3P. Все транзисторы окружены неглубокой 400 нм траншейной диоксидной изоляцией, которая на рис. 4 удалена, чтобы более четко представлять взаимное расположение транзисторов в группах. В каждую группу входят два транзистора элемента 2И-НЕ и один транзистор того же типа проводимости из элемента 3И-НЕ, затвор которого подключен к выходу элемента 2И-НЕ в соответствии со схемой на рис. 2.

Переходные процессы в нестационарных состояниях логических элементов при сборе заряда с трека одиночной частицы, исследуемые в TMG элементах при трехмерном моделировании средствами TCAD, зависят от линейной передачи энергии частицей на трек (linear energy transfer – LET) [1] и направления трека. В работе использованы треки с направлениями вдоль нормали к поверхности приборной части модели (на рис. 4 примеры треков T1 и T2). Используются треки с линейной передачей энергии на них 60 МэВ см²/мг,

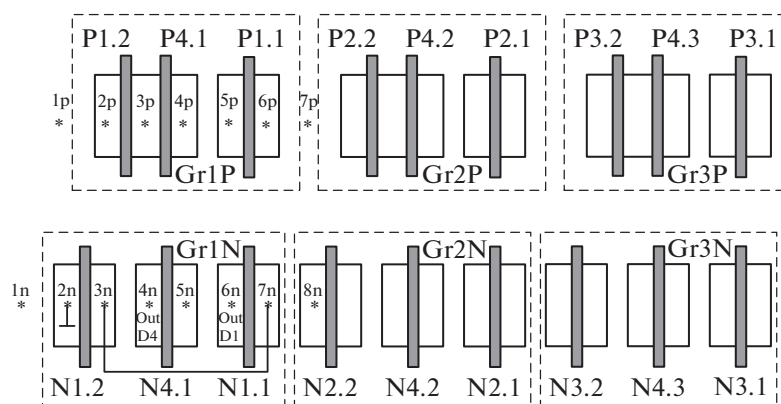


Рис. 3. Эскиз топологии троичного мажоритарного элемента с чередованием транзисторов трех логических элементов 2И-НЕ и одного элемента 3И-НЕ.

что соответствует максимуму диапазона LET, наиболее часто используемого для экспериментального исследования сбоеустойчивости элементов СБИС при воздействии тяжелых заряженных частиц [7, 8].

Трехмерная приборная физическая модель разработана на основе моделей транзисторов, представленных в работе [9]. Ширина N- и PМОП-транзисторов составляет 400 нм. Результаты получены с помощью имитатора Sentaurus при температуре 25°C и напряжении питания 1.0 В для структуры по 65 нм КМОП объемной технологии.

Поскольку по составу транзисторов и топологии группы Gr1N-Gr3N одинаковы, как одинаковы и группы Gr1P-Gr3P, то приведены результаты моделирования помех и их коррекции при сборе заряда с трека только для пары групп Gr1N, Gr1P, образованных из транзисторов логических элементов D1 и D4 (рис. 1).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Линейная передача энергии от частицы к треку составляет 60 МэВ см²/мг. Направления треков вдоль нормали к поверхности приборной модели (на рис. 4 примеры треков T1 и T2). Шаг смещения точек входов треков составляет 0.25 мкм и они проходят через стоковые и истоковые области транзисторов (рис. 3). Амплитуды импульсов помех определялись по максимуму отклонения напряжения узла TMG элемента от стационарного логического уровня, а длительность помехи — как длительность отклонения на уровне 0.7 В от стационарного логического уровня.

А. Образование помех в группе Gr1N при входах TMG элемента $A = B = C = 0$

Значения параметров импульсов помех как отклонений напряжений на узлах TMG элемента

(выходы D1 и D4) от логического уровня узла и длительности импульсов помех на выходе TMG элемента $t_{\text{пом.вых.D4}}$ приведены для группы NМОП транзисторов Gr1N на рис. 5а при сигналах на трех входах TMG элемента $A = B = C = 0$ в зависимости от положения точки входа трека (рис. 3) при линейной передаче энергии частицей на трек LET = 60 МэВ см²/мг. Тонкими штриховыми линиями на рис. 5а отмечено напряжение, соответствующие уровню логического нуля "0".

Отклонения выходного сигнала (амплитуды импульсы помех) при сигналах на входах TMG элемента $A = B = C = 0$ незначительны и не превышают 0.2 В при точках входа трека 1n–5n и 8n. Максимальные отклонения выходного сигнала с амплитудой 1 В отмечены (см. рис. 5а) при про-

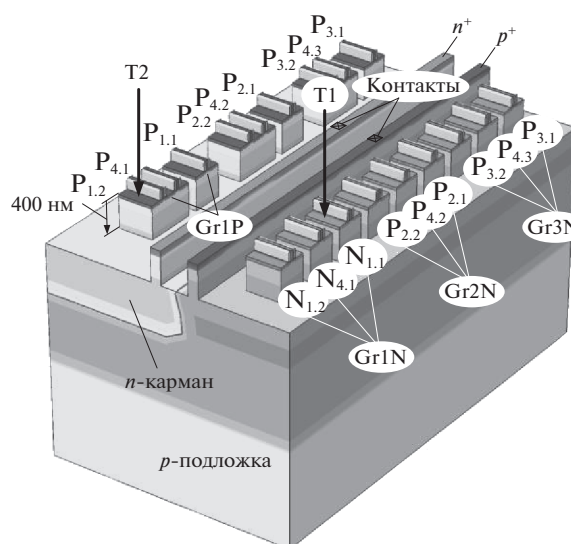


Рис. 4. 3D TCAD приборная физическая модель элемента троичной мажоритарной логики на основе только логических элементов И-НЕ.

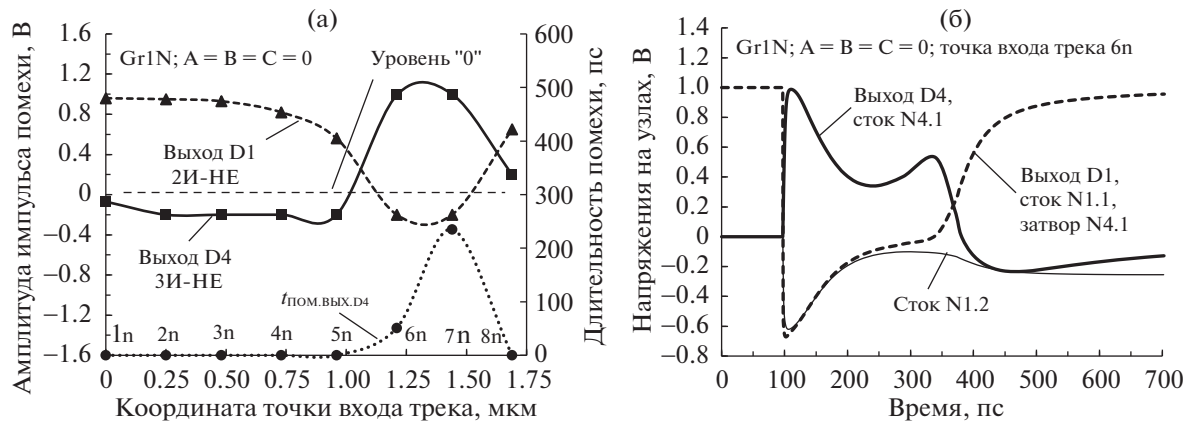


Рис. 5. Зависимости образования импульсов помех в группе NМОП транзисторов Gr1N при сигналах на входах TMG элемента $A = B = C = 0$ для треков с $LET = 60 \text{ МэВ см}^2/\text{мг}$: (а) амплитуды и длительности импульсов помех в зависимости от положения точки входа трека; (б) зависимости напряжений на узлах для точки входа трека 6п.

хождении трека через точку 6п (рис. 3, область стока транзистора N1.1) и через точку 7п (область истока N1.1). Это результаты сбора с треков 6п и 7п заряда транзисторами N1.1 и N4.1 при их каскадном соединении (сток N1.1 соединен с затвором N4.1, рис. 2). При амплитудах импульсов помех 1 В длительность помехи для точки входа трека 6п составляет всего 50 пс, а для точки входа 7п составляет 235 пс.

На рис. 5б приведены зависимости напряжений на выходных узлах элементов D1, D4 для случая совместного сбора заряда с трека NМОП транзисторами N1.1 и N4.1 элементов D1 и D4 (точка входа трека 6п на рис. 3), когда входные сигналы TMG $A = B = C = 0$. Изначально запертый по затвору транзистор N1.1 начинает собирать заряд при возникновении трека с точкой входа 6п и переходит вместе с транзистором N1.2 в инверсное состояние с напряжением -0.6 В на стоке N1.1, запирая по затвору транзистор N4.1 (рис. 5б). Сбор заряда запертым транзистором N4.1 снижает напряжение на его стоке и выходе D4 (3И-НЕ). После 50 пс сбора заряда напряжение на стоке транзистора N4.1 становится меньше 0.7 В , что сохраняет выходной логический сигнал элемента TMG на уровне, близком к "0", и исключает ложное воздействие на последующие логические элементы. Это случай коррекции (минимизации) амплитуды, а также длительности импульса помехи до уровня 50 пс по уровню 0.7 В от пьедестала импульса.

Б. Образование помех в группе Gr1N при входах TMG элемента $A = B = 1, C = 0$

Значения параметров импульсов помех как отклонений напряжений на узлах TMG элемента (выходы D1 и D4) от логического уровня узла и длительности импульсов помех на выходе TMG

элемента $t_{\text{пом.вых.D4}}$ приведены для группы NМОП транзисторов Gr1N на рис. 6а при сигналах на трех входах TMG элемента $A = B = 1, C = 0$. При этих сигналах на входах TMG элемента значительные отклонения выходного сигнала (импульсы помех) наблюдаются при сборе заряда запертым NМОП транзистором N4.1 в группе транзисторов Gr1N (рис. 6а) (точки входа трека 3п–5п). При этих точках входа трека транзисторы N1.1, N1.2 элемента D1 (2И-НЕ) переходят в начале сбора заряда с трека в инверсный режим смещения с отрицательным напряжением на стоках, что запирает транзистор N4.1 элемента D4, который, собирая с этим режиме заряд, тоже переходит в инверсное смещение с напряжением на его стоке -0.7 В . Это фиксирует состояние логического нуля "0" на выходе TMG элемента при точках входа трека 3п–5п. Отклонения от логического импульсного уровня на выходе элемента TMG при этом имеют значения $0.9\text{--}1.1 \text{ В}$ при длительностях импульсов помех $100\text{--}330 \text{ пс}$.

На рис. 6б приведен пример зависимостей напряжений на узлах TMG элемента при сборе заряда с трека с точкой входа 4п (рис. 3), когда входные сигналы $A = B = 1, C = 0$. Изначально открытые транзисторы N1.1 и N1.2 в начале сбора заряда переходят в инверсный режим смещения при напряжении на стоках $-(0.16\text{--}0.1) \text{ В}$, что поддерживает запертый по затвору транзистор N4.1 в этом состоянии. Транзистор N4.1 собирает заряд и формирует на выходе TMG элемента импульс ошибки с амплитудой 1 В и длительностью 330 пс , равной времени сбора заряда. Для входных точек трека 3п и 5п результаты формирования импульса ошибки аналогичны (рис. 6б). В этом случае нет коррекции импульса помехи.

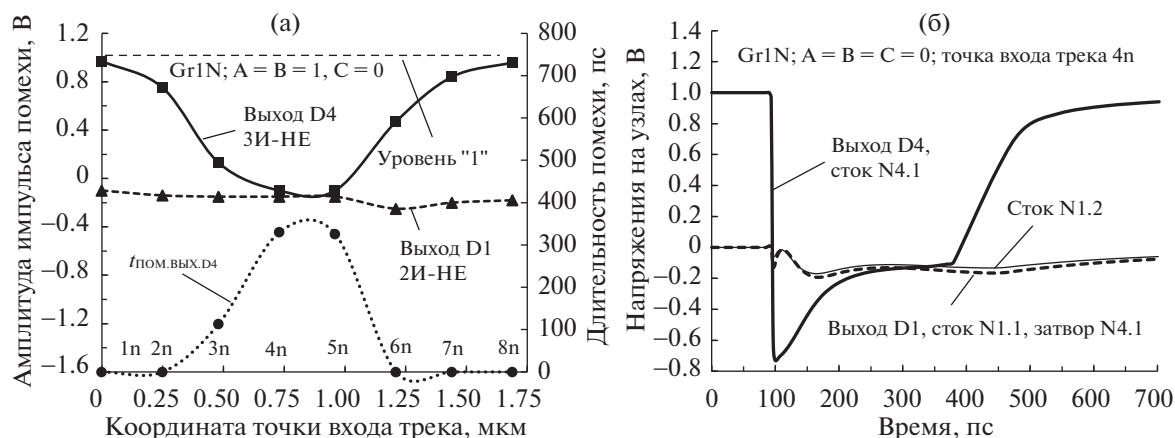


Рис. 6. Зависимости образования импульсов помех в группе НМОП транзисторов Gr1N при сигналах на входах ТМГ элемента $A = B = 1$, $C = 0$ для треков с $LET = 60$ МэВ см²/мг: (а) амплитуды и длительности импульсов помех ТМГ элемента в зависимости от положения точки входа трека; (б) зависимости напряжений на узлах для точки входа трека 4n.

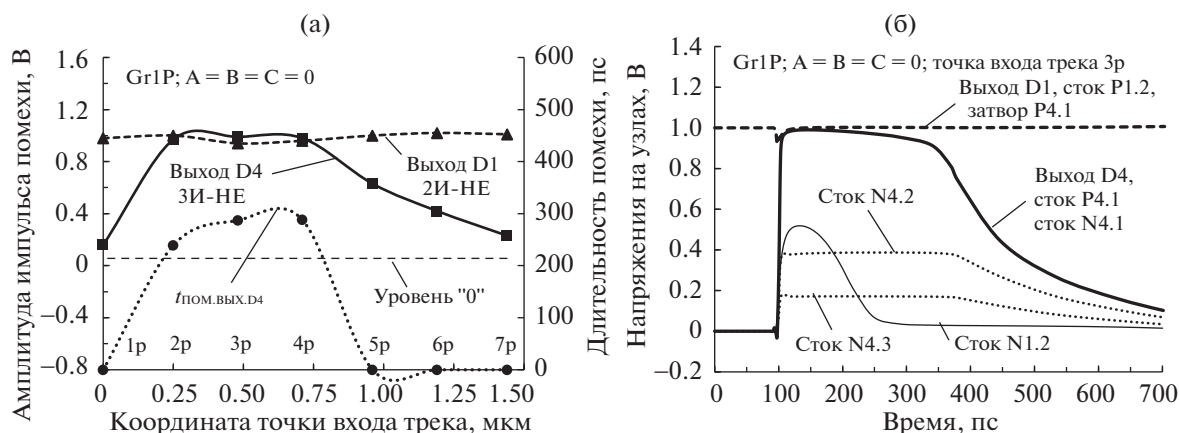


Рис. 7. Зависимости образования импульсов помех в группе РМОП транзисторов Gr1P при сигналах на входах ТМГ элемента $A = B = C = 0$ для треков с $LET = 60$ МэВ см²/мг: (а) амплитуды и длительности импульсов помех в зависимости от положения точки входа трека; (б) зависимости напряжений на узлах для точки входа трека 3p.

В. Образование помех в группе Gr1P при входах ТМГ элемента $A = B = C = 0$

Значения амплитуд импульсов помех на узлах ТМГ элемента (выходы D1 и D4) и длительности импульсов помех на выходе ТМГ элемента приведены для группы РМОП транзисторов Gr1P на рис. 7а при сигналах на входах ТМГ элемента $A = B = C = 0$ и линейной передаче энергии на трек $LET = 60$ МэВ см²/мг. При входах $A = B = C = 0$ значительные амплитуды импульсов помех наблюдаются в группе транзисторов Gr1P (рис. 7а) при сборе заряда с треков с точками входа 2p–4p.

На рис. 7б приведен пример зависимостей напряжений на узлах ТМГ элемента при сборе заряда с трека с точкой входа 3p в область общих истоков РМОП транзисторов P1.2 и P4.1 (рис. 3) из D1 и D4 элементов, когда входные сигналы ТМГ

$A = B = C = 0$. Входные сигналы поддерживают транзисторы P1.2 и P1.1 открытыми во время сбора заряда, что сохраняет изначально запертый транзистор P4.1 в этом состоянии, и он собирает заряд с трека с точкой входа 3p, формируя на выходе элемента ТМГ импульс ошибки с амплитудой 1 В и длительностью 290 пс. Амплитуды помех на выходе ТМГ элемента для точек входа трека 2p–4p имеют значения 1.0 В при длительностях помех 240–290 пс, определяемых временем сбора заряда. В этом случае нет коррекции импульса помехи на выходе ТМГ элемента.

Г. Образование помех в группе Gr1N при входах ТМГ элемента $A = B = 1$, $C = 0$

При сигналах на входах ТМГ элемента $A = B = 1$, $C = 0$ (рис. 8а) в группе Gr1N амплитуды им-

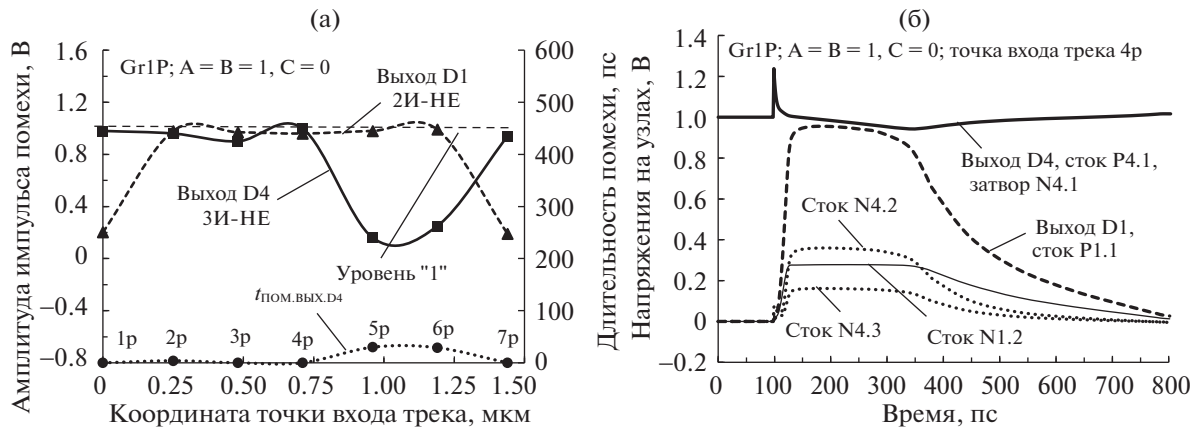


Рис. 8. Зависимости образования импульсов помех в группе РМОП транзисторов Gr1P при сигналах на входах ТМГ элемента $A = B = 1$, $C = 0$ для треков с $LET = 60 \text{ МэВ см}^2/\text{мг}$: (а) амплитуды и длительности импульсов помех в зависимости от положения точки входа трека; (б) зависимости напряжений на узлах для точки входа трека 4р.

пульсов помех при сборе заряда с треков с точками входа 1р–4р и 7р незначительны и не превышают 0.1 В. Для треков с точками входа 5р и 6р импульсы помех имеют амплитуды 0.75–0.84 В, но с незначительной длительностью 30 пс.

На рис. 8б приведен пример зависимостей напряжений на узлах ТМГ элемента при сборе заряда с трека с точкой входа 4р в область стока РМОП транзистора P4.1 (рис. 3) элемента D4, когда входные сигналы поддерживают транзисторы P1.2 и P1.1 закрытыми во время сбора заряда, а изначально открытый транзистор P4.1 в открытом состоянии. Транзистор P4.1 в начале сбора заряда переходит в режим инверсного смещения и остается в состоянии с напряжением на его стоке около 1 В до конца сбора заряда с трека, что фиксирует напряжение на выходе ТМГ элемента на логическом уровне “1” (рис. 8б). Закрытые по затворам входными сигналами РМОП транзисторы P1.2 и P1.1 собирают заряд, формируя импульс на выходе элемента D1 и затворе транзистора P4.1. Однако, этот импульс не закрывает транзистор P4.1 и ТМГ элемент сохраняет на выходе логический уровень “1”. Для точек входов трека 2р и 3р такие же результаты сбора заряда и выходной сигнал ТМГ элемента без импульса помехи. Это случай минимизации амплитуды и длительности импульса помехи.

5. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Топология ТМГ элемента только на логических элементах И-НЕ с разделением транзисторов на группы, в которых объединены транзисторы из каскадно соединенных элементов И-НЕ, позволяет повысить помехоустойчивость путем

коррекции импульсов помех при сборе заряда с треков одиночных ионизирующих частиц.

В том случае, когда транзистор N4.1 при входах $A = B = C = 0$ (рис. 5а) или транзистор P4.1 при $A = B = 1$, $C = 0$ (рис. 8а) элемента D4 открыты, собирая заряд с трека и переходя в закрытое состояние, могут минимизировать импульс помехи на выходе ТМГ элемента.

В том случае, когда транзистор N4.1 при $A = B = 1$, $C = 0$ (рис. 6а) или транзистор P4.1 при $A = B = C = 0$ (рис. 7а) элемента D4 закрыты, а другие транзисторы в их группе открыты, оставаясь в исходном логическом состоянии, то закрытые транзисторы N4.1 или P4.1, собирая заряд, формируют импульс ошибки на выходе ТМГ элемента.

При изменении сигналов на входах ТМГ элемента часть или все транзисторы логических элементов 2И-НЕ и 3И-НЕ меняют электрический режим смещения, переходя из закрытого состояния в открытое и наоборот. Это приводит к изменению характера сбора заряда с трека для тех же точек его входа в группах Gr1N–Gr3N и Gr1P–Gr3P и соответственно меняет характер образования помехи на выходе ТМГ элемента.

Изменения при сборе заряда можно оценить по результатам моделирования, приведенным в табл. 1 для группы НМОП транзисторов Gr1N и в табл. 2 для группы РМОП транзисторов Gr1P. В табл. 1 и 2 приведены амплитуды и длительности импульсов помехи на выходе ТМГ элемента. Длительности определялись по уровню 0.7 В относительно пьедестала импульса, поэтому при амплитуде ниже 0.7 В длительности равны нулю и не приведены для этих случаев в табл. 1 и 2.

Для группы Gr1N из данных в табл. 1 следует, что изменение входных сигналов $A = B = C = 0$ на $A = B = 1$, $C = 0$ переводит группу Gr1N из состо-

Таблица 1. Амплитуды и длительности импульсов помехи на выходе TMG элемента, образующиеся в группе НМОП транзисторов Gr1N

Положение точки входа трека в группе Gr1N	1n	2n	3n	4n	5n	6n	7n
На входах TMG $A = B = C = 0$	0.1 В	0.2 В	0.2 В	0.2 В	0.2 В	1.0 В/50 пс	1.0 В/235 пс
На входах TMG $A = B = 1, C = 0$	0	0.3 В	0.9 В/100 пс	1.1 В/330 пс	1.1 В/330 пс	0.5 В	0.15 В

Таблица 2. Амплитуды и длительности импульсов помехи на выходе TMG элемента, образующиеся в группе РМОП транзисторов Gr1P

Положение точки входа трека в группе Gr1P	1p	2p	3p	4p	5p	6p	7p
На входах TMG $A = B = C = 0$	0.2 В	1.0 В/240 пс	1.0 В/290 пс	1.0 В/290 пс	0.63 В	0.42 В	0.2 В
На входах TMG $A = B = 1, C = 0$	0	0	0.1 В	0	0.84 В/30 пс	0.75 В/30 пс	0

нения, когда помехи при сборе заряда с треков практически не образуются, в состоянии, когда при точках входа треков 3n, 4n и 5n образуются помехи с амплитудами 0.87–1.1 В и длительностями 100–330 пс.

При таком же изменении входных сигналов $A = B = C = 0$ на $A = B = 1, C = 0$ группа Gr1P (табл. 2) из состояния, когда при точках входа треков 2p, 3p и 4p образуются помехи с амплитудами 1.0 В и длительностями 240–290 пс, переходит в состояние, когда помех при сборе заряда с треков практически нет.

Эти изменения обусловлены взаимодействием транзисторов логических элементов D1 и D4, объединенных в группы Gr1N и Gr1P, которые собирают одновременно заряд с трека. Это транзисторы N1.2, N4.1, N1.1 в группе Gr1N и транзисторы P1.2, P4.1, P1.1 в группе Gr1P. Переход групп из состояния с образованием помех в состояние без помех связан с эффектом коррекции импульса помехи. Коррекция импульса помехи отсутствует в TMG элементе с традиционной топологией без чередования транзисторов логических элементов D1, D1, D1 и элемента D4, что приводит к существенным импульсам помех, возникают во всех вариантах сигналов на входах этого TMG элемента.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

КМОП троичный мажоритарный элемент только на логических элементах И-НЕ при использовании топологии с чередованием транзисторов каскадного соединения логических элементов И-НЕ имеет улучшенную помехоустойчивость при сборе заряда с треков одиночных ионизирующих частиц по сравнению с обычным вариантом без чередования транзисторов элементов И-НЕ. Этот элемент имеет меньше транзисторов, чем традиционный элемент TMG на эле-

ментах И и ИЛИ и может быть эффективно использован в троичной мажоритарной логике с резервированием в 28–65 нм КМОП вычислительных системах, устойчивых к воздействиям одиночных ядерных частиц.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-07-00651.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Soft errors in modern electronic systems // M. Nicolaidis, Ed. New York: Springer, 2011. P. 27–54.
2. Hindman N.D., Clark L.T., Patterson D.W., Holbert K.E. Fully automated testable design of fine-grained triple mode redundant logic // IEEE Transactions on Nuclear Science. 2011. V. 58. № 6. P. 3046–3052.
3. Mahatme N.N., Jagannathan S., Loveless T.D., Massengill L.W., Bhuva B.L., Wen S.-J., Wong R. Comparison of combinational and sequential error rates for a deep submicron process // IEEE Transactions on Nuclear Science. 2011. V. 58. № 6. P. 2719–2725.
4. Atkinson N.M., Witulski A.F., Holman W.T., Ahlbin J.R., Bhuva B.L., Massengill L.W. Layout technique for single-event transient mitigation via pulse quenching // IEEE Transactions on Nuclear Science. 2011. V. 58. № 3. P. 885–890.
5. Katunin Yu.V., Stenin V.Ya. TCAD simulation of the 65-nm CMOS logical elements of the decoders with single-event transients compensation // in Proc. of 2018 Workshop on Electronic and Networking Technologies (MWENT). Moscow, 2018. P. 1–6.
6. Ramamurthy C., Gujja A., Vashishtha V., Chellappa S., Clark L.T. Muller C-element self-corrected triple modular redundant logic with multithreading and low power modes // in the RADECS-3017 Conference Papers, in IEEE Xplore (Conference Section, RADECS-2017), e-book. 2019. P. 184–187.
7. Warren K.M., Stenberg A.L., Black J.D., Weller R.A., Reed R.A., Mendenhall M.H., Schrimpf R.D., Mas-

- sengill L.W.* Heavy ion testing and single-event upset rate prediction considerations for a DICE flip-flop // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 2009. V. 56. № 6. P. 3130–3137.
8. *Gorbunov M.S., Dolotov P.S., Antonov A.A., Zebrev G.I., Emeliyanov V.V., Boruzdina A.B., Petrov A.G., Ulanova A.V.* Design of 65 nm CMOS SRAM for space applications: a comparative study // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 2014. V. 61. № 4. P. 1575–1582.
9. *Garg R., Khatri S.P.* Analysis and design of resilient VLSI circuits: mitigating soft errors and process variations. New York: Springer, 2010. P. 194–205.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 4, pp. 343–351

The Noise Pulse Compensation in the Ternary CMOS Majority Element on NAND Logical Elements under Impacts of Single Ionizing Particles

Yu. V. Katunin^{a,*} and V. Ya. Stenin^{a,b,**}

^a Scientific Research Institute of System Analysis, Russian Academy of Sciences, Moscow, 117218 Russia

^b National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

*e-mail: katunin@cs.niisi.ras.ru

**e-mail: vystenin@mephi.ru

Received June 19, 2019; revised June 19, 2019; accepted June 25, 2019

Abstract—A CMOS ternary majority element of 65 nm bulk technology has been simulated with measures to improve the resistance to noise pulses arising under the influence of single ionizing particles. The impact on the transistors of the element has been modeled with TCAD tools in the form of the collection of the charge from the track of the particle. Charge collection from tracks with normal direction to the crystal surface is simulated. The linear energy transfer to the track is 60 MeV cm²/mg. The CMOS ternary majority element based only on NAND logical elements has been studied. Its topology is based on the interleaving transistors of the cascade connection of NAND logical elements, which provides increased noise immunity to the impacts of single particles. This ternary majority element has fewer transistors than the standard elements based on AND and OR logical gates. It can be useful to design the majority logic of the elements of 28–65 nm CMOS bulk systems that are resistant to the effects of single nuclear particles.

Keywords: error pulse, simulation, unsteady state, single nuclear particle, noise immunity, ternary majority element

DOI: 10.1134/S2304487X19040060

REFERENCES

1. *Soft errors in Modern Electronic Systems* // M. Nicolaidis, Ed. New York: Springer, 2011, pp. 27–54.
2. Hindman N.D., Clark L.T., Patterson D. W., Holbert K.E. Fully automated testable design of fine-grained triple mode redundant logic // *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2011, vol. 58, no. 6, pp. 3046–3052.
3. Mahatme N.N., Jagannathan S., Loveless T.D., Mas-sengill L.W., Bhuva B.L., Wen S.-J., Wong R. Comparison of combinational and sequential error rates for a deep submicron process // *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2011, vol. 58, no. 6, pp. 2719–2725.
4. Atkinson N.M., Witulski A.F., Holman W.T., Ahlbin J.R., Bhuva B.L., Massengill L.W. Layout technique for single-event transient mitigation via pulse quenching // *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2011, vol. 58, no. 3, pp. 885–890.
5. Katunin Yu.V., Stenin V.Ya. TCAD Simulation of the 65-nm CMOS logical elements of the decoders with single-event transients compensation // in *Proc. of 2018 Workshop on Electronic and Networking Technologies (MWENT)*, Moscow, 2018, pp. 1–6.
6. Ramamurthy C., Gujja A., Vashishtha V., Chellappa S., Clark L.T. Muller C-element self-corrected triple modular redundant logic with multithreading and low power modes // in the *RADECS-2017 Conference Papers, in IEEE Xplore (Conference Section, RADECS-2017)*, e-book, 2019, pp. 184–187.
7. Warren K.M., Stenberg A.L., Black J.D., Weller R.A., Reed R.A., Mendenhall M.H., Schrimpf R.D., Massengill L.W. Heavy ion testing and single-event upset rate prediction considerations for a DICE flip-flop // *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2009, vol. 56, no. 6, pp. 3130–3137.
8. Gorbunov M.S., Dolotov P.S., Antonov A.A., Zebrev G.I., Emeliyanov V.V., Boruzdina A.B., Petrov A.G., Ulanova A.V. Design of 65 nm CMOS SRAM for space applications: a comparative study // *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2014, vol. 61, no. 4, pp. 1575–1582.
9. Garg R., Khatri S.P. *Analysis and design of resilient VLSI circuits: mitigating soft errors and process variations*. New York: Springer, 2010. pp. 194–205.

О ВАЖНОСТИ ОПТИМИЗАЦИИ ТОЧНОСТИ И ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ АЛГОРИТМОВ ОТСЛЕЖИВАНИЯ ОБЪЕКТОВ В ВИДЕОПОТОКЕ ПО ПАРАМЕТРАМ

© 2019 г. А. Д. Егоров*

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, 115409, Россия

**e-mail: ADEgorov@mephi.ru*

Поступила в редакцию 15.01.2019 г.

После доработки 28.02.2019 г.

Принята к публикации 12.03.2019 г.

В статье рассматривается вопрос повышения эффективности работы алгоритмов отслеживания объектов на изображении за счет оптимизации по параметрам для данных алгоритмов. В отличие от большей части подобных исследований в целевой функции оптимизации учитывается не только точность работы алгоритмов отслеживания, но и их производительность. С целью составления алгоритма расчет целевой функции в работе приводится анализ существующего пространства ситуаций в работе рассматриваемых алгоритмов, показано, что в реальной работе существует 5 типов ситуаций: корректное отслеживание, ложное отслеживание, преждевременная потеря объекта, объект не найден вовремя, объект потерян и найден повторно. Правильный подбор параметров исходного алгоритма, на примере алгоритма отслеживания объектов по шаблону, и его модификаций позволяет добиться роста точности в 4.7 раза при росте производительности в 2.2 раза. При этом, показано, что отсутствие подбора параметров может на практике приводить к отказу от использования эффективных модификаций. В частности, модификация адаптации шаблона поиска в 90% случаев ухудшает работу алгоритма отслеживания по шаблону, а в 10% значительно улучшает его работу. Кроме того, в статье приводятся конкретные параметры алгоритма отслеживания по шаблону и его модификаций, которые целесообразно использовать в работе систем компьютерного зрения.

Ключевые слова: оптимизация параметров, отслеживание по шаблону в видеопотоке, компьютерное зрение, отслеживание объектов в видеопотоке, видеопоток

DOI: 10.1134/S2304487X19030052

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное зрение на текущий момент широко применяется в различных межмашинных и человеко-машинных системах [1]. Особо актуальными являются следующие задачи: автоматизация систем управления, например, для робототехнических систем или беспилотных систем [2]; обеспечения безопасности, например, дорожного движения [3] или периметра охраняемого объекта; обеспечение безопасности критических объектов [4, 5]; ускорение производства; поддержка принятия решения, например, при проведении хирургических операций [6] и т.д.

К задачам создания систем управления беспилотными автомобилями и иными подобными роботизированными системами предъявляются не только требования по точности, но и повышенные требования по автономности работы подобных систем [2]. То есть для таких систем необходимо кроме реализации самих алгоритмов проводить их максимальную оптимизацию.

Задача оптимизации не нова, ее решение для различных частных случаев приводится в ряде работ различных авторов [7–9]. Тем не менее, постановка задачи в данных работах не рассматривает вопросы параметрической оптимизации алгоритмов отслеживания объектов в видеопотоке, касаясь вскользь только параметрической оптимизации для задач поиска объектов на изображении. Потенциал подобной оптимизации достаточно высок, что показано на схожих работах, связанных с оптимизацией самих алгоритмов поиска объекта [10–12], ведь поиск объекта на изображении является предваряющей стадией отслеживания объектов.

В данной статье рассматривается влияние параметрической оптимизации на работу алгоритмов отслеживания, показывается, что параметрическая оптимизация является необходимым элементом реализации любого алгоритма отслеживания объектов в видеопотоке. Составными элементами данной работы является конструирование собственной метрики для сравне-

ния алгоритмов отслеживания объектов, а также проверка на практике результатов теоретической разработки.

ТЕОРИЯ

Существующие алгоритмы отслеживания объектов в видеопотоке можно разделить на несколько категорий по принципу, который лежит в основании их реализации [13]:

1. Сравнение с помощью математических методов представления предполагаемого объекта с его эталонным представлением, сохраненным в памяти [14, 15].
2. Сравнение представления предполагаемого объекта с регулярно модифицируемым хранимым в памяти представлением объекта [16, 17].
3. Сравнение с “разреженным” представлением объекта, хранимым в базе [18, 19].
4. Использование дискриминантной классификации [20, 21].

Для сравнения различных алгоритмов отслеживания объектов между собой было введено достаточно большое количество методов оценки и специфичных метрик оценки, которые учитывают и позволяют оценить наиболее частые варианты ошибок [13]:

- Отклонение: точность отслеживания ниже заявленной граничной точности.
- Ложноположительное срабатывание: отслеживается не тот объект.
- Ложноотрицательное срабатывание: нужный объект не отслеживается.

В существующих работах предложен ряд методов оценки, которые также можно разбить на два класса: с границей отсечения по точности и без такой границы [22]. Достаточно полный обзор существующих метрик можно найти в статье [13], тогда как в рамках данной работы необходимо отметить следующие недостатки существующих метрик:

- Все представленные на текущий момент метрики не учитывают производительность алгоритмов отслеживания. Сравнение скорости работы алгоритма проводится отдельно от оценки его точности, и зачастую эмпирически. Например, [23] рассматривает только количество кадров, на которых алгоритм отследил объекта, а в [24] дополнительно высчитывается дистанция между искомым и найденными объектами как мера точности.

- В работах не приводится сопоставление результатов работы с установленными параметрами алгоритмов. Таким образом, не происходит подбор параметров под наиболее оптимальные значения метрик, что не позволяет сделать вывод о применимости того или иного алгоритма или его модификации.

- В работах не учитывается, что определенный процент ошибочной работы алгоритмов отслеживания связан с результатами работы алгоритмов поиска. То есть ошибка отслеживания при использовании представленных метрик включает в себя ошибку поиска. Соответственно, представленная в [13] типизация ошибок не полна и требуется ее структурирование и переработка.

Таким образом, в рамках работы ставится задача разработки алгоритма и метрики для этого алгоритма, которая бы позволяла максимизировать как точность, так и производительность используемых алгоритмов отслеживания за счет настройки параметров конкретных алгоритмов отслеживания.

Для практической отработки предложенных далее в работе методов сравнения предлагается использовать простой в реализации алгоритм отслеживания в видеопотоке объектов по шаблону. Этот алгоритм является по сути адаптацией алгоритма поиска по шаблону на изображениях для отслеживания объектов в видеопотоке. Постановка задачи поиска объекта на изображении по шаблону [24] выглядит следующим образом.

Пусть дано изображение F , представляющее собой матрицу размером $w \times h$, где w – количество элементов в матрице (элемент матрицы соответствует пикселю на изображении) по горизонтали, h – количество элементов в матрице по вертикали (ширина и высота соответственно). Также предположим, что существует изображение T , которое является шаблоном искомого объекта, размер которого $l \times e$, $l \times w$, $e \times h$. Функцией F_{xy} обозначим пиксель, который является крайним левым пикселем подизображения F^T – изображения размера $l \times e$ на изображении F . При этом $0 \leq x \leq w - l$, $0 \leq y \leq h - e$. С помощью $R(I_1, I_2)$ обозначим функцию от двух изображений одинакового размера, которая позволяет рассчитать количественное значение разницы между этими изображениями. Возможные метрики для расчета количественного значения разности представлены в источниках [25–29]. Кроме того, в работах [26, 30] показано, что наиболее эффективная метрика – метрика нормированной корреляции:

$$R(I_1, I_2) = \frac{\sum_{x,y} [(I_1(x,y) - M(I_1(x,y)))(I_2(x,y) - M(I_2(x,y)))]}{\sqrt{\sum_{x,y} (I_1(x,y) - M(I_1(x,y)))^2 \sum_{x,y} (I_2(x,y) - M(I_2(x,y)))^2}} \quad (1)$$

При этом значения метрики (1) лежат в интервале $[0, 1]$, где 0 соответствует полностью различным изображениям, а 1 полностью идентичным.

Результатом работы алгоритма отслеживания по шаблону будет являться крайний левый пиксель подизображения F^T на изображении F , для которого при использовании данной метрики результат сравнения максимален:

$$F_{xy} = \arg \max_{x,y} R(T, F^T). \quad (2)$$

Для работы с использованием нормированных метрик вводят границу истинности a . Граница истинности представляет собой характеристику, которая указывает, насколько найденное представление объекта и искомое представление объекта должны соответствовать с точки зрения метрики. Таким образом, к представленной выше функции добавляется ограничение:

$$R(T, F^T) > a \quad (3)$$

В случае, если ограничение (3) выполняется для конкретного T и F^T , объект считается отслеживаемым успешно, в противном случае объект считается потерянным.

В рамках данной работы на практике рассматриваются параметры алгоритма отслеживания по шаблону и его модификаций. Используемые модификации представлены в [31]. Все ключевые параметры основного алгоритма и модификаций представлены в табл. 1. Ставится задача подбора таких a, b, c, k (параметры алгоритма и модификаций), чтобы эффективность алгоритма отслеживания, учитывающая как точность, так и производительность, была максимальна.

МЕТОД ОЦЕНКИ ТОЧНОСТИ И ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ АЛГОРИТМОВ ОТСЛЕЖИВАНИЯ ОБЪЕКТОВ

Как было сказано ранее, в рамках рассмотренной литературы не приводится обоснование того, что приведенный набор ошибочных событий является полным. Проанализируем пространство ситуаций.

Для этого составим таблицу 2 по принципу сопоставления наличия и отсутствия объекта на конкретном кадре видеопотока и положительным или отрицательным результатом работы алгоритма отслеживания. Кроме того, для визуального анализа изложенных в таблице ситуаций был составлен рис. 1. В каждом случае на рисунке размещено три слоя: верхний слой — слой, показывающий наличие или отсутствие реального объекта в видеопотоке; средний слой — слой, показывающий результаты работы алгоритмов поиска и отслеживания; нижний слой — слой, обо-

значающий корректную или некорректную работу алгоритма отслеживания или поиска.

Сопоставление рассмотренных типов ситуаций с реальными объектами в кадре позволяет выявить необозначенный в стандартном анализе вариант ошибки в работе алгоритма отслеживания (рис. 1). В случае номер № 4 возникает ситуация пятого типа: появление дубликата, суть которой — ошибка в работе алгоритма отслеживания, связанная с преждевременной потерей отслеживаемого объекта с последующим нахождением потерянного объекта алгоритмом поиска. Но так как объект был потерян, то вновь найденный объект уже считается за другой объект, что по сути является даже более значительной ошибкой в работе алгоритма, чем преждевременная потеря объекта.

На основании представленной типизации ситуаций был составлен алгоритм (табл. 3) расчета ошибок различного типа, базирующийся на сравнении результатов работы алгоритма с эталонными результатами. В основу алгоритма легло следующее математическое описание типов ситуаций.

Обозначим с помощью $x_{t,il}, y_{t,il}, x_{b,il}, y_{b,il}$ координаты верхнего левого и нижнего правого углов соответственно области, которая в рамках алгоритма считается областью нахождения искомого объекта. Объект o с номером i на кадре l считается найденным верно, если позиция объекта $o_{il} = \{x_{t,il}, y_{t,il}, x_{b,il}, y_{b,il}\}$ совпадает с позицией одного из эталонных (нижний суффикс et) объектов $o_{et,il} = \{x'_{t,il}, y'_{t,il}, x'_{b,il}, y'_{b,il}\}$ с номером j на текущем изображении l с учетом коэффициентов наложения (e_1, e_2, e_3, e_4), задаваемых до начала работы алгоритма (по модулю меньше единицы). Таким образом, нужно ввести логическую функцию от координат искомого и эталонного объектов. В рамках данной работы предлагается взять следующую логическую функцию:

$$\begin{aligned} f(o_{il}, o_{et,jl}) &= f(x_{t,il}, y_{t,il}, x_{b,il}, y_{b,il}, x'_{t,jl}, y'_{t,jl}, x'_{b,jl}, y'_{b,jl}) = \\ &= \left(\frac{|x_{t,il} - x'_{t,jl}|}{\max(|x_{t,il} - x_{b,il}|, |x'_{t,jl} - x'_{b,jl}|)} < e_1 \right) \& \\ &\& \left(\frac{|y_{t,il} - y'_{t,jl}|}{\max(|y_{t,il} - y_{b,il}|, |y'_{t,jl} - y'_{b,jl}|)} < e_2 \right) \& \\ &\& \left(\frac{|x_{b,il} - x'_{b,jl}|}{\max(|x_{t,il} - x_{b,il}|, |x'_{t,jl} - x'_{b,jl}|)} < e_3 \right) \& \\ &\& \left(\frac{|y_{b,il} - y'_{b,jl}|}{\max(|y_{t,il} - y_{b,il}|, |y'_{t,jl} - y'_{b,jl}|)} < e_4 \right). \end{aligned} \quad (4)$$

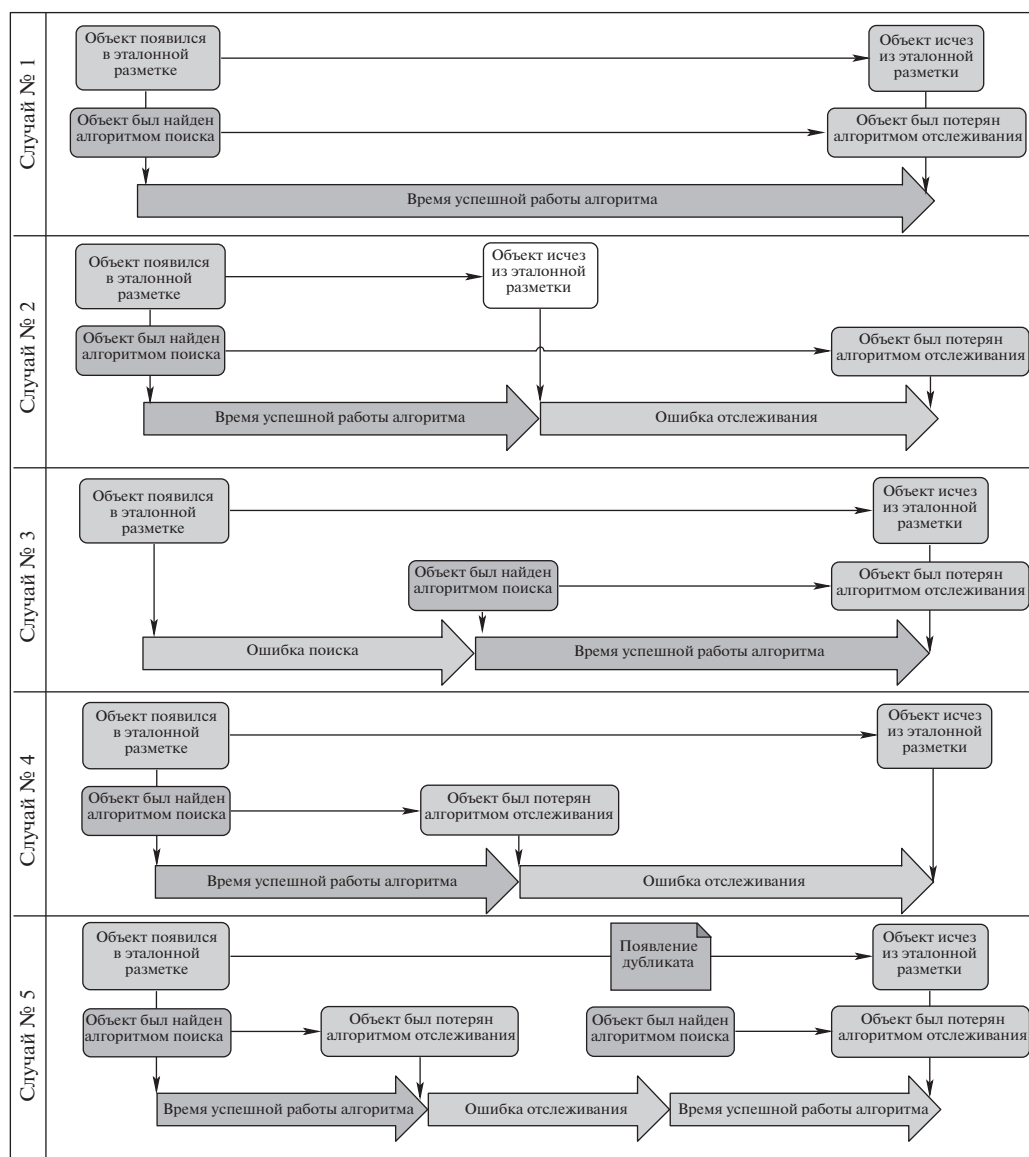


Рис. 1. Графическое сопоставление ситуаций работы алгоритма отслеживания и поведения модельных (реальных) объектов.

На основании предложенной классификации введем математическое описание ситуаций, которое впоследствии будет использовано при расчете статистики согласно пункту 9 представленного алгоритма в табл. 3.

• Тип № 1 – присутствующий объект o_{il} успешно отслеживается на выбранном кадре l , если объект успешно найден на рассматриваемом кадре или

$$\exists o_{i(l-1)}, o_{et,i(l-1)}, o_{et,il} : f(o_{i(l-1)}, o_{et,i(l-1)}) = 1 \ \& \ f(o_{il}, o_{et,il}) = 1. \quad (5)$$

• Тип № 2 – отслеживаемый объект o_{il} отсутствует на кадре l , если

$$\forall o_{et,jl} : f(o_{il}, o_{et,jl}) = 0. \quad (6)$$

• Тип № 3 – объект $o_{et,il}$ не отслеживается на кадре l , если

$$\forall o_{i(l-1)}, o_{et,i(l-1)}, o_{il} : f(o_{i(l-1)}, o_{et,i(l-1)}) = 0 \ \& \ f(o_{il}, o_{et,il}) = 0. \quad (7)$$

• Тип № 4 – $o_{et,il}$ не отслеживается на кадре l , если

$$\exists o_{i(l-1)}, o_{et,i(l-1)} : f(o_{i(l-1)}, o_{et,i(l-1)}) = 1 \ \& \ \nexists o_{jl} : f(o_{et,il}, o_{jl}) = 1. \quad (8)$$

Таблица 1. Ключевые параметры основного алгоритма и модификаций

№	Модификация	Обозначение параметра и его описание
1	Основной алгоритм	Граница истинности a в диапазоне $[0,1]$
2	Адаптация шаблона в процессе работы	Граница истинности a в диапазоне $[0,1]$ при использовании модификации Коэффициент сложения b имеющегося шаблона с изображением найденного объекта в диапазоне $[0,1]$
3	Повторный поиск потерянных объектов	Граница истинности a в диапазоне $[0,1]$ при использовании модификации
4	Дополнительная проверка объектов с помощью яркостной характеристики	Граница истинности a в диапазоне $[0,1]$ при использовании модификации Коэффициент сравнения гистограмм c имеющегося шаблона с изображением найденного объекта в диапазоне $[0,1]$
5	Уменьшение области поиска объекта	Коэффициент k расширения области поиска относительно размера искомого объекта

Таблица 2. Гипотетическое пространство ситуаций

	Объект присутствует в видеопотоке (существует)	Объект отсутствует в видеопотоке (не существует)
Объект отслеживается	Верная работа алгоритма отслеживания (тип № 1)	Неверная работа алгоритма отслеживания (тип № 2)
Объект не отслеживается	Объект не найден (тип № 3) Объект потерян (тип № 4)	Верная работа алгоритма отслеживания (не рассматривается)

Таблица 3. Алгоритм расчета результатов работы алгоритма отслеживания объектов

Алгоритм состоит из следующих элементов (по умолчанию ни у одного объекта, отслеживаемого в рамках программы нет ни отметки о потере, ни отметки об отслеживании):

- 1) Если есть доступные кадры в видеопотоке, то берется кадр, иначе переход к пункту 9.
- 2) Если для данного кадра есть сопоставленные, не рассмотренные ранее на этом кадре с ним эталонные объекты, то необходимо взять первый из них или следующий и перейти к пункту 3, иначе перейти к пункту 7.
- 3) Если для взятого эталона можно найти хотя бы один объект, удовлетворяющий критерию (4), то необходимо к эталону добавить отметку об отслеживании. Иначе перейти к пункту 5.
- 4) Если у эталона есть отметка о потере, то ее необходимо убрать и увеличить количество найденных дубликатов, иначе вернуться к пункту 2.
- 5) Если у эталонного объекта есть отметка об отслеживании, то ее необходимо убрать, добавить отметку о потере и увеличить время ошибки отслеживания для данного объекта, иначе перейти к пункту 6.
- 6) Необходимо увеличить время ошибки поиска для данного объекта и перейти к пункту 2.
- 7) Если для кадра остались не рассмотренные отслеживаемые объекты, то необходимо по очереди добавить для каждого из них время работы ошибки отслеживания. Иначе перейти к пункту 8.
- 8) Необходимо сохранить необходимые количественные данные и перейти к пункту 9.
- 9) Необходимо рассчитать статистику. Конец алгоритма.

• Тип № 5 – отслеживаемый объект o_{il} является дубликатом, если на одном из предыдущих кадров k

$$\exists o_{jk} : f(o_{jk}, o_{il}) = 1 \ \& \ f(o_{et, m(k-1)}, o_{j(k-1)}) = 1 \ \& \ f(o_{et, mk}, o_{jk}). \tag{9}$$

МЕТРИКА СРАВНЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ РАБОТЫ АЛГОРИТМОВ ОТСЛЕЖИВАНИЯ С УЧЕТОМ ТОЧНОСТИ И ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ

Для оценки результатов работы алгоритмов отслеживания предлагается ввести следующие

статистические параметры, которые будут отражать результат работы алгоритма отслеживания:

- Общая ошибка в работе алгоритма поиска и отслеживания E_t ;

$L_{эт}$ — количество кадров, на которых находятся объекты в эталонной разметке;

L_T — количество кадров, на которых находятся объекты в результате работы алгоритмов поиска и отслеживания;

L_n — количество кадров, на которых находятся объекты в эталонной разметке и в результатах работы алгоритмов поиска и отслеживания.

$$E_t = \frac{E}{L_{э} + L_T - L_n} \times 100\% \quad (10)$$

- $\langle T \rangle$ — среднее время нахождения объекта в видеопотоке в рамках текущей итерации работы алгоритма отслеживания;

- $\langle T \rangle_{эт}$ — среднее время нахождения объекта в видеопотоке в рамках эталонной разметки текущего видеопотока;

$$\Delta T = |\langle T \rangle - \langle T \rangle_{эт}| \quad (11)$$

- D_n — количество дубликатов;

- $\max D$ — максимальное количество дубликатов объектов (случай № 5), которое было выбрано на основании перебора всех возможных параметров экспериментов;

- t_m — среднее время работы алгоритма на 1 кадр. Важно отметить, что берется именно среднее время работы на кадр, тогда как более традиционной является нормировка на один объект. Использование нормировки на объект не позволяет учесть так называемые “выпадающие” кадры — то есть кадры, которые не успевает обработать алгоритм отслеживания в связи с более высокой частотой их поступления, чем производительность алгоритма;

- N — выпадающие кадры;

- $\max t_m$ — максимальное время работы на 1 кадр в рамках всей серии экспериментов.

$$Q = \frac{\Delta T}{\langle T \rangle_{эт}} + E_t + \frac{D}{\max D} + \frac{t_m}{\max t_m} \quad (12)$$

Погрешность для значения критерия вычисляется следующим образом:

$$\Delta Q = Q \sqrt{\left(\frac{1}{fps \langle T \rangle} \right)^2 + \left(\frac{1}{fps \langle T_{ош} \rangle} \right)^2}, \quad (13)$$

где $\langle T \rangle_{ош}$ — среднее время ошибки работы алгоритмов отслеживания, fps — количество кадров в видеопотоке в секунду. Использование погрешности в расчете обусловлено тем, что предполагается использовать ручную разметку эталонного видеофайла.

Основной недостаток предлагаемого критерия — относительные значения, зависящие от выборки конкретного эксперимента. С его использованием нельзя провести абсолютное сравнение алгоритмов между собой.

МЕТОДИКА ПОСТРОЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Для проведения эксперимента было подготовлено специальное видео, устройство сцены которого и демонстрационные кадры из которого можно видеть на рис. 2. Продолжительность видео составила 1 минута 30 секунд, оно состоит из 2270 кадров. На видео присутствовало 41 лицо. Среднее время пребывания лица в кадре составило 3.3 секунды. Для оценки точности работы алгоритма была проведена ручная разметка видеоролика.

Для расчета указанных параметров был разработан программный комплекс, детальное описание работы которого находится за рамками данной работы.

Эксперименты в данной работе выстраиваются последовательно в соответствии с таблицей 1.

Граница истинности для алгоритма без модификаций

Перед проведением эксперимента в целях избегания потери кадров, связанных с большой зоной поиска объекта, был установлен коэффициент k для области поиска, равный трем. Результаты подбора параметра представлены в табл. 4. При этом видно, что с точки зрения критерия подбор параметров необходим для минимально эффективной работы алгоритма. В частности:

- Граница истинности в интервале от 0 до 0.8 приводит к потере обработанных кадров даже с учетом уменьшенной зоны поиска, что связано с тем, что отслеживаемые объекты “не теряются”, то есть идет отслеживание ложных объектов (ситуация типа 2). Устанавливать значения границы истинности из указанного диапазона не целесообразно в принципе. При этом критерий позволяет избежать установки таких параметров без подсчета количества потерянных кадров, что показывает его эффективность.

- Оптимальные значения границы истинности лежат в интервале от 0.9 до 0.94. Результаты в этих интервалах совпадают в пределах погрешности.

- Максимальная разница в относительной ошибке результатов работы алгоритма отслеживания составляет 1.92 раза.

- Абсолютные значения критерия различаются на порядки, как и абсолютная разница в работе алгоритма с разными параметрами, что показы-

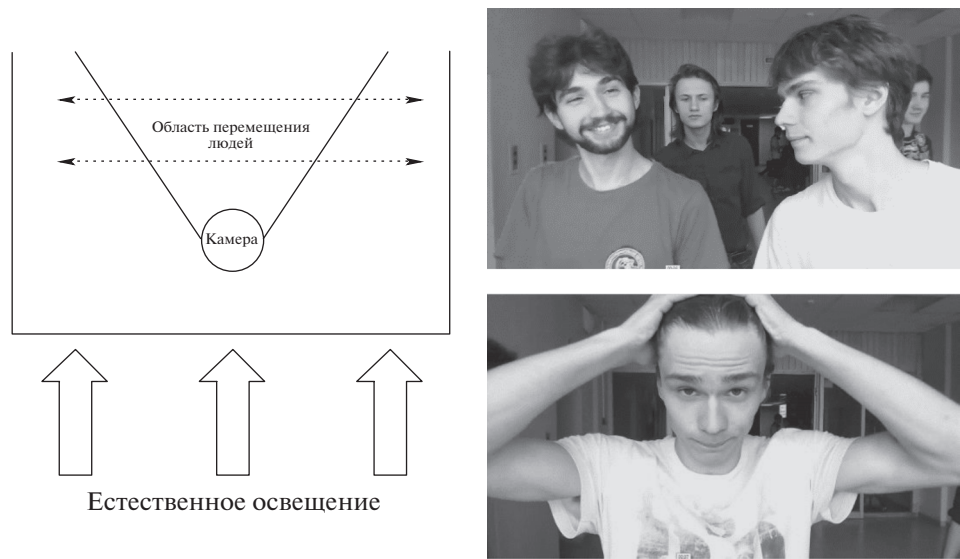


Рис. 2а. Устройство сцены тестового видеоролика. 2б. Примеры кадров из видеоролика.

вает необходимость работы с параметрами алгоритма перед их практическим использованием.

Подбор оптимальных параметров для модификаций

На основании табл. 1 приводим в табл. 5 результаты подбора параметров для предложенных модификаций. Модификации добавляются по-

степенно в соответствии со строчками в таблице в формате “нарастающим итогом”. В табл. 5 в графах “ α ” и “доп. параметр” приводятся подобранные значения параметров, а в графах “ E_t ”, “ D ”, и “влияние на производительность” дополнительно указывается диапазон влияния изменения параметров на соответствующий показатель.

Таблица 4. Подбор параметров для алгоритма без модификаций

α	ΔT , мс	E_t	D	t , мс	Q	Δ	N
0.1	49691	72%	18	81.23	17.7	0.03	483
0.2	50977	71.70%	18	77.57	18.18	0.03	385
0.3	49362	72.20%	21	61.21	17.48	0.03	282
0.4	45502	76.60%	20	59.34	16.39	0.03	278
0.5	45574	75.50%	18	50.75	16.291	0.03	242
0.6	32414	67.00%	16	35.47	11.66	0.03	120
0.7	21897	68.70%	18	21.7	8.25	0.03	31
0.8	8873	57.70%	16	14.23	3.81	0.03	15
0.9	512	33.70%	16	11.1	0.91	0.03	0
0.91	297	39.00%	17	10.88	0.90	0.06	0
0.92	22	43.10%	19	10.73	0.89	0.05	0
0.93	438	39.90%	21	10.6	1.01	0.07	0
0.94	570	37.60%	18	10.51	0.97	0.11	0
0.95	1389	31.20%	25	10.51	1.27	0.14	0
0.96	1963	34.40%	17	10.51	1.34	0.13	0
0.97	1996	37.40%	29	10.51	1.58	0.15	0
0.98	2427	40.90%	51	10.51	2.10	0.21	0
0.99	2191	44.80%	26	10.51	1.66	0.15	0
1	Алгоритм не работает, объекты сразу же не отслеживаются.						

Таблица 5. Влияние параметров модификаций на производительность

Модификация	α	Доп. параметр	E_t	D	Масштабы влияния на производительность
Адаптация шаблона в процессе работы	0.955	0.3 – 0.6	21.90% 4-х влияние	11 4-х влияние	8-х влияние
Повторный поиск потерянных объектов	0.95	—	22.10% Отсутствует	6 2-х влияние	Увеличивает производительность в 2.4 раза
Проверка объектов с помощью яркостной характеристики	0.925	0.65–0.8	10.60% 10-х влияние	3 3-х влияние	Уменьшает производительность на 8%
Уменьшение области поиска объекта	0.925	2–3	9.00%	3	10-х влияние

Также в рамках работы целесообразно показать, что неверный подбор параметров может привести с точки зрения оценки ошибки работы алгоритма к отказу от использования эффективных модификаций, пример чего можно видеть на рис. 3 (ось Y – процент ошибки, ось X – граница истинности). В качестве примера модификации используется модификация адаптации шаблона. Как видно, при значении границы истинности от 0 до 0.92 использование модификации нецелесообразно, тогда как при значении параметра от 0.93 до 1 использование модификации целесообразно и дает меньший процент ошибок, чем немодифицированный вариант.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе наглядно показано, что использование параметрической оптимизации с целью повышения эффективности работы алгоритмов отслеживания объектов является не просто полезным для повышения точности работы алгоритмов, но на самом деле необходимым для обеспечения работы рассматриваемых алгоритмов.

Основные выводы по итогам работы:

- Метрики для оценки качества работы алгоритмов отслеживания должны включать такой параметр, как производительность алгоритма на один кадр. Отсутствие этого параметра может приводить к неучету алгоритмом ряда кадров, которые не успели обработать в рамках алгоритма. Потеря кадров ведет к дополнительной ошибке, которая не зависит от исходного алгоритма отслеживания объектов.

- Неверный подбор параметров может привести, с точки зрения оценки ошибки работы алгоритма, к отказу от использования эффективных модификаций.

- Для алгоритма отслеживания по шаблону при использовании нормализованной корреляции оптимально использовать границу отсечения в интервале от 0.92 до 0.955 во всех рассматриваемых случаях.

- С помощью подбора параметров можно уменьшить процент ошибок в несколько раз. В данной статье показано, что для алгоритма отслеживания объектов по шаблону можно увеличить точность в 4.7 раза при увеличении производительности в 2.2 раза при использовании модификаций и подборе их параметров.

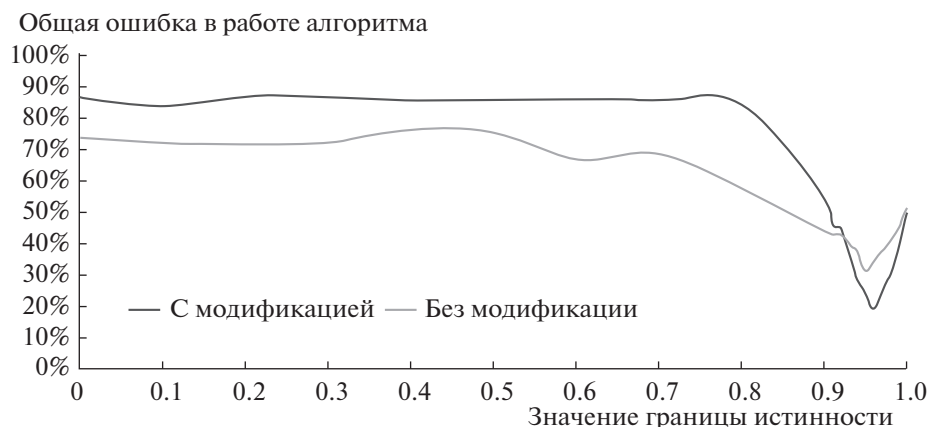


Рис. 3. Сравнение ошибки работы алгоритмов отслеживания в зависимости от границы истинности.

Дальнейшее направление работы заключается в исследовании существующих алгоритмов отслеживания объектов и их модификаций с целью выявления эффективных и неэффективных, а также с целью подбора параметров для существующих алгоритмов отслеживания объектов. Направления исследования: перебор различных алгоритмов отслеживания; создание и использование видеороликов, снятых в различных условиях внешней среды, с целью подбора параметров под среду; разработка модификаций для алгоритмов отслеживания и их типизация на основании представленной в работе классификации; анализ влияния количества объектов на результаты работы алгоритма и т.п.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено в рамках проекта № 25.2911.2017/4.6 “Апробация технологии снижения риска возникновения и уменьшения последствий катастроф техногенного происхождения за счет минимизации влияния человеческого фактора на надежность и безаварийность работы АЭС и других опасных объектов” в соответствии с конкурсной частью государственного задания НИЯУ МИФИ на 2017–2019 гг.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bradski G., Kaehler A.* Learning OpenCV: Computer vision with the OpenCV library. “O’Reilly Media, Inc.”, 2008.
2. *Al-Kaff A. et al.* Survey of computer vision algorithms and applications for unmanned aerial vehicles // *Expert Systems with Applications*. 2018. Т. 92. С. 447–463.
3. *Buch N., Velastin S.A., Orwell J.* A review of computer vision techniques for the analysis of urban traffic // *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*. 2011. Т. 12. № 3. С. 920–939.
4. *Alyushin M.V., Alyushin V.M., Kolobashkina L.V.* “Methodological aspects of automated forecasting of emergency situations of technogenic origin”. *Questions of psychology*. 2016. V. 2. P. 83–90.
5. *Alyushin M.V., Alyushin A.V., Belopolskiy V.M., Kolobashkina L.V., Ushakov V.D.* “Optical Technologies for Monitoring Systems of the Current Functional State of the Operational Management Personnel of Nuclear Power Facilities”. *Global Nuclear Safety*. 2013. V. 2. № 7. P. 69–77.
6. *Joskowicz L.* Future Perspectives on Statistical Shape Models in Computer-Aided Orthopedic Surgery: Beyond Statistical Shape Models and on to Big Data // *Computer Assisted Orthopaedic Surgery for Hip and Knee*. Springer, Singapore, 2018. С. 199–206.
7. *Куций Н.Н., Осипова Е.А.* Параметрическая оптимизация систем с интегральной широтно-импульсной модуляцией с использованием беспoiseкового градиентного алгоритма // *Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика*. 2012. № 1. С. 2–6.
8. *Кохно А.Г.* Многокритериальная параметрическая оптимизация судовых автоматизированных систем: дисс. канд. техн. наук // Санкт-Петербургский государственный университет водных коммуникаций, Санкт-Петербург. 2012.
9. *Скляренко А.А.* Методы решения задачи пописельной s-аппроксимации мультитоновых изображений и их оптимизация // Ростов-на-Дону: Издательский центр ДГТУ. 2012.
10. *Dunai Dunai L. et al.* Euro banknote recognition system for blind people // *Sensors*. 2017. Т. 17. № 1. С. 184.
11. *Bruce B.R., Aitken J.M., Petke J.* Deep parameter optimization for face detection using the viola-jones algorithm in OpenCV // *International Symposium on Search Based Software Engineering*. Springer, Cham. 2016. С. 238–243.
12. *Egorov A.D., Shtanko A.N., Minin P.E.* Selection of Viola–Jones algorithm parameters for specific conditions // *Bulletin of the Lebedev Physics Institute*. 2015. Т. 42. № 8. С. 244–248.
13. *Smeulders A.W.M. et al.* Visual tracking: An experimental survey // *IEEE transaction on pattern analysis and machine intelligence*. 2014. Т. 36. № 7. С. 1442–1468.
14. *Oron S. et al.* Locally orderless tracking // *International Journal of Computer Vision*. 2015. Т. 111. № 2. С. 213–228.
15. *Briechele K., Hanebeck U.D.* Template matching using fast normalized cross correlation // *Optical Pattern Recognition XII. International Society for Optics and Photonics*, 2001. Т. 4387. С. 95–103.
16. *Ross D.A. et al.* Incremental learning for robust visual tracking // *International journal of computer vision*. 2008. Т. 77. № 1–3. С. 125–141.
17. *Isard M., Blake A.* A mixed-state condensation tracker with automatic model-switching // *Computer Vision, 1998. Sixth International Conference on. IEEE*, 1998. С. 107–112.
18. *Mei X., Ling H.* Robust visual tracking using ℓ_1 minimization // *Computer Vision, 2009 IEEE 12th International Conference on. IEEE*, 2009. С. 1436–1443.
19. *Ayvaci A., Raptis M., Soatto S.* Sparse occlusion detection with optical flow // *International journal of computer vision*. 2012. Т. 97. № 3. С. 322–338.
20. *Nguyen H.T., Smeulders A.W.M.* Robust tracking using foreground-background texture discrimination // *International Journal of Computer Vision*. 2006. Т. 69. № 3. С. 277–293.
21. *Godec M., Roth P.M., Bischof H.* Hough-based tracking of non-rigid objects // *Computer Vision and Image Understanding*. 2013. Т. 117. № 10. С. 1245–1256.
22. *Salti S., Cavallaro A., Di Stefano L.* Adaptive appearance modeling for video tracking: Survey and evaluation // *IEEE Transactions on Image Processing*. 2012. Т. 21. № 10. С. 4334–4348.
23. *Chan T.F., Vese L.A.* Active contours without edges // *IEEE Transactions on image processing*. 2001. Т. 10. № 2. С. 266–277.
24. *Briechele K., Hanebeck U.D.* Template matching using fast normalized cross correlation // *Optical Pattern Recognition XII. International Society for Optics and Photonics*, 2001. Т. 4387. С. 95–103.

25. Shen X. et al. Detecting and aligning faces by image retrieval // Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2013 IEEE Conference on. IEEE, 2013. C. 3460–3467.
26. Leibe B., Leonardis A., Schiele B. Robust object detection with interleaved categorization and segmentation // International journal of computer vision. 2008. T. 77. № 1–3. C. 259–289.
27. Ballard D.H. Generalizing the Hough transform to detect arbitrary shapes // Readings in computer vision. 1987. C. 714–725.
28. Felzenszwalb P.F. et al. Object detection with discriminatively trained part-based models // IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence. 2010. T. 32. № 9. C. 1627–1645.
29. Chen D. et al. Joint cascade face detection and alignment // European Conference on Computer Vision. Springer, Cham, 2014. C. 109–122.
30. Martins P., Caseiro R., Batista J. Generative face alignment through 2.5 d active appearance models // Computer Vision and Image Understanding. 2013. T. 117. № 3. C. 250–268.
31. Samoylov A.S. et al. Face tracking for a system of collecting statistics on visitors and quality assessment of its functioning // Journal of Theoretical & Applied Information Technology. 2015. T. 71. № 3.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 3, pp. 352–362

Optimization of Parametric Object Video Stream Tracking Algorithms

A. D. Egorov[#]

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[#]e-mail: ADEgorov@mephi.ru

Received January 15, 2019; revised February 28, 2019; accepted March 12, 2019

Abstract—An increase in the efficiency of algorithms of object tracking in video streams through the parametric optimization of these algorithms has been discussed. In contrast to most of such studies, accuracy and performance parameters are taken into account in one objective optimization function. There are five different results of object tracking in video streams: correct tracking, false object tracking, premature object loss, finding an object with a delay, and double object detection after premature loss. It has been shown that the parametric optimization makes it possible to increase the accuracy and performance of template matching tracking by factors of 4.7 and 2.2, respectively. At the same time, it has been found that the absence of parametric optimization can lead in practice to the refusal of efficient modifications. For example, template adaptation modification increases the template tracking quality only in 10% of the cases and decreases it in other 90% of the cases. Particular parameters of the algorithm for template object tracking in video streams have been recommended for computer vision systems.

Keywords: parametric optimization, object tracking in video stream, template matching, computer vision, video stream

DOI: 10.1134/S2304487X19030052

REFERENCES

1. Bradski G., Kaehler A. Learning OpenCV: Computer vision with the OpenCV library. "O'Reilly Media, Inc.", 2008.
2. Al-Kaff A. et al. Survey of computer vision algorithms and applications for unmanned aerial vehicles. *Expert Systems with Applications*, 2018, pp. 447–463.
3. Buch N., Velastin S.A., Orwell J. A review of computer vision techniques for the analysis of urban traffic. *IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems*, 2011, vol. 12, no. 3, pp. 920–939.
4. Alyushin M.V., Alyushin V.M., Kolobashkina L.V. Methodological aspects of automated forecasting of emergency situations of technogenic origin. *Questions of psychology*, 2016, vol. 2, pp. 83–90.
5. Alyushin M.V., Alyushin A.V., Belopolskiy V.M., Kolobashkina L.V., Ushakov V.D. Optical Technologies for Monitoring Systems of the Current Functional State of the Operational Management Personnel of Nuclear Power Facilities. *Global Nuclear Safety*, 2013, vol. 2(7), pp. 69–77.
6. Joskowicz L. Future Perspectives on Statistical Shape Models in Computer-Aided Orthopedic Surgery: Beyond Statistical Shape Models and on to Big Data. *Computer Assisted Orthopaedic Surgery for Hip and Knee*. Springer, Singapore, 2018, pp. 199–206.
7. Kutsiy N.N. Parametricheskaya optimizatsiya sistem s integral'noj shirotno-impul'snoy modulyaciej s ispol'zovaniem bespoiskovogo gradientnogo algoritma [Parametric optimization of systems with integral pulse-width modulation using a searchless gradient algorithm].

- Instruments and Systems: Monitoring, Control, and Diagnostics, 2012, vol. 1, pp. 2–6.
8. Kohno A.G. Mnogokriterial'naya parametriceskaya optimizaciya sudovyh avtomatizirovannyh sistem. Kand. Diss. [*Multi-criteria parametric optimization of ship automated systems*. Kand. Diss.]. Saint-Petersburg, 2012.
 9. Sklyarko A.A. Metody resheniya zadachi popiksel'noj s-approksimacii mul'titonovyh izobrazhenij i ih optimizaciya. Kand. Diss. [*methods for solving the pixix s-approximation multiton images and their optimization*. Kand. Diss.], Rostov-on-Don, 2012.
 10. Dunai L. et al. Euro banknote recognition system for blind people. *Sensors*, 2017, vol. 17(1), pp. 184.
 11. Bruce B.R., Aitken J.M., Petke J. Deep parameter optimization for face detection using the viola-jones algorithm in OpenCV. *International Symposium on Search Based Software Engineering*. Springer, Cham, 2016, pp. 238–243.
 12. Egorov A.D., Shtanko A.N., Minin P.E. Selection of Viola–Jones algorithm parameters for specific conditions. *Bulletin of the Lebedev Physics Institute*, 2015, vol. 42(8), pp. 244–248.
 13. Smeulders A.W.M. et al. Visual tracking: An experimental survey. *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 2014, vol. 36(7), pp. 1442–1468.
 14. Oron S. et al. Locally orderless tracking. *International Journal of Computer Vision*, 2015, vol. 111(2), pp. 213–228.
 15. Briechele K., Hanebeck U.D. Template matching using fast normalized cross correlation. *Optical Pattern Recognition XII*. International Society for Optics and Photonics, 2001, vol. 4387, pp. 95–103.
 16. Ross D.A. et al. Incremental learning for robust visual tracking. *International journal of computer vision*, 2008, vol. 77 (1–3), pp. 125–141.
 17. Isard M., Blake A. A mixed-state condensation tracker with automatic model-switching. *Computer Vision, 1998. Sixth International Conference on. IEEE*, 1998, pp. 107–112.
 18. Mei X., Ling H. Robust visual tracking using ℓ_1 minimization. *Computer Vision, 2009, IEEE 12th International Conference on. IEEE*, 2009, pp. 1436–1443.
 19. Ayvaci A., Raptis M., Soatto S. Sparse occlusion detection with optical flow. *International journal of computer vision*. 2012, vol. 97(3), pp. 322–338.
 20. Nguyen H.T., Smeulders A.W.M. Robust tracking using foreground-background texture discrimination. *International Journal of Computer Vision*, 2006, vol. 69(3), pp. 277–293.
 21. Godec M., Roth P.M., Bischof H. Hough-based tracking of non-rigid objects. *Computer Vision and Image Understanding*, 2013, vol. 117(10), pp. 1245–1256.
 22. Salti S., Cavallaro A., Di Stefano L. Adaptive appearance modeling for video tracking: Survey and evaluation. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2012, vol. 21(10), pp. 4334–4348.
 23. Chan T.F., Vese L.A. Active contours without edges. *IEEE Transactions on image processing*, 2001, vol. 10(2), pp. 266–277.
 24. Briechele K., Hanebeck U.D. Template matching using fast normalized cross correlation. *Optical Pattern Recognition XII*, 2001, vol. (4387), pp. 95–103.
 25. Shen X. et al. Detecting and aligning faces by image retrieval. *Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2013 IEEE Conference on*, 2013, pp. 3460–3467.
 26. Leibe B., Leonardis A., Schiele B. Robust object detection with interleaved categorization and segmentation // *International journal of computer vision*, 2008, vol. 77(1–3), pp. 259–289.
 27. Ballard D.H. Generalizing the Hough transform to detect arbitrary shapes. *Readings in computer vision*, 1987, pp. 714–725.
 28. Felzenszwalb P.-F. et al. Object detection with discriminatively trained part-based models. *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 2010, vol. 32(9), pp. 1627–1645.
 29. Chen D. et al. Joint cascade face detection and alignment. *European Conference on Computer Vision*, 2014, pp. 109–122.
 30. Martins P., Caseiro R., Batista J. Generative face alignment through 2.5 d active appearance models. *Computer Vision and Image Understanding*, 2013, vol. 117(3), pp. 250–268.
 31. Samoylov A.S. et al. Face tracking for a system of collecting statistics on visitors and quality assessment of its functioning. *Journal of Theoretical & Applied Information Technology*, 2015, vol. 71(3).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДИКИ ДИНАМИЧЕСКОЙ АДАПТАЦИИ СЕТКИ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ПОЛОС ЛОКАЛИЗОВАННОЙ ДЕФОРМАЦИИ

© 2019 г. Р. В. Муратов¹, Н. А. Кудряшов¹, П. Н. Рябов^{1,*}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

*e-mail: pnryabov@mephi.ru

Поступила в редакцию 13.05.2019 г.

После доработки 29.05.2019 г.

Принята к публикации 11.06.2019 г.

Рассмотрен процесс локализации пластической деформации в неполярных упруго-пластичных материалах, подвергаемых высокоскоростным сдвиговым нагрузкам. В качестве исследуемых материалов в работе рассматривается бескислородная медь и низкоуглеродистая сталь. Сформулирована математическая модель процесса локализации пластической деформации в данных материалах, учитывающая процесс их термического разупрочнения. Генерация процессов образования полос локализованной деформации осуществляется за счет неравномерного начального нагрева материалов. С применением метода конечных разностей предложен численный алгоритм для проведения математического моделирования процессов локализации пластической деформации. С целью оптимизации работы предложенного алгоритма, разработан метод динамической адаптации пространственной сетки, позволяющий увеличивать сеточное разрешение в областях локализации пластических деформаций в течение расчета, что делает возможным сохранить точность полученных результатов при уменьшении количества сеточных узлов. Данный алгоритм был протестирован на известной задаче о формировании одиночной полосы адиабатического сдвига, впервые рассмотренной другими авторами, а также на задаче с образованием множественных полос адиабатического сдвига. Для обеих задач предложенный численный алгоритм показал хорошие результаты, а также продемонстрировал увеличение производительности с сохранением точности расчета.

Ключевые слова: пластическая деформация, полоса сдвига, численное моделирование, динамическая адаптация

DOI: 10.1134/S2304487X19040072

1. ВВЕДЕНИЕ

Вот уже несколько десятилетий феномен локализации пластической деформации привлекает множество исследователей из различных областей наук: материаловедение, молекулярная динамика [1], геофизика [2], математика [3]. Формирование полос адиабатического сдвига (ПАС) является серьезной проблемой в обрабатываемой, атомной и военно-космической промышленности, поскольку является одной из основных причин разрушения материалов [4]. Кроме этого, модели образования и роста ПАС вызывают интерес у математиков, в силу своей нелинейности и соответствующих свойств, таких как развитие неустойчивостей и самоорганизация стабильных структур [5, 6].

Известно, что локализация пластических деформаций происходит в наиболее хрупких частях образца и может быть инициирована неоднородным распределением температуры или наличием

геометрических дефектов в материале. Под воздействием продолжительных деформаций наличие неоднородностей приводит к потере устойчивости пластического течения, быстрому росту температуры за счет преобразования работы пластической деформации во внутреннюю энергию, температурному разупрочнению материала и образованию ПАС.

Помимо аналитических расчетов и экспериментальных работ, проведено также множество численных исследований локализации пластических деформаций. Поскольку ширина ПАС составляет порядка десятка микрон, а толщина технологически значимых образцов порядка сантиметров, задача моделирования является многомасштабной. Ширина ПАС накладывает серьезные ограничения на величину дискретизации задачи по координате, а интенсивность процессов совместно с условием Куранта накладывает сильное ограничение на временной шаг. Все это сильно затрудняет моделирование полномас-

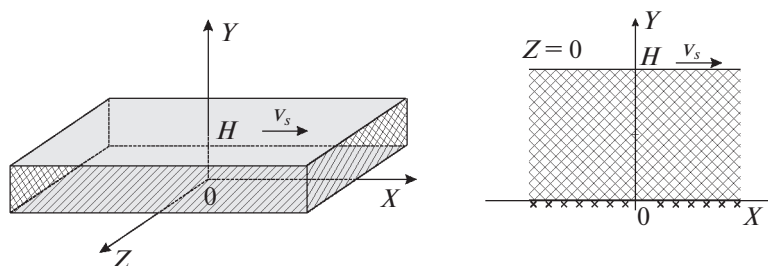


Рис. 1. Геометрия задачи.

штабных задач. Одним из решений является использование динамически адаптируемых сеток, в которых наилучшее сеточное разрешение достигается в областях с максимальными деформациями. Так, в работе [7] рассматривается конечно-элементный метод, в котором на каждом шаге элементы полностью перестраиваются так, что плотность сетки пропорциональна полной деформации.

В данной работе будет рассмотрен метод динамической адаптации сетки с фиксированным числом узлов, в котором узлы смещаются по градиенту скорости деформации, обеспечивая таким образом максимальное сеточное разрешение в областях, в которых проходят наиболее интенсивные процессы. Данный алгоритм будет протестирован на классической задаче, а также будет проведено моделирование формирования множества ПАС.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССОВ ЛОКАЛИЗАЦИИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Рассмотрим процесс сдвиговой деформации бесконечной пластины, состоящей из упругопластичного материала. Толщина пластины равна H , нижняя граница слоя зафиксирована, а верхняя смещается с постоянной скоростью v вдоль оси x (рис. 1). При такой постановке задачи все параметры материала (смещение частиц, скорость, температура и другие) зависят только от координаты y , а отличной от нуля является одна касательная компонента тензора напряжений σ_{xy} . В дальнейшем, $s = \sigma_{xy}$ — напряжение.

Выведем уравнения, описывающие данный физический процесс. Полагаем, что деформация складывается из упругой ϵ^e и пластичной ϵ^p компонент. Скорость изменения смещения u вдоль оси y совпадает с полной деформацией, то есть $u_y = \dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^e + \dot{\epsilon}^p$. После дифференцирования закона Гука по времени получаем первое уравнение

$$s_t = \mu v_y - \mu \dot{\epsilon}^p, \quad (2.1)$$

где μ — модуль упругого сдвига. Запишем также уравнение движения сплошной среды

$$v_t = \frac{1}{\rho} s_y \quad (2.2)$$

и закон сохранения энергии в виде

$$C\rho T_t = kT_{yy} + s\dot{\epsilon}^p, \quad (2.3)$$

здесь $T(y, t)$ — температура материала, C — теплоемкость, k — коэффициент теплопроводности, ρ — плотность материала. Последнее слагаемое описывает количество энергии, которая переходит в тепло при деформации образца. Также необходимо дополнить систему уравнением состояния, в качестве которого выступает закон пластической текучести в форме

$$\dot{\epsilon}^p = \Phi^{-1}(s, T) \dot{\epsilon}_y \max \left[0, \left(\frac{s}{\sigma_0 g(T)} \right)^{\frac{1}{m}} - 1 \right], \quad (2.4)$$

$$g(T) = (1 - aT)^n.$$

Поскольку $\dot{\epsilon}^p \geq 0$, пластическая деформация в точке всегда возрастает.

Граничные условия одинаковы во всех экспериментах: скорость сдвига на границах зафиксирована, а границы теплоизолированы

$$\begin{aligned} v(0, t) = 0, \quad v(H, t) = \dot{\epsilon}_0 H, \\ T_y(0, t) = T_y(H, t) = 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

В работе рассматриваются два материала: сталь НУ-100 и медь ОФНС. Параметры стали: $\rho = 7860$ кг/м³, $\mu = 80$ ГПа, $k = 49.2$ Дж/(м К), $C = 473$ Дж/(кг К), $\sigma_0 = 600$ МПа, $\dot{\epsilon}_y = 10^{-4}$ 1/с, $m = 0.025$, $a = 6.43 \times 10^{-4}$ 1/К, $n = 1$. Параметры меди: $\rho = 8960$ кг/м³, $\mu = 45$ ГПа, $k = 386$ Дж/(м К), $C = 383$ Дж/(кг К), $\sigma_0 = 69$ МПа, $\dot{\epsilon}_y = 1$ 1/с, $m = 0.027$, $a = 9.47 \times 10^{-4}$ 1/К, $n = 3$.

3. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ЗАДАЧИ

Для дискретизации задачи используется метод конечных разностей. Расчетная область разбивается на N отрезков, координаты узлов сетки y_i , $i = 0..N$. Отрезки разбиения $h_{i+\frac{1}{2}} = y_{i+1} - y_i$, усредненный шаг $\hat{h}_i = 0.5(h_{i-\frac{1}{2}} + h_{i+\frac{1}{2}})$, шаг по времени τ .

Расчетные величины u_i^n аппроксимируются в узлах сетки, где n – номер шага по координате, i – номер узла расчетной сетки. Введем сокращенную запись для некоторых конечно-разностных производных:

$$\Delta u_i^n = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{h_{i-\frac{1}{2}}} \right),$$

$$\Delta^2 u_i^n = \frac{1}{\hat{h}_i} \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{h_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{h_{i-\frac{1}{2}}} \right).$$

Уравнения (2.1) и (2.2) образуют гиперболическую подсистему относительно переменных v и s , для аппроксимации используем схему с разностями против потоков (схема типа КИР [8]). Согласно данной схеме, численное решение гиперболической системы уравнений $\mathbf{u}_t + \mathbf{A} \mathbf{u}_x = 0$ ищется по формуле:

$$\frac{\mathbf{u}_i^{n+1} - \mathbf{u}_i^n}{\tau} + A^- \frac{\mathbf{u}_{i+1}^n - \mathbf{u}_i^n}{h_{i+\frac{1}{2}}} + A^+ \frac{\mathbf{u}_i^n - \mathbf{u}_{i-1}^n}{h_{i-\frac{1}{2}}} = 0,$$

$$A^\pm = \frac{1}{2} (A \pm \Omega_L |\Lambda| \Omega_R), \quad A = \Omega_L \Lambda \Omega_R,$$

здесь $\Omega_L = \Omega_R^{-1}$ – матрицы спектрального разложения, Λ – матрица собственных значений. Применительно к нашей задаче, собственные значения равны $\pm S$, где $S = \sqrt{\mu/\rho}$ – скорость распространения поперечных упругих волн в материале, а итоговая схема:

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{\tau}{\rho} \Delta s_i^n + \frac{\tau S \hat{h}_i}{2} \Delta^2 v_i^n, \quad (3.1)$$

$$s_i^{n+1} = s_i^n + \tau \mu \Delta v_i^n + \frac{\tau S \hat{h}_i}{2} \Delta^2 s_i^n - \frac{\tau \mu}{2} (\dot{\epsilon}_i^{p(n)} + \dot{\epsilon}_i^{p(n+1)}). \quad (3.2)$$

Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени и координате, условие устойчивости $\tau \leq h_{\min}/S$. Формула (3.1) позволяет явно вычислить скорость v^{n+1} на следующем шаге. А используя закон пластической текучести, формулу (3.2) можно переписать в виде

$$s_i^{n+1} \hat{s}_i - \frac{\tau \mu}{2} \dot{\epsilon}_i^{p(n+1)} = \hat{s}_i - \frac{\tau \mu}{2} \Phi^{-1}(s_i^{n+1}, T_i^n),$$

где величина $\hat{s}_i$ – сокращенная запись части уравнения (3.2), которая вычисляется явно. Данное нелинейное уравнение на s_i^{n+1} решается методом Ньютона, а затем находится скорость деформации $\dot{\epsilon}_i^{p(n+1)} = \Phi^{-1}(s_i^{n+1}, T_i^n)$.

Для аппроксимации теплового уравнения (2.3) используется явная трехточечная схема

$$C\rho \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} = k \Delta^2 T_i^n + \frac{1}{4} (s_i^n + s_i^{n+1}) (\dot{\epsilon}_i^{p(n)} + \dot{\epsilon}_i^{p(n+1)}),$$

$$\tau \leq \frac{C\rho h_{\min}^2}{2k}.$$

4. АЛГОРИТМ ДИНАМИЧЕСКОЙ АДАПТАЦИИ СЕТКИ

Будем рассматривать алгоритм адаптации с фиксированным числом узлов, которые могут смещаться. В дальнейшем у координат появится временной индекс y_i^n , также временной индекс появится у шага по времени τ^n , который необходимо будет пересчитывать в соответствии с условиями устойчивости, ориентируясь на минимальный шаг по координате $\tau^n(h_{\min}^n)$.

В начальный момент времени узлы равномерно распределены в расчетной области. Движение узлов сетки происходит по градиенту некоторой функции-индикатора, имеющей локальные максимумы в наиболее “интересных” областях, где наблюдаются наиболее сильные изменения параметров задачи. В качестве такой функции можно было бы выбрать температуру, однако, эта переменная обладает нежелательным свойством: поскольку диссипация температуры незначительна на масштабах рассматриваемой задачи, большие значения температур долго сохраняются в точках, в которых уже не происходит значительных изменений. Поэтому в качестве базовой функции для адаптации выбирается скорость деформации $\dot{\epsilon}^p$, которая равна нулю, если деформации отсутствуют и экспоненциально растет в местах, где наблюдается пластическая деформация.

Таким образом, в качестве функции, которая характеризует направление движения узлов рассматривается

$$p_i = \left(\frac{\dot{\epsilon}_{i+1}^p - \dot{\epsilon}_i^p}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{\dot{\epsilon}_i^p - \dot{\epsilon}_{i-1}^p}{h_{i-\frac{1}{2}}} \right) /$$

$$\left(\frac{\dot{\epsilon}_{i+1}^p + \dot{\epsilon}_i^p + 1}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{\dot{\epsilon}_i^p + \dot{\epsilon}_{i-1}^p + 1}{h_{i-\frac{1}{2}}} \right), \quad (4.1)$$

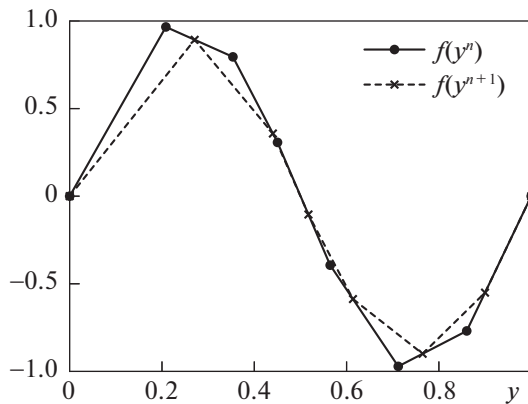


Рис. 2. Перенос значений сеточной функции.

здесь p_i имеет смысл безразмерного градиента $\dot{\epsilon}^p$, единицы в знаменателе предотвращают деление на ноль и слабо влияют на характер p_i , так как в местах с большими градиентами $\dot{\epsilon}^p \gg 1$, а в местах, где деформации отсутствуют, p_i равно нулю.

Скорость узлов сетки рассчитывается по формуле

$$v_i = RSp_i, \quad (4.2)$$

здесь коэффициент R регулирует скорость узлов, а S — скорость упругих волн в материале, используется для того, чтобы обезразмерить формулу. Следует отметить, что выбор константы S довольно удачен, так как при этом коэффициент R имеет порядок единиц. В дальнейшем везде используется значение $R = 5$ и будет показано, что такой выбор показывает хорошие результаты независимо от материала (S различны) и номинальной скорости деформации $\dot{\epsilon}_0$.

На следующем шаге рассчитываются “предварительные” координаты узлов $\hat{y}$

$$\hat{y}_i = y^n + \tau^n v_i, \quad h_{\min} < |\hat{y}_i - y_i^n| < h_{\max}, \quad (4.3)$$

при расчете на смещения накладываются некоторые ограничения, чтобы предотвратить слишком сильное сближение или отдаление узлов друг от друга. В работе используются значения $h_{\min} = 1$ мкм и $h_{\max} = 100$ мкм.

На заключительном этапе сетка $\hat{y}$ сглаживается

$$y_i^{n+1} = \frac{1}{4}(\hat{y}_{i+1} + 2\hat{y}_i + \hat{y}_{i-1}). \quad (4.4)$$

После вычисления новых координат сетки на нее переносятся значения сеточных функций. В качестве значений в новых узлах берутся значения с линейного интерполяционного сплайна, построенного на прежней сетке (рис. 2).

5. ТЕСТИРОВАНИЕ АЛГОРИТМА АДАПТАЦИИ НА ЗАДАЧЕ С ОБРАЗОВАНИЕМ ЕДИНИЧНОЙ ПАС

Данная задача рассмотрена в статьях Уолтера [9] и Чжоу [10], исследуется формирование одиночной полосы в центре стальной пластины толщиной 6.94 мм. Для локализации полосы в центре пластины начальное распределение температуры в пластине неоднородно и имеет вид гауссиана с максимумом в центре. Начальное напряжение равно нулю, а скорость в образце распределена линейно.

$$T(y, 0) = 16.2(1 - 4(\tilde{y} - 0.5)^2)^9 \exp(-20(\tilde{y} - 0.5)^2),$$

$$v(y, 0) = \dot{\epsilon}_0 y, \quad s(y, 0) = 0, \quad \dot{\epsilon}(y, 0) = \dot{\epsilon}_0.$$

Номинальная скорость деформации $\dot{\epsilon}_0 = 750 \text{ с}^{-1}$. Для сравнения результатов с результатами, полученными Чжоу, напряжение, температура и скорость пластической деформации обезразмерены характерными величинами 600 МПа, 162 К, 750 1/с соответственно. Этапы формирования ПАС в данном эксперименте приведены на рис. 3.

Как следует из графиков на рис. 3, образование ПАС сопровождается резким увеличением температуры в месте локализации. К окончанию эксперимента скорость принимает вид ступеньки: нижняя половина пластины зафиксирована, а верхняя сдвигается с постоянной скоростью.

Для тестирования было проведено два эксперимента. В первом эксперименте использовалась фиксированная равномерная сетка с шагом 10 мкм ($N = 695$), второй эксперимент проводится на динамической сетке с числом узлов $N = 301$ (начальный шаг $h \approx 23.1$ мкм). В обоих экспериментах был получен ожидаемый результат (рис. 3). Введем безразмерное время $\epsilon_{\text{ном}} = \dot{\epsilon}_0 t$. Для сравнения результатов с результатами Чжоу построим также графики центральной (значение в центре образца) температуры и скорости деформации от времени. Промежуток времени выбирается $\epsilon_{\text{ном}} \in [0.26, 0.32]$, что соответствует моменту локализации пластической деформации. Графики приведены на рис. 4.

Как следует из графиков, решения на различных сетках имеют существенные отличия. На адаптивной сетке после формирования ПАС величины в центре образца испытывают характерные колебания, скорость деформации достигает пикового значения около $6 \times 10^3 \dot{\epsilon}_0$, для фиксированной сетки зависимости более гладкие. Результаты, полученные на адаптивной сетке, полностью совпадают с результатами, полученными Уолтером и Чжоу, в частности, совпадают время образования ПАС, асимптотики величин, амплитуды и периоды затухающих колебаний. Для получения точного решения (с колебаниями) на

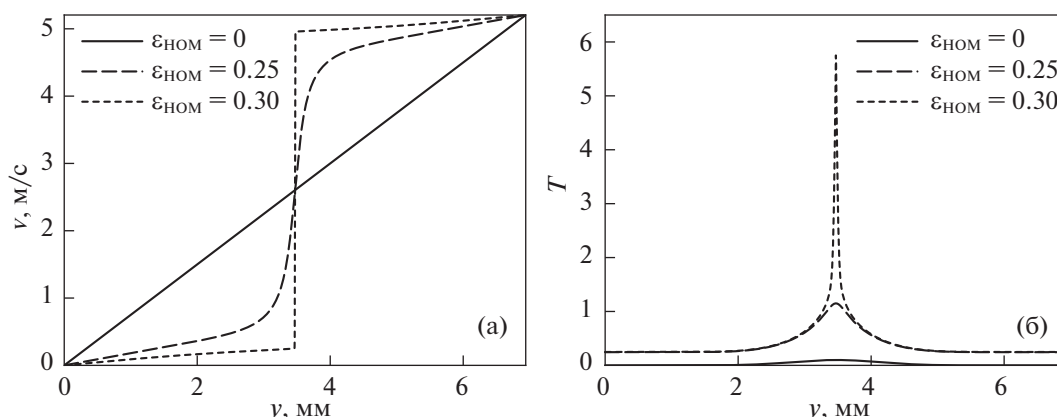


Рис. 3. Этапы формирования ПАС в эксперименте Чжоу. Распределение скорости (а) и температуры (б) в пластине в моменты времени $\epsilon_{\text{HOM}} = 0.0, 0.25, 0.3$.

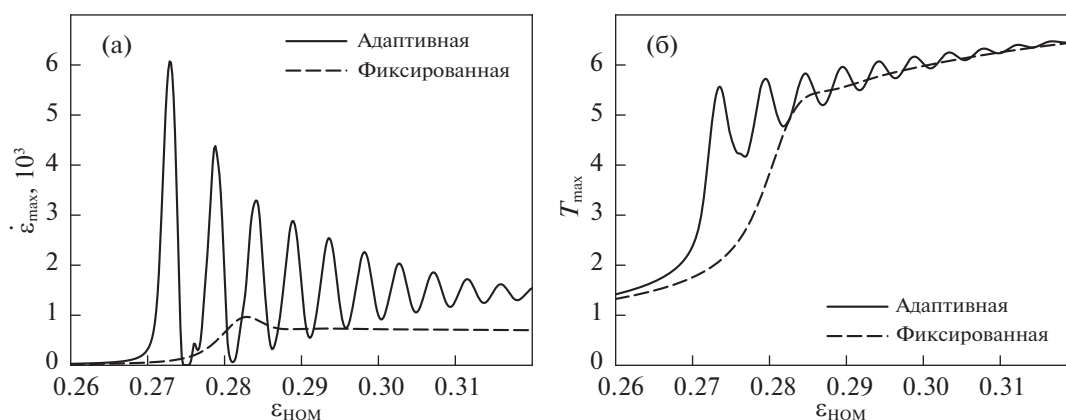


Рис. 4. Максимум температуры (а) и скорости пластической деформации (б) в зависимости от времени на различных сетках.

фиксированной сетке, необходимо использовать равномерную сетку с разрешением $h = 1$ мкм, что увеличивает продолжительность расчетов в сотню раз. Использование же динамической адаптации позволило сократить число расчетных ячеек до 300 с сохранением точности результатов.

Рассмотрим более подробно поведение узлов сетки в эксперименте с динамической адаптацией. Движение узлов сетки в ходе эксперимента представлено на рис. 5.

Сближение узлов до минимального расстояния в 1 мкм приходится на момент ϵ_{HOM} около 0.27, то есть на начало формирования ПАС. Поскольку узлы смещаются пропорционально градиенту $\dot{\epsilon}$, то после $\epsilon_{\text{HOM}} = 0.27$ можно увидеть колебания узлов, которые повторяют колебания параметров в центре пластины.

6. МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ МНОЖЕСТВЕННЫХ ПАС

Прошлый эксперимент показал отличные результаты. Однако, поведение ПАС в эксперименте Чжоу слишком простое, сконструируем эксперимент с более сложным поведением. Возьмем медный образец с толщиной $H = 4$ мм. В точках с координатами 1, 2 и 3 мм расположим четыре температурных пика с величинами около 100, 50 и 75°C соответственно. В дальнейшем будем их называть просто первый (левый), второй (центральный) и третий (правый).

$$T(y, 0) = 100(e^{-r(\bar{y}-0.25)^2} + 0.5e^{-r(\bar{y}-0.5)^2} + 0.75e^{-r(\bar{y}-0.75)^2}). \quad (6.1)$$

Начальные возмущения деформаций и напряжения отсутствуют.

Базовый расчет проведем на равномерной сетке с $N = 4001$ ($h = 1$ мкм). Этапы формирования ПАС приведены на рис. 6.

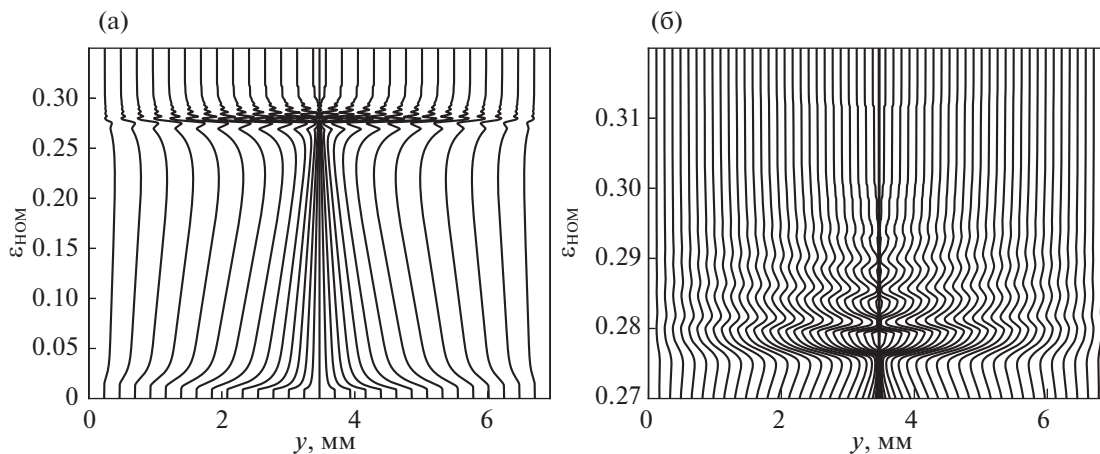


Рис. 5. Траектории узлов в эксперименте (изображена 1/10 часть всех узлов).

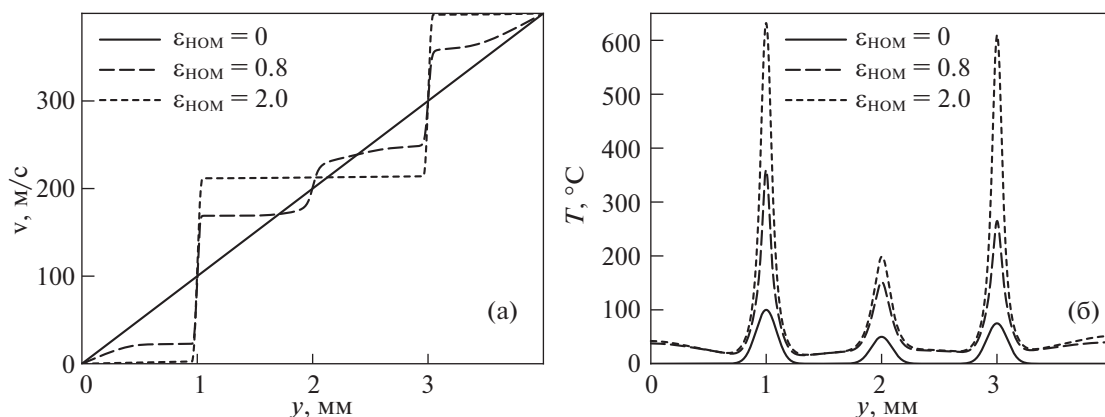


Рис. 6. Формирование ПАС в эксперименте (фиксированная сетка с $h = 1$ мкм).

Как следует из графиков, на месте крайних возмущений образуются ПАС, а в центре нет. Хотя температура в центре возрастает в четыре раза от начальной, а скорость в некоторый момент испытывает разрыв, после момента $\epsilon_{\text{НОМ}} \approx 1.2$ скорость пластической деформации в центре снижается до нуля, температура уменьшается, а разрыв скорости в центре пластины исчезает. Таким образом, при идеальной адаптации узлы должны сгуститься к центру пластины в начале эксперимента, а после $\epsilon_{\text{НОМ}} \approx 1.5$ распределиться равномерно между двумя ПАС.

Теперь проведем два аналогичных эксперимента с меньшим количеством узлов $N = 1001$ ($h_i^0 = 4$ мкм). В одном из экспериментов будем использовать адаптивную сетку, а в другом фиксированную. Стадии формирования ПАС на равномерной сетке приведены на рис. 7.

Сравнение графиков на рис. 6 и 7 показывает, что ход эксперимента существенно меняется при увеличении шага по координате. При шаге в 4 мкм

температура в центре не уменьшается, а увеличивается в 6 раз к концу эксперимента, также до конца эксперимента сохраняется разрыв в центре на графике скорости.

Однако, для эксперимента на адаптивной сетке поведение точно такое же, как и в базовом эксперименте. Визуально графики сложно отличить от рис. 6. Поэтому они здесь не приводятся.

На рис. 8 представлены траектории движения узлов в эксперименте. Графики хорошо демонстрируют ожидаемое поведение: узлы сгущаются в центре к середине эксперимента, а после распределяются равномерно между двумя крайними ПАС, количество узлов у крайних пиков сохраняется высоким на протяжении всего эксперимента.

Однако визуальное сходство не гарантирует точности эксперимента, поэтому по аналогии с предыдущей задачей построим зависимость температуры и скорости деформации в пиках от времени. Результаты представлены на рисунках 9 и 10.

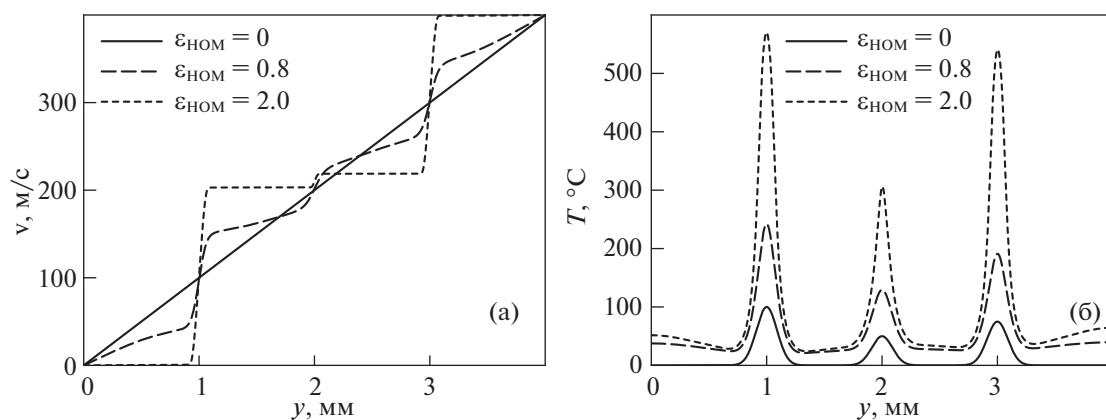


Рис. 7. Формирование ПАС в эксперименте (фиксированная сетка с $h = 4$ мкм).

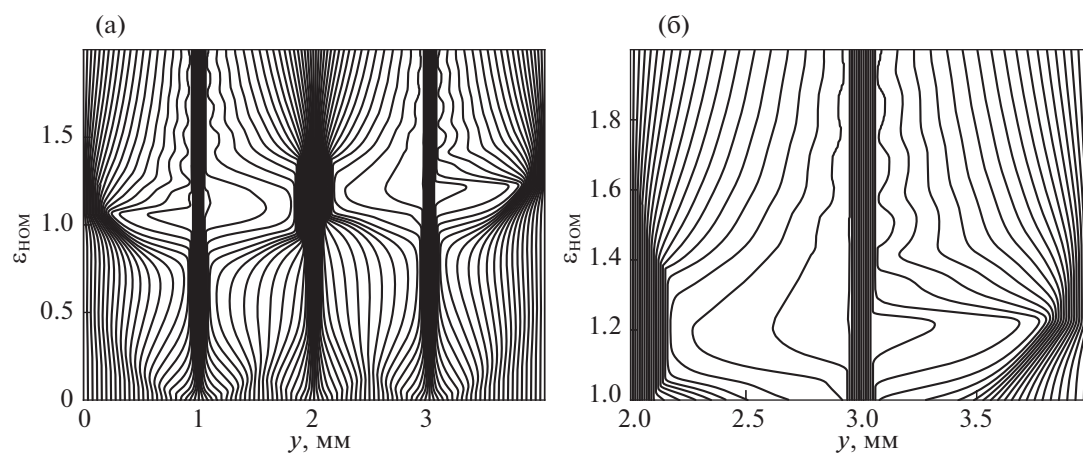


Рис. 8. Траектории узлов сетки в эксперименте с тремя пиками ($N = 1001$).

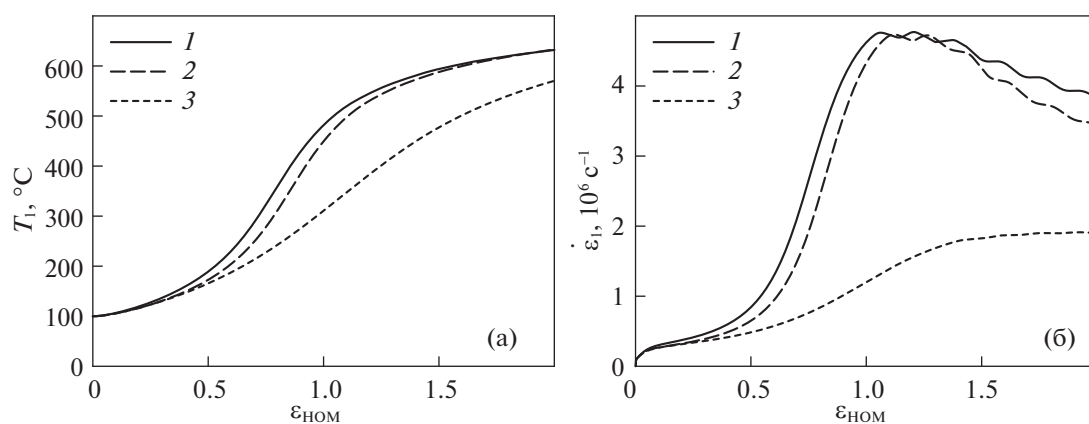


Рис. 9. Температура (а) и скорость пластической деформации (б) в точке $y = 0.25H$ (левый пик) в экспериментах на мелкой (1), адаптивной (2) и грубой (3) сетках.

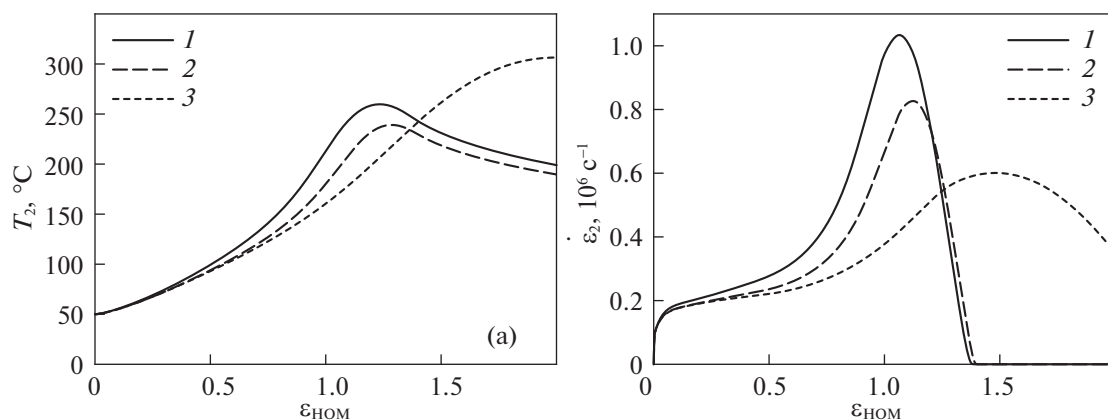


Рис. 10. Температура (а) и скорость пластической деформации (б) в точке $y = 0.5H$ (центральный пик) в экспериментах на мелкой (1), адаптивной (2) и грубой (3) сетках.

На данных графиках T_k и $\dot{\epsilon}_k$ — значения экстремумов в окрестности k -го пика (экстремумы могут незначительно смещаться от первоначальных координат 1, 2 и 3 мм). Сплошной линией обозначен базовый эксперимент ($h = 1$ мкм), штриховой — эксперимент с адаптивной сеткой, пунктирной — эксперимент на равномерной сетке с $h = 4$ мкм. Как следует из графиков, значения параметров в левой ПАС слабо отличаются. Также из рис. 10 следует, что пластические деформации в базовом эксперименте и эксперименте на адаптивной сетке полностью прекращаются в момент времени $\epsilon_{\text{НОМ}} = 1.4$, но такого не происходит в эксперименте на грубой равномерной сетке. Все графики показывают, что эксперимент на грубой сетке существенно отличается от базового, а эксперимент на адаптивной сетке качественно повторяет поведение. Незначительные отличия такие же, как и раньше: для адаптивной сетки начало локализации ПАС позднее, также больше скорость затухания $\dot{\epsilon}$. В данном эксперименте удалось добиться увеличения производительности в четыре раза (за счет уменьшения узлов) при сохранении качественных результатов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых МК-6044.2018.1 и гранта РНФ 18-11-00209.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Krasnikov V.S., Kuksin A.Yu., Mayer A.E., Yanilkin A.V. Plastic deformation under high-rate loading: The multiscale approach. *Physics of the Solid State*. 2010. V. 52. P. 1386.
2. Chen T., Liu J., Jie Y., Zhang D. Numerical simulations of pattern evolution of shear bands during pure shear of geomaterials. *Tectonophysics*. 2015. V. 654. P. 20–29.
3. Wei Z.G., Batra R.C. Dynamic buckling of thin thermoviscoplastic cylindrical shell under radial impulsive loading. *Thin-Walled Structures*. 2006. V. 44. P. 1109–1117.
4. Rittel D. Adiabatic shear failure of a syntactic polymeric foam. *Materials Letter*. 2005. V. 59. P. 1845–1848.
5. Nesterenko V.F., Meyers M.A., Wright T.W. Self-organization in the initiation of adiabatic shear bands. *Acta Materialia*. 1998. V. 46. P. 327–340.
6. Kudryashov N.A., Ryabov P.N., Zakharchenko A.S. Self-organization of adiabatic shear bands in OFHC copper and HY-100 steel. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2015. 76. P. 180–192.
7. Batra R.C., Ko K.-I. An adaptive mesh refinement technique for the analysis of shear bands in plane strain compression of a thermoviscoplastic solid. *Computational Mechanics*. 1992. V. 10. P. 369–379.
8. Courant R., Isaacson E., Rees M. On the Solution of Nonlinear Hyperbolic Differential Equations by Finite Differences. *Comm. Pure Appl. Math.* 1952. V. 5. P. 243–255.
9. Walter J.W. Numerical experiments on adiabatic shear band formation in one dimension. *International Journal of Plasticity*. 1992. V. 8. P. 657–693.
10. Zhou F., Wright T.W., Ramesh K.T. A numerical methodology for investigating the formation of adiabatic shear bands. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2006. V. 54. P. 904–926.

Application of the Adaptive Mesh Refinement Technique to Study the Plastic Flow Localization Process

R. V. Muratov^a, N. A. Kudryashov^{a, #}, and P. N. Ryabov^a

^a National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[#]e-mail: kudryashov@mephi.ru

Received May 13, 2019; revised May 29, 2019; accepted June 6, 2019

Abstract—The process of plastic flow localization in nonpolar elastic–plastic materials subjected to fast shear deformations has been considered. The oxygen free copper and low carbon steel are materials under study. A mathematical model of the processes of plastic flow localization in these materials has been formulated taking into account thermal softening effects. The processes of plastic flow localization are initiated through the uneven initial heating of material. A numerical algorithm based on the finite-difference method has been proposed to perform the numerical simulation of the processed under consideration. In order to optimize the operation of the proposed algorithm, an adaptive mesh refinement technique has been developed. This technique makes it possible to increase the grid resolution in regions of plastic flow localization during the calculation, keeping the accuracy of a numerical simulation on a smaller grid. The algorithm is tested on the problem suggested by other authors and is applied to numerical simulation of multiply ASB formation. The algorithm has demonstrated high performance and accuracy for both problems.

Keywords: plastic deformation, shear band, numerical simulation, adaptive mesh refinement

DOI: 10.1134/S2304487X19040072

REFERENCES

1. Krasnikov, V.S., Kuksin, A.Yu., Mayer, A.E., Yanilkin, A.V. Plastic deformation under high-rate loading: The multiscale approach. *Physics of the Solid State*, 2010, vol. 52, p. 1386.
2. Chen T., Liu J., Jie Y., Zhang D. Numerical simulations of pattern evolution of shear bands during pure shear of geomaterials. *Tectonophysics*, 2015, vol. 654, pp. 20–29.
3. Wei Z.G., Batra R.C. Dynamic buckling of thin thermoviscoplastic cylindrical shell under radial impulsive loading. *Thin-Walled Structures*, 2006, vol. 44, pp. 1109–1117.
4. Rittel D. Adiabatic shear failure of a syntactic polymeric foam. *Materials Letter*, 2005, vol. 59, pp. 1845–1848.
5. Nesterenko V.F., Meyers M.A., Wright T.W. Self-organization in the initiation of adiabatic shear bands. *Acta Materialia*, 1998, vol. 46, pp. 327–340.
6. Kudryashov N.A., Ryabov P.N., Zakharchenko A.S. Self-organization of adiabatic shear bands in OFHC copper and HY-100 steel. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, vol. 76, pp. 180–192.
7. Batra R.C., Ko K.-I. An adaptive mesh refinement technique for the analysis of shear bands in plane strain compression of a thermoviscoplastic solid. *Computational Mechanics*, 1992, vol. 10, pp. 369–379.
8. Courant R., Isaacson E., Rees M. On the Solution of Nonlinear Hyperbolic Differential Equations by Finite Differences. *Comm. Pure Appl. Math.*, 1952, vol. 5, pp. 243–255.
9. Walter J.W. Numerical experiments on adiabatic shear band formation in one dimension. *International Journal of Plasticity*, 1992, vol. 8, pp. 657–693.
10. Zhou F., Wright T.W., Ramesh K.T. A numerical methodology for investigating the formation of adiabatic shear bands. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2006, vol. 54, pp. 904–926.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИСЧЕРПАНИЯ НЕВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ТРАДИЦИОННЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ РЕСУРСОВ

© 2019 г. В. В. Харитонов^{а,*}, Ю. А. Ульянин^б, Д. Е. Слива^а

^а Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

^б АО “Техснабэкспорт”, Москва, 115184, Россия

*e-mail: VVKharitonov@mephi.ru

Поступила в редакцию 04.04.2019 г.

После доработки 25.04.2019 г.

Принята к публикации 26.04.2019 г.

Предложена новая математическая модель для прогнозирования динамики истощения невозобновляемых (ископаемых) ресурсов (углеводородов, урана, других металлов и т.п.). В предлагаемой модели сохранены преимущества и устранены недостатки предыдущих моделей разных авторов. Исходными (известными) параметрами модели являются: разведанный остаточный объем ископаемого ресурса (извлекаемого традиционными методами) M , годовой объем G_0 и темп роста добычи ресурса k_0 в начальный период прогнозирования. Получены аналитические выражения для расчета динамики годовой добычи и кумулятивного извлечения ресурсов Q , а также пика годового объема добычи G_M и периода времени до его наступления T_M в зависимости от исходных параметров. Показано, что с ростом извлеченной массы ресурса Q темп изменения скорости добычи $k(t) = (dG/dt)/G$ линейно уменьшается от начального положительного значения k_0 , когда $Q = 0$, до конечного (отрицательного) значения $k_\infty = -k_0(1 + 2/\theta)$, когда $Q = M$. Точка пересечения прямой $k(Q)$ с осью Q , где $k = 0$, соответствует пику добычи ресурса. Модель позволяет прогнозировать динамику себестоимости добычи ресурсов. Приведены примеры использования предложенной модели прогнозирования динамики добычи и истощения для таких традиционных энергетических ресурсов как углеводороды и природный уран. Показано, что для оптимистического сценария развития мировой ядерной энергетики с темпом около $k_0 = 3\%$ /год пик добычи урана $G_M \approx 110$ кт/год ожидается в середине века при ресурсах $M = 8$ Мт с оцененной себестоимостью добычи до 260 долл./кгU. Причем, к 2035 году (горизонт прогнозирования Всемирной ядерной ассоциации) может образоваться дефицит добычи природного урана более 25 кт/год (почти половина нынешней годовой добычи). Поскольку в первую очередь будут истощаться месторождения с минимальной себестоимостью добычи (<40 \$/кгU), то для обеспечения заданного темпа развития ядерной энергетики необходимо подключать месторождения со все большей себестоимостью добычи, что приведет к росту себестоимости добычи и, вероятно, рыночных котировок на уран. Приведены результаты расчета динамики добычи урана в Казахстане, Канаде, Австралии, Намибии и Нигере — крупнейших поставщиках урана на мировой рынок. Наиболее быстро будут истощаться ресурсы Казахстана и Канады. Показано также, что ресурсы традиционных источников энергии будут в значительной мере истощены до конца текущего века при существующих технологических и экономических возможностях добычи. Причем, пики добычи традиционных энергетических источников ожидаются до середины века.

Ключевые слова: математическая модель, динамика истощения ресурса, невозобновляемые энергетические ресурсы, разведанный объем ресурса, природный уран, углеводороды, годовой объем добычи, темп роста добычи, себестоимость добычи

DOI: 10.1134/S2304487X19030076

1. ВВЕДЕНИЕ

Впервые математическая модель динамики истощения ограниченного ресурса предложена американским геофизиком Кингом Хаббертом (King Hubbert, 1903–1989), который в 1956 г. теоретически предсказал пик добычи нефти (“peak

oil” или “midpoint”) в США в начале 70-х годов XX-го века, а в мире — около 2000 г. [1–3]. Математически изящная модель динамики истощения ограниченного ресурса, предложенная К. Хаббертом, показала, что для любой заданной географической области — для отдельного место-

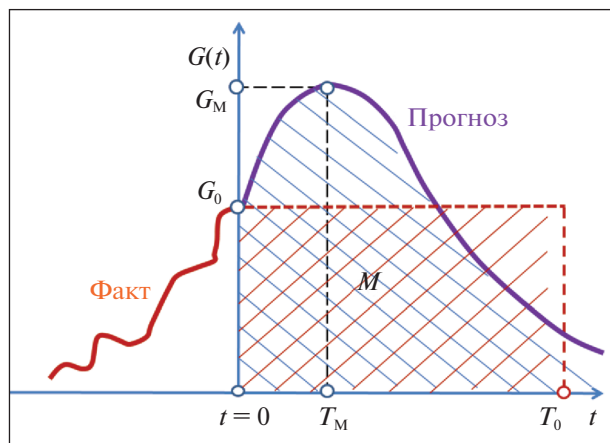


Рис. 1. Схема прогнозирования динамики добычи невозобновляемого ресурса с известным начальным уровнем добычи G_0 и оставшимся в недрах количеством ресурса M . $T_0 = M/G_0$ — период полного истощения при постоянной ежегодной добыче G_0 (“R/P-ratio”).

рождения, страны или для всей планеты, график скорости добычи невозобновляемого ресурса (нефти, газа, урана) по времени должен иметь колоколообразную форму. Добыча сначала быстро нарастает, затем достигает пика (максимума) добычи и после этого уменьшается вплоть до окончательного истощения ресурса или рентабельности продаж. В 1972 году добыча нефти в США действительно достигла пика. Прогноз К. Хабберта в общих чертах оправдался, после чего его работа получила широкое признание и инициировала непрекращающиеся дискуссии о продолжительности не только “нефтяной эры” [4–7], но и “эры технологических металлов” [8–10] и других невозобновляемых ресурсов, включая уран [11–15]. Главный недостаток, на наш взгляд, модели К. Хабберта, связан с выбором исходных данных из прошлой истории добычи. Так, в его модели темп роста добычи на начальном периоде освоения ресурса, отстоящим от настоящего времени на десятки, а то и сотни лет, определяет характер добычи на всей траектории освоения ископаемого, простирающейся на многие десятилетия в будущее. При этом кривая годовой добычи оказывается симметричной относительно максимальной (пиковой) добычи. Однако данные о начальных годах освоения ресурса отличаются волатильностью и не всегда доступны, что отражается в погрешностях прогнозирования добычи.

В работах МИФИ [12–15] предпринята попытка исправить указанный недостаток модели К. Хабберта путем искусственного введения темпа годовой добычи, линейно убывающего с течением времени прогноза. Данная модель, в меньшей степени привязанная к историческому про-

шлому добычи ресурса, позволила получить ряд интересных результатов. Однако, в этой модели искусственно введенная функция темпа изменения годовой добычи приводит к необоснованно быстрому истощению ресурса после прохождения пика его добычи.

Предлагаемая в настоящей статье математическая модель динамического процесса истощения ископаемых ресурсов является модификацией предложенных ранее моделей, нацеленной на устранение их недостатков и развитие новых возможностей прогнозирования, включая прогнозирование себестоимости добычи урана и других традиционных энергетических ресурсов.

2. НОВАЯ МОДЕЛЬ ИСЧЕРПАНИЯ НЕВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ РЕСУРСОВ

В новой модели используются **три исходных (известных) параметра** в начале периода прогнозирования: разведанный остаточный объем ископаемого ресурса (извлекаемого традиционными методами) M (тонн), годовой объем добычи G_0 (т/год) и заданный темп роста k_0 (1/год) добычи ресурса. Эти три параметра могут относиться к отдельному месторождению, стране или миру в целом. В любом случае историческая динамика годовой добычи $G(t)$ имеет колоколообразную форму (рис. 1): сначала добыча растет, затем достигает пика, после чего сокращается до истощения либо самого ресурса, либо рентабельности добычи. Подробнее математическая модель описана в приложении.

Согласно разработанной модели прогноз динамики годовой добычи $G(t)$ в году ($t > 0$ — от начала прогноза) описывается аналитическим выражением

$$G(t) = G_0 \frac{(2 + \theta)^2 \exp(T)}{(\exp(T) + 1 + \theta)^2}. \quad (1)$$

Здесь обозначено: $\theta = k_0 M/G_0$ — безразмерный комплекс, составленный из трех исходных параметров, в котором $M/G_0 = T_0$ имеет смысл времени истощения ресурса M при постоянной годовой добыче G_0 . В зарубежной литературе величину T_0 , равную отношению ресурса к его годовой добыче (Reserves-to-Production), именуют “R/P-ratio”, зачастую переводимое на русский язык как “период обеспеченности запасами”. Значения T_0 (R/P-ratio) приводятся, например, в ежегодных отчетах компании British Petroleum для различных энергоресурсов и стран [16]. В формуле (1) для краткости записи обозначено безразмерное время

$$T = \left(k_0 + \frac{2}{T_0} \right) t. \quad (2)$$

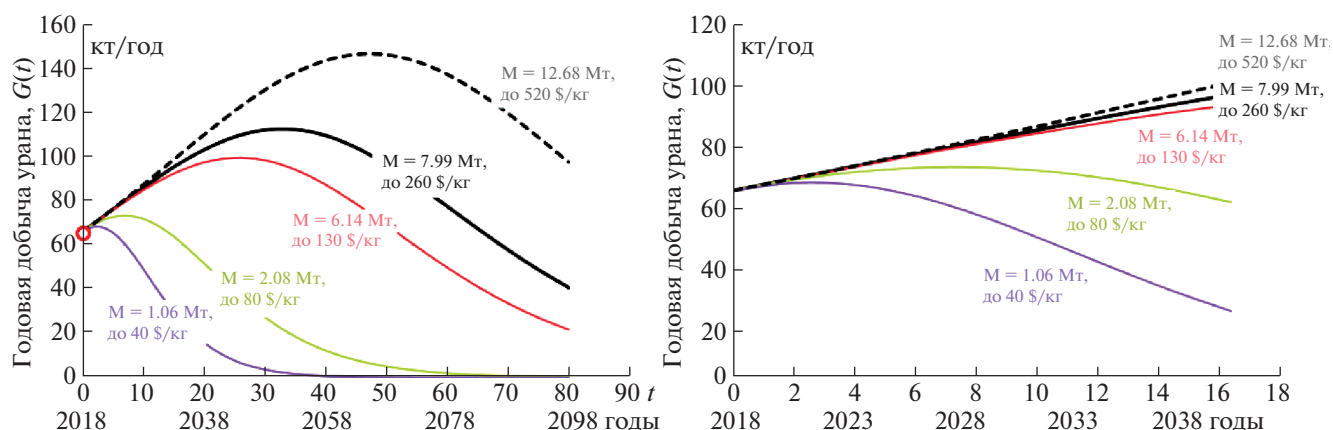


Рис. 4. Динамика истощения ресурсов природного урана в XXI веке (слева) и в ближайшие 15 лет (справа). Расчет по формуле (1) при ресурсах из рис. 3 при начальном уровне добычи $G_0 = 66$ кт/год (2017 г.) и темпе роста $k_0 = 3\%$ /год (близко к высоким сценариям WNA и МАГАТЭ).

суммарных ресурсов (всех четырех ценовых категорий), составляющих ≈ 8 Мт. В ценовом диапазоне 40–80 \$/кгU ресурсов урана также мало (1023 тU). Половина всех ресурсов (4.06 Мт) принадлежит ценовой категории в диапазоне 80–130 \$/кгU. Еще 4.69 Мт не имеют стоимостной оценки (дороже 260 \$/кг). Поэтому в наших прогнозах мы будем ориентироваться на экономически оцененные ресурсы объемом 8 Мт, а в качестве верхней оценки традиционных ресурсов принимаем 12.68 Мт.

Динамика истощения урана. Используя вышеприведенные данные, можно с помощью нашей модели оценить динамику истощения ресурсов урана с разной себестоимостью. По данным Всемирной ядерной ассоциации (WNA – World Nuclear Association) [21] потребность мировой ядерной энергетики в природном уране составила $G_0 = 66$ кт/год в 2017 г. Рассмотрим оптимистический сценарий WNA развития ядерной энергетики с темпом $k_0 = 3\%$ /год (0.03 год^{-1}). Результаты расчета динамики годовой добычи урана по формуле (1) представлены на рис. 4 и 5. Как следует из рис. 4, пик добычи урана $G_M \approx 113$ кт/год ожидается в середине века ($\theta = 3.63$ при ресурсах $M = 8$ Мт). Если будут вовлечены в добычу ресурсы урана $M = 12.68$ Мт ($\theta = 5.76$) по более высокой цене (более 260 долл./кгU), то пик добычи сместится к началу 60-х годов и достигает 147 кт/год.

Как следует из рис. 4 и 5, сначала истощаются ресурсы самого дешевого урана ($C < 40$ \$/кгU = 15.4 \$/фунт U_3O_8). Для обеспечения сценария развития ядерной энергетики с заданным темпом 3%/год необходимо добывать одновременно и более дорогой по себестоимости уран (в ценовом диапазоне 40–80 \$/год), добыча которого будет нарастать по мере истощения дешевого урана. Поскольку урана в этой ценовой категории чуть

меньше, чем самого дешевого, его ресурсы быстро будут истощаться, что требует одновременной добычи и более дорого урана (в ценовом диапазоне 80–130 \$/год), ресурсы которого значительно больше. Ресурсы наиболее дорого по себестоимости урана (1846 кт) более чем вдвое меньше ресурсов урана предыдущей ценовой категории, поэтому вклад урана с себестоимостью 130–260 \$/кгU (50–100 \$/фунт U_3O_8) в обеспечение сценария развития ядерной энергетики сравнительно не велик. Как показано на рис. 5 (справа), в ближайшие 5 лет потребности мировой ядерной энергетики в природном уране будут удовлетворять, в основном, месторождения с минимальной себестоимостью (около 40 \$/кгU), а к 2032 году на их долю придется менее 30%.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что инерционные сценарии развития ядерной энергетики на тепловых реакторах не позволяют увеличить долю АЭС в мировом производстве электроэнергии в долгосрочной перспективе из-за истощения традиционных ресурсов природного урана.

Средневзвешенная себестоимость добычи урана. Зная динамику добычи урана по разным себестоимостям $G_{40}(t)$, $G_{80}(t)$, ..., $G_{260}(t)$, можно оценить средневзвешенную себестоимость $C(t)$ добычи урана (долл./кг) по формуле

$$C_F(t) = 40 \frac{G_{40}(t)}{G_{260}(t)} + 80 \frac{G_{80}(t) - G_{40}(t)}{G_{260}(t)} + 130 \frac{G_{130}(t) - G_{80}(t)}{G_{260}(t)} + 260 \frac{G_{260}(t) - G_{130}(t)}{G_{260}(t)}. \quad (5)$$

Если бы данные о себестоимости добычи и ресурсах урана содержали не 4, а большее количество ценовых групп, то средневзвешенную себестоимость добычи урана можно было бы оценить

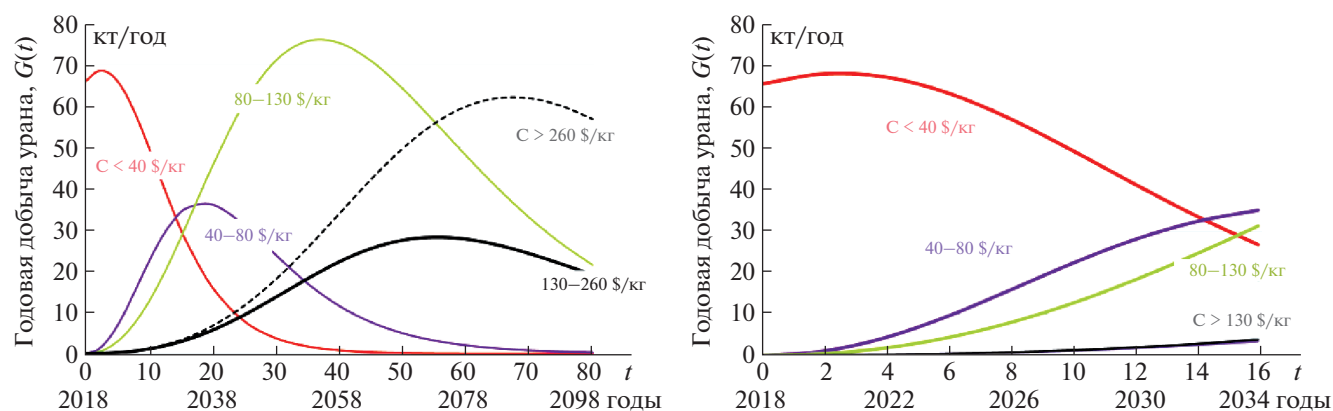


Рис. 5. Прогноз истощения ресурсов природного урана в XXI веке (слева) и в ближайшие 15 лет (справа) в разных диапазонах себестоимости добычи в условиях обеспечения начального темпа развития ядерной энергетики $k_0 = 3\%/год$. Расчет по формуле (1) при ресурсах из рис. 3 и при начальном уровне добычи $G_0 = 66$ кт/год (2017 г.). Кривые на этих рисунках определяются разностью между соседними кривыми из рис. 4.

менее грубо. Однако более подробных данных нет. Представленные на рис. 6 результаты расчета себестоимости добычи урана по формуле (5) показывают, что даже при стагнационном сценарии развития мировой ядерной энергетики ($k_0 \approx 0$) себестоимость добычи урана будет расти. Чем выше темпы развития ядерной энергетики, тем быстрее истощаются дешевые месторождения урана и тем выше темпы роста средневзвешенной себестоимости добычи. При прогнозируемых темпах развития ядерной энергетики $k_0 \approx 3\%/год$ (“высокий” сценарий) через 10–12 лет (к началу 30-х годов) себестоимость добычи может удвоиться. Поскольку рыночные цены (котировки на спот-рынке) ориентируются на наиболее дорогой уран, поставляемый на рынок, то в ближайшие 5 лет рыночные котировки на природный уран могут в 2–3 раза превышать себестоимость наиболее рентабельных месторождений. В связи с ростом себестоимости добычи урана можно ожидать увеличение стоимости обогащенного урана и топливной составляющей стоимости электроэнергии АЭС [14, 22, 23].

Прогноз добычи урана в некоторых странах. Ниже приведены данные из различных источников о ресурсах урана в странах, обладающих объемом извлекаемых ресурсов более 200 ктU (табл. 1). Согласно данным табл. 1 наибольшее количество дешевых месторождений урана (<40 \$/кгU) расположено в Казахстане (481 кт) и Канаде (263 кт), что составляет 70% всех ресурсов этой ценовой категории. Четверть всех извлекаемых ресурсов урана сосредоточена в Австралии (более 2 Мт). Почти 40% всей мировой добычи урана в 2017 г. обеспечил Казахстан. Казахстан располагает 31% всех известных мировых урановых ресурсов в низкой ценовой категории до 80 долларов США за 1 кг урана.

По ряду прогнозов развития ядерной энергетики до 2035–50 гг. темп роста производства электроэнергии на АЭС может составлять 1.5–2.0%/год. Полагая, что такими же начальными темпами должна расти добыча природного урана в странах-поставщиках урана на мировой рынок, можно оценить динамику истощения ресурсов в этих странах. Как следует из рис. 7, где приведены расчеты динамики добычи урана в Казахстане, Канаде, Австралии, Намибии и Нигере – крупнейших поставщиков урана, наиболее быстро будут истощаться ресурсы Казахстана и Канады. Пик добычи урана в Казахстане при заданных

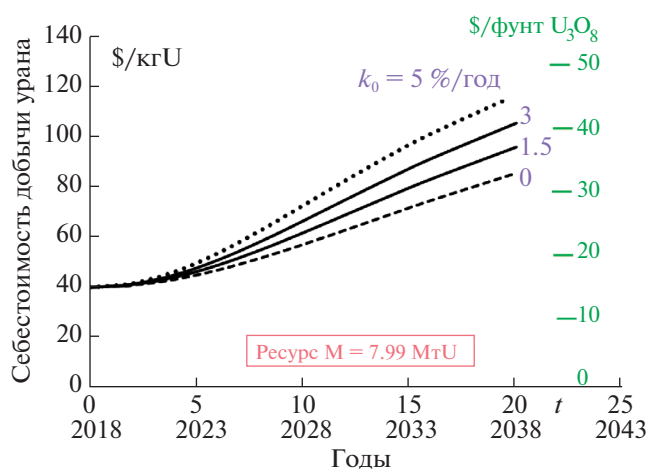


Рис. 6. Динамика роста средневзвешенной себестоимости добычи урана для четырех сценариев развития мировой ядерной энергетики до 2040 г. в условиях истощения ресурсов урана ($M \approx 8$ Мт) при максимальной себестоимости до 260 долл./кгU. Расчет по формуле (5) для различных начальных темпов развития ядерной энергетики и потребности в уране ($k_0 = 0–5\%/год$).

Таблица 1. Распределение извлекаемых ресурсов урана по странам и себестоимости добычи (в килотоннах с округлением до 4-х знаков)

Страна	Извлекаемые ресурсы урана в ценовой категории (Identified resources, recoverable), ктU				Добыча урана в 2017 г., G_0 , тU/год	Период обеспе- ченности запасами, M/G_0 , лет
	<40 \$/кгU	<80 \$/кгU	<130 \$/кгU	<260 \$/кгU		
Австралия	—	—	1818	2055	5882	349
Бразилия	138	229	277	277	0	—
Канада	263	310	514	846	13116	64
Китай	101	222	290	290	1885	154
Казахстан	481	640	842	905	23321	39
Намибия	0	0	442	542	4224	128
Нигер	0	—	280	426	3449	123
Россия	0	40	486	657	2917	225
Ю. Африка	0	230	322	449	308	1458
Украина	0	58	114	219	550	398
Другие 42 страны	75	351	757	1323	3810	347
Всего в мире:	1058	2080	6142	7989	59462	134

Источник: Table 1.2a из [17] “Uranium 2018: Resources, Production and Demand”. NEA No. 7413. NEA, OECD. 2018, 462 p.; WNA-2019 [21]

условиях ожидается до 2027 года и составит чуть более 25 кт/год. В Канаде пик добычи около 15.5 ктU/год ожидается до 2033 г. В Намибии и Нигере, если не будет интенсифицирована добыча (выше темпов 2%/год), пик добычи наступит в начале 50-х годов и не превысит $\approx 5\text{--}6$ ктU/год.

Из рассмотренных стран только Австралия может сохранить возрастающий тренд добычи урана до конца века.

4. ДИНАМИКА ИСЧЕРПАНИЯ ТРАДИЦИОННЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

На рис. 8 приведены кривые истощения традиционных ресурсов угля, нефти и газа, рассчитанные по формуле (1) в энергетических единицах, характеризующих количество тепловой энергии, выделяемой при полном сгорании добытых углеводородов. Здесь не учитывается взаимовлияние добычи различных энергоресурсов. Данные об извлекаемых традиционных ресурсах углеводородов, годовой добыче и темпах роста добычи, необходимые для прогнозирования, взяты из материалов [16]. Результаты расчетов близки к полученным в [24].

Как видно, ресурсы традиционных источников энергии будут в значительной мере истощены до конца текущего века при существующих технологических и экономических возможностях добычи. Причем пики добычи традиционных энергетических источников ожидаются до середины века. В настоящее время вклад ядерной энергии в топливо-обеспечение человечества едва превышает 5% (по первичной энергии) и 10.5% по электроэнергии. Мировое потребление первичной энергии увеличивалось за последнее десятилетие с ежегодным приростом около 1.7%/год. Если такие темпы роста потребления

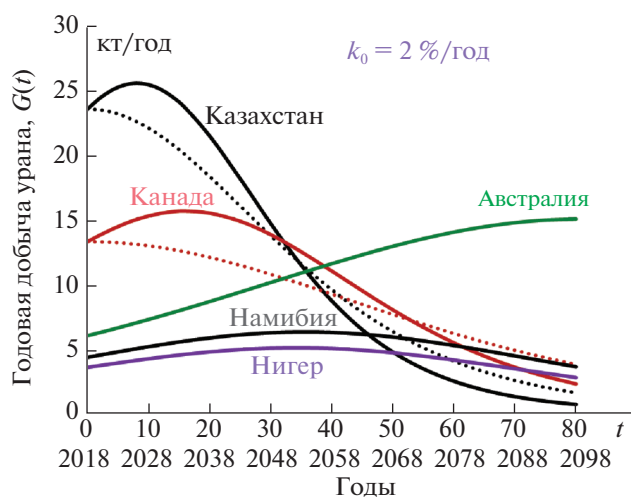


Рис. 7. Прогноз динамики добычи урана в странах — крупнейших его поставщиках на мировой рынок при начальном темпе добычи $k_0 = 2\%$ /год (умеренный, ожидаемый сценарий развития ядерной энергетики мира). Расчет по формуле (1) при исходных данных из табл. 1. Пунктирными линиями показана динамика добычи урана в Казахстане и Канаде при стагнации ядерной энергетики ($k_0 = 0$).

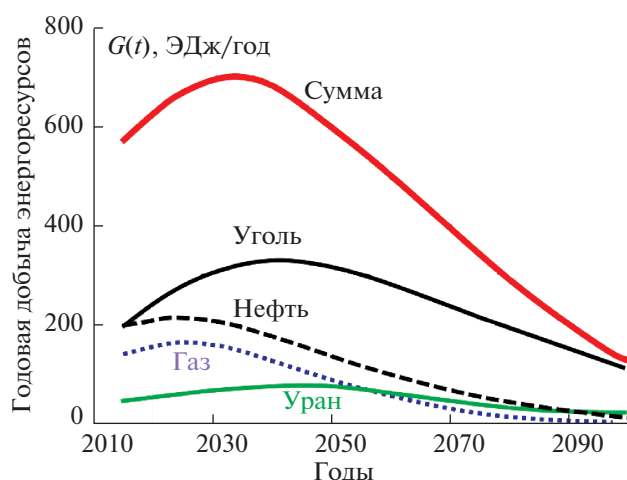


Рис. 8. Прогноз динамики годовой добычи традиционных энергоресурсов (угля, нефти, газа и урана) в мире в энергетических единицах (ЭДж/год = 10^{18} Дж/год; 1 т н.э. = 41.868 ГДж).

ископаемого топлива сохранятся в ближайшие 50 лет, то к 2070 г. годовое энергопотребление увеличится в 2.3 раза по сравнению с 2018 г. Эти потребности будут существенно превышать добычу традиционных энергоресурсов, начиная с 30-х годов текущего века, то есть будет формироваться всевозрастающий дефицит ископаемого топлива.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана новая аналитическая модель динамики истощения невозобновляемых ресурсов. Данная модель использует три исходных параметра, известных по данным накануне прогноза: уровень добычи в минувшем году G_0 (т/год), оставшаяся в Земле масса извлекаемого ресурса M (т) и начальный темп роста добычи k_0 . Эти три величины образуют один безразмерный параметр $\theta = k_0 M / G_0$, существенно влияющий на прогнозируемую динамику добычи. Ограничиваясь тремя исходными характеристиками состояния добычи, мы ограничили функциональную зависимость годовой добычи G от массы извлеченного ресурса Q тремя членами разложения в ряд Маклорена (П.6). Других искусственных предположений в модели нет.

Получены выражения для прогнозирования и мониторинга динамики добычи ископаемых ресурсов, определения максимума (пика) годовой добычи и периода времени до наступления пика добычи. Модель позволяет прогнозировать средневзвешенную себестоимость добычи ресурсов.

Приведены результаты расчета по разработанной модели динамики истощения углеводородов (угля, нефти и газа) и природного урана в ряде

стран. Оценена динамика роста себестоимости добычи урана.

ПРИЛОЖЕНИЕ

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИСЧЕРПАНИЯ НЕВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ РЕСУРСОВ

Обозначим массу ежегодной добычи невозобновляемого ресурса в году t через $G(t)$ (т/год) (рис. 1). Поскольку нас интересует будущее (прогноз) добычи, то целесообразно выбрать за начало отсчета времени $t = 0$ настоящий момент, с которого необходимо сделать прогноз. Прошлое (история добычи) соответствует отрицательным значениям $t < 0$, а будущее (прогнозный период) — положительным $t > 0$. Количество добытого ресурса (cumulative production или нарастающим итогом) к некоторому моменту времени t обозначим через $Q(t)$, а полное извлекаемое количество данного ресурса (остающегося в недрах на начало прогноза) обозначим через M :

$$Q(t) = \int_{t=0}^t G(t) dt; \quad M = \int_{t=0}^{\infty} G(t) dt. \quad (\text{П.1})$$

В течение полного цикла добычи от начала прогноза до полного истощения ресурса величина $Q(t)$ монотонно возрастает от 0 до M , а скорость добычи $G(t) = dQ/dt$ (годовая добыча) изменяется от начального значения $G_0 \equiv G(t=0)$ до $G=0$ в конце истощения ресурса. Если длительность полного цикла добычи ресурса достаточно велика, то в целях математического упрощения модели (уменьшения числа малозначимых параметров) можно принять момент полного истощения ресурса далеко в будущем $t = +\infty$.

Таким образом, для начального и конечного состояний прогнозного периода имеем следующие математические условия:

$$\frac{dQ}{dt} = G_0, \quad Q = 0 \text{ при } t = 0; \quad (\text{П.2})$$

$$\frac{dQ}{dt} = 0, \quad Q = M \text{ при } t = +\infty. \quad (\text{П.3})$$

В начале прогнозного периода обычно известен темп изменения добычи k_0 (1/год или %/год), который либо задается стратегией развития добычи, либо отражает существующие тенденции изменения потребности в рассматриваемом ископаемом и сделанные ранее инвестиции в добычу. По определению начальный годовой темп добычи связан со скоростью изменения добычи выражением

$$\frac{1}{G} \frac{dG}{dt} = k(t); \quad k(t=0) = k_0. \quad (\text{П.4})$$

Следуя далее логике К. Хаббарта и учитывая, что волатильность функции $Q(t)$ всегда меньше волатильности подинтегральной функции $G(t)$, выразим скорость добычи $G(t) = dQ/dt$ как функцию от количества

добытого к моменту времени t ресурса $Q(t)$, а не от времени, как это сделано в работах [12–15]:

$$\frac{dQ}{dt} = f(Q). \quad (\text{П.5})$$

Интегрирование этого дифференциального уравнения даст зависимости от времени величин $Q(t)$ и $G(t) = dQ/dt$. Надеясь функцию $f(Q)$ свойствами непрерывности, можно представить ее в виде полинома (или разложения в степенной ряд Маклорена):

$$dQ/dt = c_0 + c_1 Q + c_2 Q^2 + \dots, \quad (\text{П.6})$$

где $c_0, c_1, c_2, \dots$ — коэффициенты, не зависящие от Q . Если ограничиться первыми тремя членами ряда (П.6) и воспользоваться тремя граничными условиями (П.2)–(П.4), то можно определить коэффициенты этого ряда:

$$c_0 = G_0; \quad c_1 = k_0; \quad c_2 = -\left(\frac{G_0}{M^2} + \frac{k_0}{M}\right). \quad (\text{П.7})$$

Подстановка этих выражений в дифференциальное уравнение (П.6) и приведение его к безразмерному виду с помощью переменных $q = Q/M$ и $T = (1 + 2/\theta)k_0 t$, где $\theta = k_0 M/G_0$, дает каноническую форму дифференциального уравнения с разделяющимися переменными:

$$\frac{dq}{c + bq + aq^2} = dT. \quad (\text{П.8})$$

Здесь безразмерные коэффициенты $a = -(1 + \theta)/(2 + \theta)$, $b = \theta/(2 + \theta)$, $c = 1/(2 + \theta)$. Уравнение (П.8) решается стандартными методами в зависимости от знака дискриминанта Δ квадратичного трехчлена в знаменателе (П.8):

$$\Delta = 4ac - b^2 = -1. \quad (\text{П.9})$$

Поскольку дискриминант отрицателен, то решение уравнения (П.6) в форме (П.8) имеет вид

$$T = \ln \frac{q + 1/(1 + \theta)}{q - 1} \quad (\text{П.10})$$

или $q = \frac{\exp T + 1/(1 + \theta)}{\exp T - 1}.$

Дифференцируя полученную функцию $q(t)$ по времени, находим динамику изменения ежегодной добычи невозобновляемого ресурса в виде следующей функции от безразмерного времени T :

$$\frac{G(t)}{G_0} = \frac{1}{G_0} \frac{dQ}{dt} = \theta \frac{dq}{dT} = (2 + \theta)^2 \frac{\exp(T)}{(\exp(T) + 1 + \theta)^2}. \quad (\text{П.11})$$

Как видно, в начале прогнозного периода, когда $T < 1$ и $\exp(T) < 1 + \theta$, годовая добыча растет почти экспоненциально за счет экспоненты в числителе выражения (П.11). При дальнейшем увеличении T экспонента в знаменателе существенно превышает $(1 + \theta)$, а годовая добыча практически экспоненциально уменьшается как $\exp(-T)$.

Дифференцируя $G(t)$ в (П.11) по времени и приравняв производную нулю, находим параметры пика добычи G_M и T_M (3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hubbert M. King* Nuclear Energy and the Fossil Fuels. American Petroleum Institute. Publication No. 95. Shell Development Company. June, 1956. P. 1–40. [Электронный ресурс.] URL: <http://www.hubbart-peak.com/hubbart/1956/1956.pdf>
2. *Hubbert M. King* Energy Resources. A Report to the Committee on Natural Resources; National Academy of Sciences, National Research Council: Washington, DC, USA, 1962. P. 1–141.
3. *Hubbert M. King* Techniques of prediction as applied to the production of oil and gas. US Department of Commerce, NBS Special Publication 631, May 1982. P. 1–141.
4. *Конторович А.Э., Энов М.И., Эдер Л.В.* Долгосрочные и среднесрочные факторы и сценарии развития глобальной энергетической системы в XXI веке. Геология и геофизика. 2014. Т. 55. № 5–6. С. 689–700.
5. *Новикова О.В., Попова М.Н.* Анализ современных представлений о продолжительности “нефтяной эры” и прогноз нефтедобычи в России в первой половине XXI века. Электронный научный журнал “Георесурсы. Геоэнергетика. Геополитика”. 2010. Выпуск 2(2). 12 с.
6. *Bardi U.* Peak oil and The Limits to Growth: two parallel stories. The Oil Drum: Europe, 2008. [Электронный ресурс.] Режим доступа: <http://Europe.theoil-drum.com>
7. *Campbell C.J., Laherrère J.H.* The End of Cheap Oil. Scientific American, March 1998. P. 78–83.
8. *Свердруп Х.* Мир на пике: рассуждения об устойчивом обществе // Газета.ру, 28.12.2011. (Harald Ulrik Sverdrup.) [Электронный ресурс.] Режим доступа: http://gazeta.ru/science/2011/12/28_a_3949529.shtml.
9. Harald Ulrik Sverdrup, Deniz Koca and Kristín Vala Ragnarsdóttir. Peak Metals, Minerals, Energy, Wealth, Food and Population; Urgent Policy Considerations for A Sustainable Society. Journal of Environmental Science and Engineering. B1. 2012. V. 5. P. 499–533.
10. *Санников В.* Тормоза прогресса: технологические металлы // Популярная механика. № 5. С. 60–64. [Электронный ресурс.] Режим доступа: <http://www.porpmech.ru/article/5327-tormoza-progressa/>
11. *Supply of Uranium.* <http://www.world-nuclear.org/information-library/nuclear-fuel-cycle/uranium-resources/supply-of-uranium.aspx>
12. *Харитонов В.В., Кабаев К.В.* Аналитическая модель динамики добычи металлов. Цветные металлы. 2012. № 10. С. 20–24.
13. *Харитонов В.В., Крянев А.В., Курельчук У.Н., Дудин Н.Ю.* Аналитический прогноз динамики добычи урана. Экономические стратегии. 2013. № 3. С. 58–72.
14. *Харитонов В.В.* Динамика развития ядерной энергетики. Экономико-аналитические модели. М.: НИЯУ МИФИ, 2014. 328 с.

15. Харитонов В.В., Кабашев К.В., Маликов Р.Р. Долгосрочные тренды истощения традиционных энергетических ресурсов и перспективы ядерной энергетики: Монография, М.: НИЯУ МИФИ, 2016. 96 с.
16. BP Statistical Review of World Energy. June 2017. [Электронный ресурс.] <http://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy.html>
17. Uranium 2018: Resources, Production and Demand. OECD 2018, NEA No. 7413. Nuclear energy agency, Organisation for economic co-operation and development. 2018, 462 p.
18. World Distribution of Uranium Deposits (UDEPO) 2016 Edition. IAEA-TECDOC-1843. International Atomic Energy Agency. Vienna, 2018. 262 p.
19. Живов В.Л., Бойцов А.В., Шумилин М.В. Уран: геология, добыча, экономика / М.: РИС “ВИМС”, 2012. 304 с.
20. Тарханов А.В. Современные тенденции развития мировой и российской урановой промышленности (2007–2012 гг.). “Минеральное сырье”. Серия геолого-экономическая. № 33. М.: ВИМС, 2012. 53 с.
21. World Nuclear Association. Information-Library. [Электронный ресурс.] <http://www.world-nuclear.org/Information-Library.aspx>
22. Харитонов В.В., Косолапов Н.В., Ульянин Ю.А. Прогнозирование эффективности инвестиций в многоблочные электростанции. Вестник НИЯУ МИФИ, 2018. Т. 7. № 6. С. 545–562.
23. Харитонов В.В., Костерин Н.Н. Критерии окупаемости инвестиций в ядерную энергетику // Известия вузов. Ядерная энергетика. 2017. № 2. С. 157–168.
24. Ульянин Ю.А., Харитонов В.В., Юришина Д.Ю. Перспективы ядерной энергетики в условиях истощения традиционных энергетических ресурсов. Известия вузов. Ядерная энергетика. 2017. № 4. С. 5–16.
25. Ульянин Ю.А., Харитонов В.В., Юришина Д.Ю. Прогнозирование динамики истощения традиционных энергетических ресурсов. Проблемы прогнозирования. 2018. № 2. С. 60–71.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta “MIFI”, 2019, vol. 8, no. 4, pp. 372–381

Analytical Modeling of Exhaustion Dynamics of Non-Renewable Traditional Energy Resources

V. V. Kharitonov^{a, #}, Yu. A. Uljanin^b, and D. E. Sliva^a

^a National Research Nuclear University MPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

^b Joint Stock Company TENEX, Moscow, 119017 Russia

[#]e-mail: VVKharitonov@mephi.ru

Received April 4, 2019; revised April 25, 2019; accepted April 26, 2019

Abstract—A new mathematical model has been proposed for predicting the exhaustion dynamics of non-renewable (fossil) resources (hydrocarbons, uranium, other metals, etc.). This model preserves the advantages of previous models by different authors and eliminates their disadvantages. The initial (known) parameters of the model are the explored residual volume of the fossil resource (extracted by traditional methods) M , the annual volume G_0 and the growth rate of resource extraction k_0 in the initial forecast period. Analytical expressions have been obtained for calculating the dynamics of annual production and cumulative extraction of resources Q , as well as the peak of annual production of G_M and the time before its occurrence T_M , depending on the initial parameters. It has been shown that the rate of change in the extraction rate $k(t) = (dG/dt)/G$ decreases linearly with an increase in the extracted resource mass Q from the initial positive value k_0 at $Q = 0$ to the final (negative) value $k_\infty = -k_0(1 + 2/\theta)$ at $Q = M$. The point of intersection of the line $k(Q)$ with the Q axis, where $k = 0$, corresponds to the peak of resource extraction. The model allows predicting the dynamics of the cost of resource extraction. Examples of the use of the proposed model for forecasting the dynamics of production and exhaustion for such traditional energy resources as hydrocarbons and natural uranium are given. It has been shown that for the optimistic scenario of development of world nuclear power industry with a rate of about $k_0 = 3\%/yr$, the peak of uranium mining $G_M \approx 110$ kt U/ year is expected in the middle of the century with $M = 8$ Mt resources with an estimated production cost of up to \$260/kg. Moreover, a shortage of natural uranium mining by 2035 (the forecast horizon of the World Nuclear Association) can reach more than 25 kt/yr (almost half of the current annual production). Since the fields with the minimum cost of production (<\$40/kg) will be exhausted first of all, to ensure a given rate of development of nuclear power industry, it is necessary to involve the fields with increasing cost of production, which will increase the cost of production and, probably, market quotations for uranium. The results of calculations of the dynamics of uranium mining in Kazakhstan, Canada, Australia, Namibia, and Niger, which are the largest suppliers of uranium to the world market, are presented. The resources of Kazakhstan and Canada will be depleted most quickly. It has also been shown that the resources of traditional energy sources will be largely exhausted before the end of this century under the assumption of the existing technological and economic possibilities of extraction. Moreover, the peaks of extraction of traditional energy sources are expected to the middle of the century.

Keywords: mathematical model, resource exhaustion dynamics, non-renewable energy resources, proven resource volume, natural uranium, hydrocarbons, annual production, production growth rate, cost of production

DOI: 10.1134/S2304487X19030076

REFERENCES

- Hubbert N. King. Nuclear Energy and the Fossil Fuels. American Petroleum Institute. Publication No. 95. Shell Development Company. June, 1956. P. 1–40. Available at: <http://www.hubbertpeak.com/hubbert/1956/1956.pdf>
- Hubbert M. King. Energy Resources. A Report to the Committee on Natural Resources; National Academy of Sciences, National Research Council: Washington, DC, USA. 1962, p. 1–141.
- Hubbert M. King. Techniaues of prediction as applied to the production of oil and gas. US Department of Commerce, NBS Specisl Publication 631, May 1982, p. 1–141.
- Kontorovich A.E., Epov M.I., Eder L.V. Dolgosrochnie i srednesrochnie factory i scenari razvitiya globalnoy energeticheskoy sistemi v XXI veke [Long-term and medium-term factors and scenarios of global energy system in the XXI century]. Geology and Geophysics. 2014. T. 55. № 5–6, p. 689–700 (in Russian).
- Novikova O.V., Popova M.N. Analiz sovremennih predstavleniyo prodolgitelnosti “neftianoy ery” i prognoz neftedobychi v Rossii v pervoy polovine XXI veka [Analysis of modern views on the duration of the “oil era” and the forecast of oil production in Russia in the first half of the 21st century]. Georesources. Geoenergy. Geopolitics. 2010. Vol. 2 (2). 12 p. (in Russian).
- Bardi U. Peak oil and The Limits to Growth: two parallel stories. Nhe Oil Drum: Europe, 2008. Available at: <http://Europe.theoil drum.com>
- Campbell C.J., Laherrere J.H. The End of Cheap Oil. Scientific America, March 1998. P. 78–83.
- Sverdrup H.U. The world is at its peak: talk about sustainable society. Gazeta.ru, 28.12.2011. Avialable at: http://gazeta.ru/science/2011/12/28_a_3949529.shtml. (in Russian).
- Sverdrup H.U., Kocal D., Ragnarsdottir K.V. Peak Metals, Minerals, Energy, Wealth, Food and Population: Urgent Policy Considerations for A Sustainable Society. Journal of Environmental Science and Engineering B 1(5). 2012, p. 499–533.
- Sannikov V. Tormoza progressa: tehnologicheskie metally. [Brakes of progress: technological metals]. Popular mechanics. 2009. № 5. C. 60–64. Avialble at <http://www.popmech.ru/article/5327-tormoza-progressa/>. (In Russian.)
- Supply of Uranium. Available at: <http://www.world-nuclear.org/information-library/nuclear-fuel-cycle/uranium-resources/supply-of-uranium.aspx>
- Kharitonov V.V., Kabashev K.V. Analiticheskaya model’ dinamiki dobichi metallov [Analytical Model of Metals Mining Dynamics]. Tsvetnye Metally. 2012. № 10. p. 20–24 (in Russian).
- Kharitonov V.V., Kryanev A.V., Kurelchuk U.N., Dudin N.Y. Analitichesky prognoz dinamiki dobichi urana [Analytical forecast of uranium mining dynamics]. Economic strategies. 2013. № 3. Pp. 58–72.
- Kharitonov V.V. Dinamika razvitiya yadernoy energetiki. Ekonomiko-analiticheskie modeli [Dynamics of nuclear energy developmktent. Economic models]. Moscow. MEPhI Publ., 2014. 328 p. (in Russian).
- Kharitonov V.V., Kabashev K.V., Malikov R.R. Dolgosrochnye trendy ischerpaniya traditsionnykh energeticheskikh resursov i perspektivy yadernoy energetiki [Long-term Exhausting Trends of Traditional Energy Resources and Nuclear Energy Perspectives]. Monograph. Moscow. MEPhI Publ., 2016. 96 p. (in Russian).
- BP Statistical Review of World Energy. June 2017. Available at: <https://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy.html>
- Uranium 2018: Resources, Production and Demand. OECD 2018, NEA No. 7413. Nuclear energy agency, OECD. 2018. 462 p.
- World Distribution of Uranium Deposits (UDEPO) 2016 Edition. IAEA-TECDOC-1843. International Atomic Energy Agency. Vienna, 2018. 262 p.
- Zhivov V.L., Boytsov A.V., Shumilin M.V. Uran: geology, dobycha, econimica [Uranium: geology, extraction, economics]. Moscow: All-Russian Scientific–Research Institute of Mineral Raw Materials named after N.M. Fedorovskiy, 2012. 304 p. (in Russian).
- Tarkhanov A.V. Sovremennie tendencii razvitiya mirovoy i rossiyskoy uranovoy promishlennosti (2007–2012) [Modern Trends of World and Russian Uranium Industry (2007–2012 y.y.)]. Minerals. Economic–geological seris, № 33. Moscow: All-Russian Scientific–Research Institute of Mineral Raw Materials named after N.M. Fedorovskiy, 2012. 53 p. (in Russian).
- World Nuclear Association. Information–Library. Available at: <http://www.world-nuclear.org/Information-Library.aspx>
- Kharitonov V.V., Kosolapova N.V., Uljanin Y.A. Prognozirovanie effektivnosti investitsiy v mnogoblochnie elektrostancii [Analytical Forecasting of Investment Performance in Multi–Unit Power Plants]. Vestnik Natsional’nogo issleodvatel’skogo yadernogo universiteta “MIFI”, 2018, vol. 7, no. 6, pp. 545–562 (in Russian).
- Kharitonov V.V., Kosterin N.N. Kriterii okupaemosti investitsiy v yadernouyu energetiku [Criteria of return on investment in nuclear energy]. Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika, 2017. № 2. P. 157–168 (in Russian).
- Uljanin Y.A., Kharitonov V.V., Yurshina D.Yu. Perspektivy yadernoy energetiki v usloviyah ischerpaniya traditsionnykh energeticheskikh resursov [Nuclear perspectives at exhausting trends of traditional energy resources]. Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika, 2017. № 4. P. 5–16 (in Russian).
- Uljanin Y.A., Kharitonov V.V., Yurshina D.Yu. Prognozirovanie dinamiki ischerpaniya tradicionnykh energeticheskikh resursov [Forecasting the Dynamics of the Depletion of Conventional Energy Resources]. Forecasting problems. 2018. № 2. P. 60–71 (in Russian).

АППРОКСИМАЦИЯ ИЗМЕРЕНИЙ ИНТЕРНЕТ-ТРАФИКА В МАГИСТРАЛЬНОМ КАНАЛЕ СУММОЙ ЛОГНОРМАЛЬНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

© 2019 г. Валерий В. Иванов^{1,2}, Виктор В. Иванов^{2,3}, А. В. Крянев^{3,2}, И. И. Татаринов⁴

¹ ЗАО “МПОТК “ТЕХНОКОМПЛЕКТ”, Дубна, 141981, Россия

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, 141980, Россия

³ Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

⁴ АО “Лаборатория Касперского”, Москва, 123060, Россия

Поступила в редакцию 20.06.2019 г.

После доработки 20.06.2019 г.

Принята к публикации 25.06.2019 г.

В настоящей работе представлены два численных подхода для аппроксимации измерений сетевого трафика, регистрируемого в магистральном канале, на основе традиционного метода наименьших квадратов (МНК) и коэффициента детерминации R^2 . Для дополнительной оценки точности аппроксимации анализируемых данных логнормальным распределением в настоящей статье анализировалась динамика зависимости максимума интенсивности сетевого трафика от размера окна агрегации. В первом и втором подходах был достигнут высокий уровень соответствия данных наблюдения логнормальному закону. При этом, после включения в аппроксимирующую функцию дополнительных слагаемых, точность аппроксимации заметно возрастает. Показано, что зависимость коэффициента детерминации от размера окна агрегации для анализируемых сетевых пакетов позволяет контролировать точность аппроксимации данных наблюдения логнормальным законом.

Ключевые слова: сетевой трафик, интенсивность, аппроксимация, логнормальное распределение, окно агрегации, коэффициент детерминации

DOI: 10.1134/S2304487X19040047

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] нами было показано, что также, как для локальной сети среднего размера, при агрегировании измерений интернет-трафика в магистральном канале формируются статистические распределения, которые с высокой точностью аппроксимируются логнормальными распределениями [2, 3].

Анализ плотностей вероятности распределения (ПВР) скорости передачи сетевых пакетов, которые в отличие от ПВР скорости передачи данных (ПВР интенсивности сетевого трафика) не зависят от размера сетевых пакетов, показал, что рассматриваемые распределения также с высокой точностью согласуются с логнормальным законом. Важно отметить, что указанные распределения могут использоваться для оценки стабильности работы сетевого оборудования.

Кроме того, нами наблюдалось более сложное поведение сетевого трафика для сетевых пакетов, полученных в дуплексном режиме, и было показано, что рассматриваемое распределение с приемлемой точностью аппроксимируется суммой двух логнормальных распределений [1].

В работе рассмотрены два численных подхода для аппроксимации измерений сетевого трафика, регистрируемого в магистральном канале, на основе: 1) традиционного метода наименьших квадратов (МНК); 2) не столь известного широкой аудитории – коэффициента детерминации R^2 [4, 5], который в общем случае можно рассматривать как универсальную меру зависимости одной случайной величины от множества других.

Для дополнительной оценки точности аппроксимации анализируемых данных логнормальным распределением нами также анализировалась динамика зависимости максимума интенсивности сетевого трафика от размера окна агрегации.

2. АППРОКСИМАЦИЯ ИЗМЕРЕНИЙ СЕТЕВОГО ТРАФИКА МЕТОДОМ МНК

Экспериментальные данные ПВР интенсивности сетевого трафика, представленные набором данных $[x_i, y_i]$ (где x_i – скорость передачи данных, y_i – количество данных, переданных с

заданной скоростью), аппроксимировались логнормальным распределением по формуле:

$$f(x) = \frac{a}{\sqrt{2\pi\sigma}x} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(\ln x - \mu)^2\right], \quad (1)$$

где x — переменная, σ и μ — параметры распределения, a — нормировочный множитель.

Для определения коэффициентов a , σ , μ распределения (1) использовался метод наименьших квадратов, т.е. подбирались такие коэффициенты a , σ , μ , чтобы выполнялось условие

$$S_{ols} = \sum_{k=1}^N [y_k - f(x_k)]^2 = \min. \quad (2)$$

Вычисление коэффициентов a , σ , μ выполнялось итерационно с использованием метода градиентного спуска [6] и его модификаций: на начальном этапе использовался метод наискорейшего спуска [7], на заключительном — метод оврагов [8].

Непосредственная реализация процедуры определения коэффициентов a , σ , μ состояла в следующем. Начальные коэффициенты a_0 , σ_0 , μ_0 выбирались произвольно, но таким образом, чтобы выполнялось равенство

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = 1,$$

например,

$$a_0 = 1.0, \quad \sigma_0 = 1.0, \quad \mu_0 = \ln(x_{last}),$$

где x_{last} — координата x самой правой экспериментальной точки.

В дальнейшем, коэффициенты σ , μ вычислялись итерационно методом градиентного спуска как

$$\sigma_n = w_\sigma(\sigma_{n-1}),$$

$$\mu_n = w_\mu(\mu_{n-1}),$$

где w_σ , w_μ — функции градиентного спуска по коэффициентам σ , μ , соответственно, а коэффициент a определялся как

$$a_n = \frac{\sum_{k=1}^N y_k g(x_k, \sigma_n, \mu_n)}{\sum_{k=1}^N (g_k)^2},$$

где

$$g(x_k, \sigma_n, \mu_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n}x_k} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_n^2}(\ln x_k - \mu_n)^2\right]$$

и для заданных коэффициентов σ_n , μ_n величина $S_{ols}(\sigma_n, \mu_n, a_n)$ (2) минимальна, т.е., для того, чтобы

$$S_{ols}(a) = \sum_{k=1}^N [y_k - ag(x_k)]^2 = \min,$$

требуется выполнение равенства

$$S'_{ols}(a) = 0.$$

Откуда

$$a = \frac{\sum_{k=1}^N y_k g(x_k)}{\sum_{k=1}^N (g_k)^2}.$$

Каждая итерация вычисления коэффициентов a_n , σ_n , μ_n включала следующие шаги:

1. Для определения коэффициента σ_n :

а. на основании вычисленного на предыдущей итерации коэффициента σ_{n-1} выбирались коэффициенты:

$$\sigma_{n_1} = \sigma_{n-1}(1 - \Delta_\sigma),$$

$$\sigma_{n_2} = \sigma_{n-1},$$

$$\sigma_{n_3} = \sigma_{n-1}(1 + \Delta_\sigma),$$

б. где Δ_σ — шаг спуска (максимальный шаг приближения σ_n к искомому значению σ_{min}) и вычислялись коэффициенты МНК:

$$S_{n_1} = S_{ols}(\sigma_{n_1}, \mu),$$

$$S_{n_2} = S_{ols}(\sigma_{n_2}, \mu),$$

$$S_{n_3} = S_{ols}(\sigma_{n_3}, \mu),$$

с. предполагая, что точки $\{\sigma_{n_1}, S_{n_1}\}$, $\{\sigma_{n_2}, S_{n_2}\}$, $\{\sigma_{n_3}, S_{n_3}\}$ лежат на некоторой кривой $S_{ols}(\sigma) = p_1\sigma^2 + p_2\sigma + p_3$, определялся коэффициент $\sigma_{n_{min}}$, при котором указанная кривая достигала бы минимума как

$$\sigma_{n_{min}} = \frac{1}{2} \times \frac{\sigma_{n_1}^2(S_{n_2} - S_{n_3}) + \sigma_{n_2}^2(S_{n_3} - S_{n_1}) + \sigma_{n_3}^2(S_{n_1} - S_{n_2})}{\sigma_{n_1}(S_{n_2} - S_{n_3}) + \sigma_{n_2}(S_{n_3} - S_{n_1}) + \sigma_{n_3}(S_{n_1} - S_{n_2})},$$

д. представляющее собой решение уравнения:

$$S'_{ols}(\sigma) = 0,$$

$$\sigma_{n_{min}} = -\frac{p_2}{2p_1},$$

е. с коэффициентами, получаемыми как решение системы уравнений:

$$S_{n_i} = p_1\sigma_{n_i}^2 + p_2\sigma_{n_i} + p_3, \quad i = 1, 2, 3,$$

ф. после чего вычислялось соответствующее знач

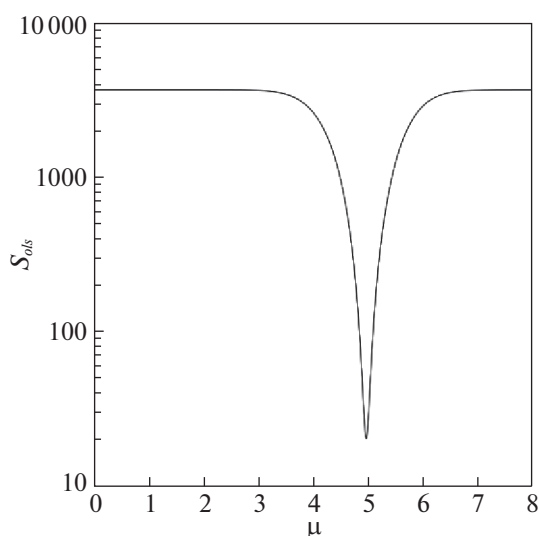


Рис. 1. Зависимость коэффициента МНК S_{ols} от коэффициента μ (один глобальный минимум при большом шаге $\Delta\mu$).

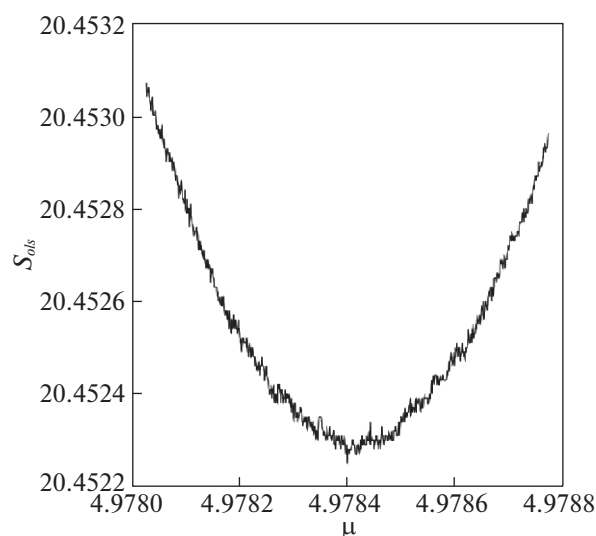


Рис. 2. Зависимость коэффициента МНК S_{ols} от коэффициента μ (множество локальных минимумов при малом шаге $\Delta\mu$).

ение коэффициента МНК $S_{n_{\min}} = S_{ols}(\sigma_{n_{\min}}, \mu)$,

г. из набора коэффициентов $\sigma_{n_1}, \sigma_{n_2}, \sigma_{n_3}, \sigma_{n_{\min}}$ выбирался такой σ_n , для которого значение коэффициента МНК $S_{ols}(\sigma_n)$ было минимальным;

2. аналогичная процедура проводилась при определении коэффициента μ_n ;

3. проверялось условие прекращения поиска коэффициентов a, σ, μ :

а. если вычисленный коэффициент МНК $S_n < S_{n-1} - \epsilon$, где ϵ — некоторая заданная ошибка для определения коэффициента МНК $S_{\min}$, то выполнялась $(n+1)$ -я итерация с теми же значениями шагов спуска $\Delta\sigma, \Delta\mu$, что и для n -ой итерации;

б. если вычисленный коэффициент МНК удовлетворял следующему условию $S_n \geq S_{n-1} - \epsilon$, значения шагов спуска корректировались согласно

$$\Delta\sigma = \Delta\sigma r_\sigma,$$

$$\Delta\mu = \Delta\mu r_\mu;$$

с. и выполнялась $(n+1)$ -я итерация с новыми значениями шагов спуска $\Delta\sigma, \Delta\mu$;

д. если последние L итераций шаг спуска уменьшался, то поиск коэффициентов a, σ, μ прекращался, а коэффициенты a_n, σ_n, μ_n , полученные на последней итерации, считались искомыми.

Величины шагов спуска $\Delta\sigma, \Delta\mu$ и количество итераций L подбирались индивидуально. Для

рассмотренной нами задачи был использован следующий набор параметров:

$$\Delta\sigma = \Delta\mu = 0.1,$$

$$r_\sigma = r_\mu = 1.01,$$

$$L = 128.$$

Преимуществом метода градиентного спуска при поиске минимума функции $f(x)$ является быстрое схождение x_n к $x_{\min} \pm \epsilon$ (см. рис. 1). Однако при этом с повышением точности метода (т.е. при уменьшении величины ϵ в результате уменьшения шага спуска Δx) x_n будет стремиться к одному из локальных минимумов, не совпадающему с искомым глобальным минимумом (см. рис. 2) (так называемая “проблема оврагов”).

Для ускорения процесса нахождения искоемых коэффициентов σ_n и μ_n , соответственно, к $\sigma_{\min}$ и $\mu_{\min}$ применялось постепенное уменьшение шагов спуска $\Delta\sigma$ и $\Delta\mu$.

Для преодоления локальных минимумов применялось прогнозирование поведения кривой (например, в виде параболы), на которой лежат значения соответствующих коэффициентов, и выбор такого коэффициента, при котором указанная кривая обеспечивает минимум.

Дополнительно, для поиска наиболее близких значений коэффициентов σ_n к $\sigma_{\min}$ и μ_n к $\mu_{\min}$, анализировалось поведение коэффициента МНК S_{ols} при разных начальных значениях коэффициентов a_0, σ_0, μ_0 . А именно, вычислялось несколько коэффициентов МНК S_{ols_i} для разных значений μ_{0_i}

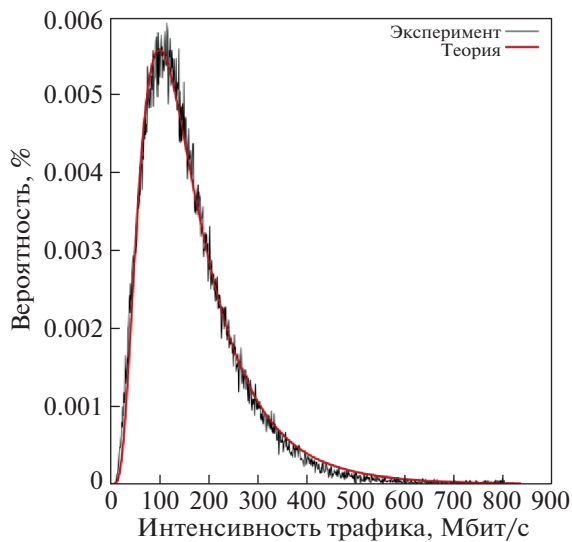


Рис. 3. ПВР интенсивности сетевого трафика, аппроксимированного логнормальным распределением (1).

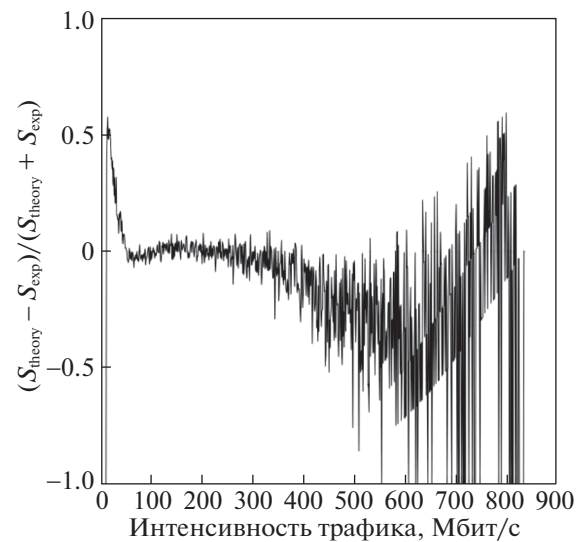


Рис. 4. Поведение случайной величины R_s (3), описывающей степень соответствия ПВР интенсивности сетевого трафика логнормальному закону (1).

и выбирались такие a , σ , μ , для которых коэффициент МНК S_{ols} был минимальным.

В результате применения описанного алгоритма достигалась высокая точность аппроксимации ПВР интенсивности сетевого трафика логнормальным распределением (1).

На рис. 3 представлен результат аппроксимации ПВР интенсивности сетевого трафика, полученного в симплексном режиме, логнормальным распределением (1). На рис. 4 показано поведение случайной величины

$$R_s = \frac{S_{theory} - S_{exp}}{S_{theory} + S_{exp}}, \quad (3)$$

равной отношению разности между значением ПВР интенсивности сетевого трафика S_{exp} и аппроксимирующим его логнормальным распределением S_{theory} на их сумму ($S_{theory} + S_{exp}$). Переменная R_s представляет собой относительную ошибку, характеризующую точность соответствия между измерениями сетевого трафика и аппроксимирующей их функцией.

Из рис. 3 и рис. 4 видно, что, несмотря на достаточно хорошее приближение экспериментальных данных аппроксимирующей кривой (1), между ними наблюдается заметное расхождение в области значений интенсивности сетевого трафика 300–600 Мбит/с. Причины указанного расхождения и то, как их можно уменьшить будут рассмотрены ниже.

3. АППРОКСИМАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ С НЕСКОЛЬКИМИ ПИКАМИ

Как отмечалось выше, в работе нами наблюдалось более сложное поведение ПВР интенсивности сетевого трафика, которое, в случае присутствия нескольких четко выраженных пиков, можно аппроксимировать суммой нескольких логнормальных распределений.

На рис. 5 приведен такой пример, который был получен, в частности, при работе сетевого оборудования в дуплексном режиме (анализировались как получаемые, так и передаваемые сетевые пакеты).

Экспериментальные данные мультипикового ПВР интенсивности сетевого трафика аппроксимировались суммой нескольких логнормальных распределений по формуле:

$$f(x) = \sum_{i=1}^M \left\{ \frac{a_i}{\sqrt{2\pi}\sigma_i x} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma_i^2} (\ln x - \mu_i)^2 \right] \right\}, \quad (4)$$

где M — количество логнормальных распределений, каждое из которых описывается своими коэффициентами $\{a_i, \sigma_i, \mu_i\}$, и суммой которых аппроксимируется наблюдаемое распределение экспериментальных данных.

Для определения коэффициентов $\{a_i, \sigma_i, \mu_i\}$ логнормального распределения (4) здесь также использовался метод наименьших квадратов, т.е. подбирались такие коэффициенты $\{a_i, \sigma_i, \mu_i\}$, чтобы выполнялось условие (2).

Вычисление коэффициентов $\{a_i, \sigma_i, \mu_i\}$ выполнялось итерационно с использованием метода градиентного спуска способом, аналогичным

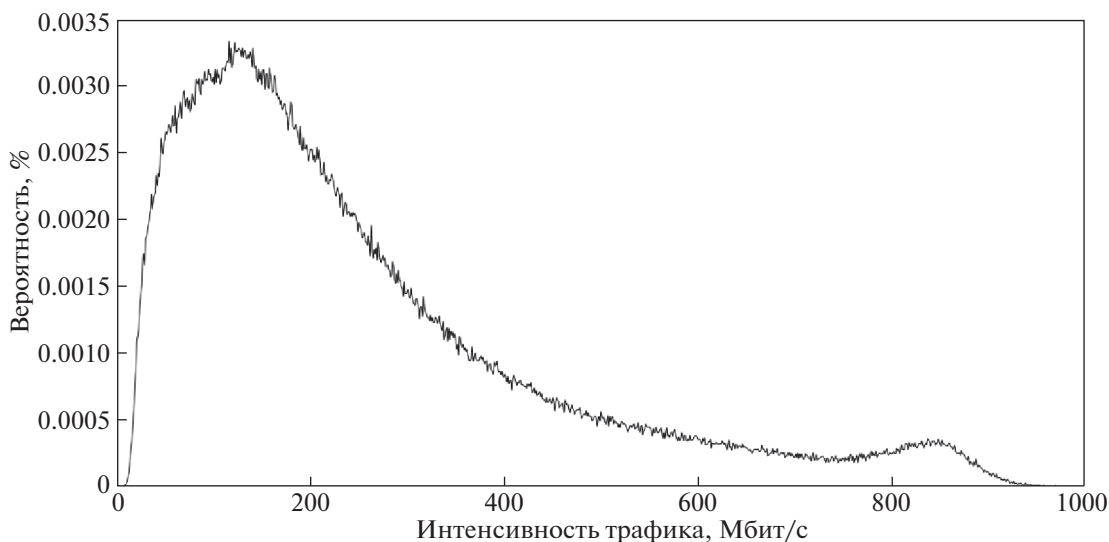


Рис. 5. Двухпиковое ПВР интенсивности сетевого трафика.

описанному выше. Непосредственно алгоритм определения коэффициентов $\{a_i, \sigma_i, \mu_i\}$ состоял в следующем.

Начальные значения коэффициентов $a_{i0}, \sigma_{i0}, \mu_{i0}$ выбирались произвольно с условием, чтобы выполнялось равенство

$$\int_0^{\infty} \sum_{i=1}^M \frac{a_{i0}}{\sqrt{2\pi}\sigma_{i0}x} e^{-\frac{(\ln x - \mu_{i0})^2}{2\sigma_{i0}^2}} dx = 1,$$

откуда

$$\sum_{i=1}^M a_{0i} = 1,$$

например,

$$a_0 = \frac{1}{M}, \quad \sigma_0 = 1.0, \quad \mu_0 = \ln(x_{last}),$$

где x_{last} — это координата самой правой экспериментальной точки.

В дальнейшем коэффициенты $\{\sigma_i, \mu_i\}$ вычислялись итерационно методом градиентного спуска как

$$\sigma_{in} = w_{\sigma}(\sigma_{in-1}),$$

$$\mu_{in} = w_{\mu}(\mu_{in-1}),$$

а коэффициент a_i определялся как

$$a_{in} = \frac{\sum_{k=1}^N g(x_k, \sigma_n, \mu_n)(y_i - h(x_k))}{\sum_{k=1}^N (g_k)^2},$$

где

$$g(x_k, \sigma_n, \mu_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_n x_k} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_n^2}(\ln x_k - \mu_n)^2\right],$$

$$h(x_k) = \sum_{j \neq i}^M \frac{a_j}{\sqrt{2\pi}\sigma_j x_k} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_j^2}(\ln x_k - \mu_j)^2\right].$$

Таким образом, чтобы для заданных коэффициентов σ_{in}, μ_{in} величина коэффициента МНК $S_{ols}(\sigma_{in}, \mu_{in}, a_{in})$ была минимальной.

Имеем

$$S_{ols}(a) = \sum_{k=1}^N (y_k - f(x_k))^2 = \min,$$

где

$$f(x_k) = ag(x_k) + h(x_k).$$

Т.е.

$$S'_{ols}(a) = 0,$$

откуда имеем

$$a_i = \frac{\sum_{k=1}^N g(x_k)(y_k - h_i(x_k))}{\sum_{k=1}^N (g_k)^2}.$$

Каждая итерация вычисления коэффициентов $a_{in}, \sigma_{in}, \mu_{in}$ включала следующие шаги:

1. Все коэффициенты $\sigma_i, i \in [1, M]$ определялись согласно процедуре, отвечающей шагу 1 алгоритма, описанного в разделе 2;
2. Все коэффициенты $\mu_i, i \in [1, M]$ определялись согласно процедуре, отвечающей шагу 2 алгоритма, описанного в разделе 2;

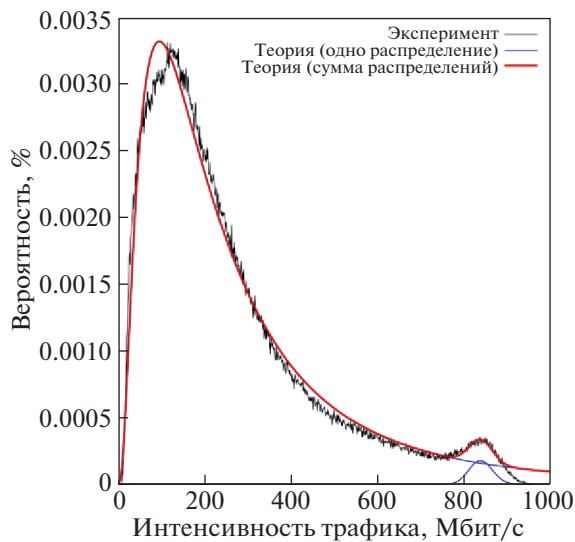


Рис. 6. ПВР интенсивности сетевого трафика, аппроксимированное сумой логнормальных распределений (4).

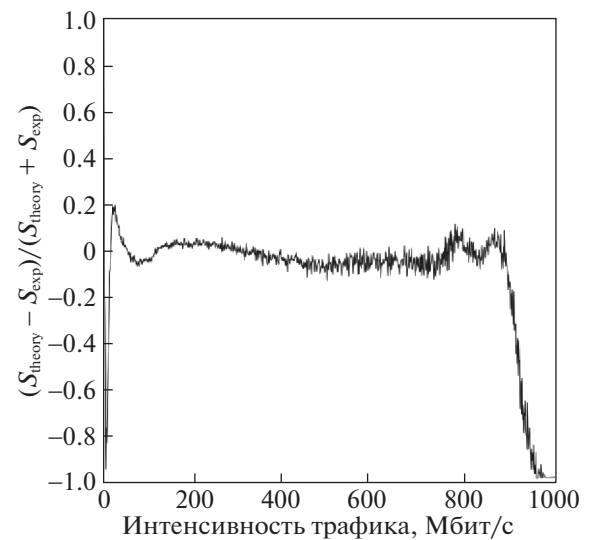


Рис. 7. Поведение случайной величины $R_s(3)$, описывающей степень соответствия ПВР интенсивности сетевого трафика сумме логнормальных распределений (4).

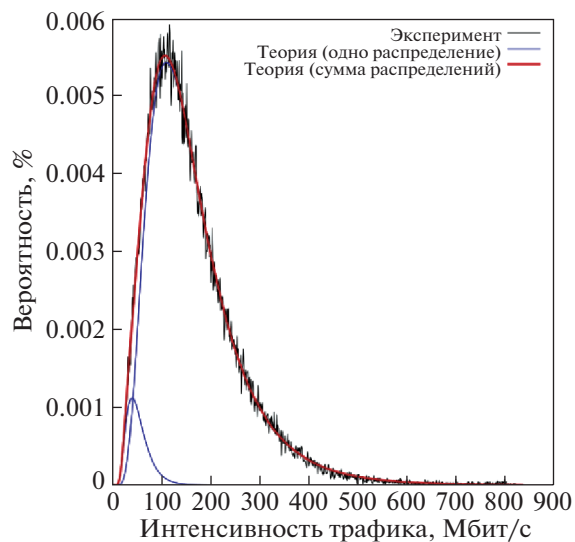


Рис. 8. ПВР интенсивности сетевого трафика, аппроксимируемое суммой двух логнормальных распределений (4).

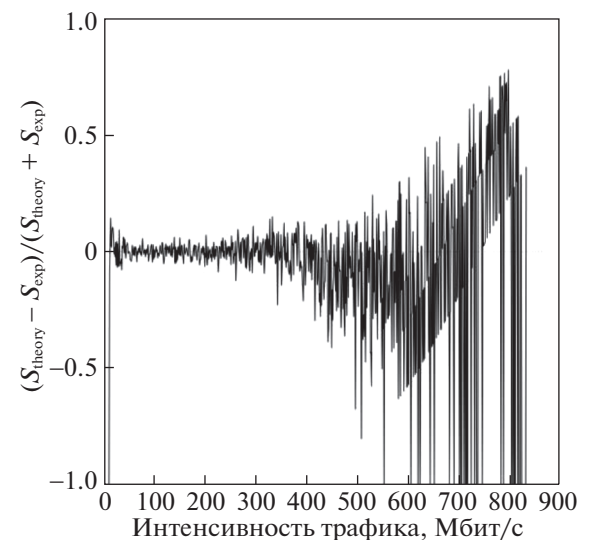


Рис. 9. Поведение случайной величины $R_s(3)$, описывающей степень соответствия ПВР интенсивности сетевого трафика сумме двух логнормальных распределений (4).

3. Проверялось условие прекращения поиска коэффициентов $\{a_i, \sigma_i, \mu_i\}$ способом, описанным в шаге 3 алгоритма, приведенного в разделе 2.

Применение рассмотренного алгоритма к измерениям сетевого трафика, приведенным на рис. 5 позволяет добиться высокой точности аппроксимации ПВР интенсивности сетевого трафика суммой логнормальных распределений (4) (см. рис. 6 и 7).

Следует отметить, что применив к однопиковому распределению, приведенному на рис. 3, аппроксимацию суммой двух логнормальных распределений, используя формулу (4), можно заметно улучшить соответствие реальных измерений теоретической кривой (см. рис. 8 и 9).

В примере с двухпиковым ПВР интенсивности сетевого трафика (см. рис. 6) наблюдаются отклонения аппроксимирующей кривой (4) от измерений сетевого трафика в области главного пика

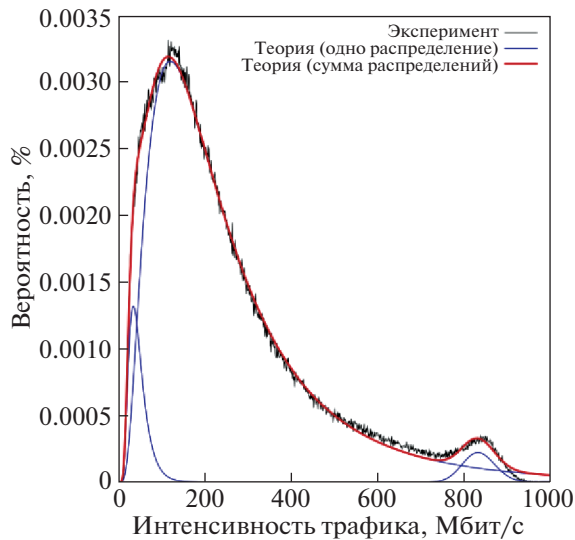


Рис. 10. ПВР интенсивности сетевого трафика, аппроксимированное суммой 3 логнормальных распределений.

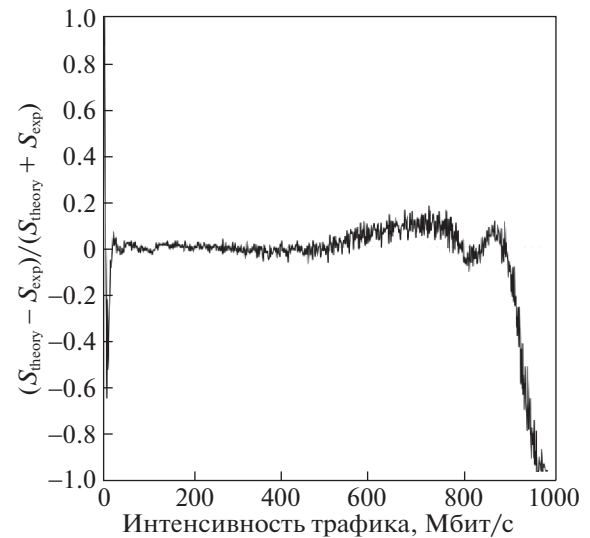


Рис. 11. Поведение случайной величины R_s (3), описывающей степень соответствия ПВР интенсивности сетевого трафика сумме 3 логнормальных распределений (4).

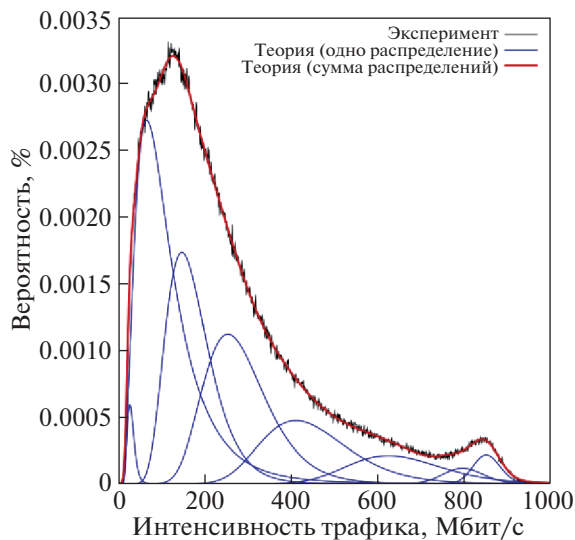


Рис. 12. ПВР интенсивности сетевого трафика, аппроксимированное суммой 8 логнормальных распределений.

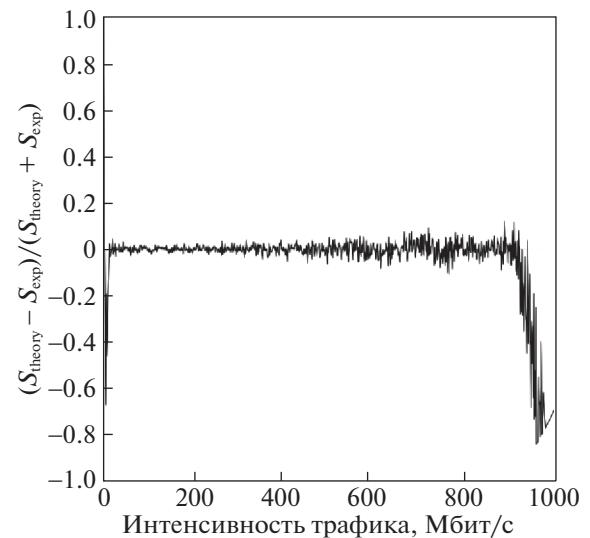


Рис. 13. Поведение случайной величины R_s (3), описывающей степень соответствия ПВР интенсивности сетевого трафика сумме 8 логнормальных распределений (4).

(~100 Мбит/с), при значениях интенсивности сетевого трафика в интервале 300–600 Мбит/с, а также в области правого хвоста распределения ПНР, где экспериментальные значения на “хвосте” спадают очень резко, а теоретическая кривая ведет себя более плавно.

Аппроксимация двухпикового распределения тремя логнормальными распределениями (рис. 10) позволяет заметно улучшить указанную ситуацию (см. рис. 6).

Аппроксимация рассмотренного нами двухпикового распределения суммой восьми логнормальных распределений (рис. 12) позволяет избавиться от всех указанных выше проблем (рис. 6), в том числе, и от медленного спада “хвоста” ПВР интенсивности сетевого трафика.

Интересно отметить, что описанный нами метод градиентного спуска для вычисления параметров логнормального распределения (или суммы логнормальных распределений) несмотря на

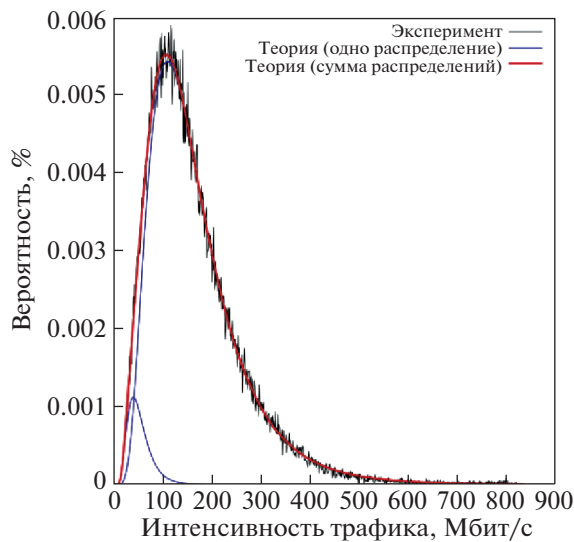


Рис. 14. ПВР интенсивности сетевого трафика, аппроксимированное суммой 2 логнормальных распределений (4).

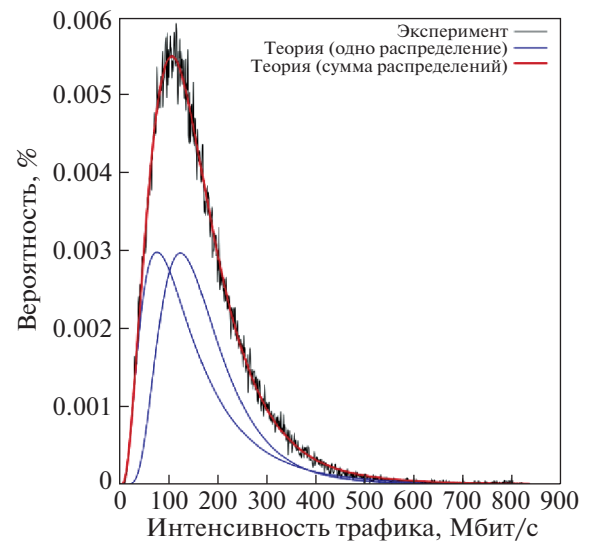


Рис. 15. ПВР интенсивности сетевого трафика, аппроксимированное суммой 2 логнормальных распределений (4).

проблемы, обусловленные наличием локальных минимумов (проблема оврагов), позволяет добиться высокой точности аппроксимации анализируемых распределений. К сожалению, получаемый при этом результат иногда может отвечать разным логнормальным распределениям. Подобный пример представлен нами на рис. 14 и 15.

В этом примере коэффициенты МНК (S_1 и S_2) в обоих случаях отличаются незначительно:

$$S_1 = 0.11209,$$

$$S_2 = 0.11226,$$

$$\frac{S_1 - S_2}{S_1 + S_2} \sim 0.0007.$$

Однако при этом сами пики отличаются уже более существенно (как по интенсивности, так и по положению):

$$x_{11} = 40.67002, \quad a_{11} = 0.05563,$$

$$x_{12} = 110.54602, \quad a_{12} = 0.94571$$

$$x_{11} = 78.02385, \quad a_{11} = 0.50198,$$

$$x_{12} = 125.39898, \quad a_{12} = 0.50198.$$

Отмеченное обстоятельство может представлять определенную сложность при интерпретации анализируемых данных, поскольку каждое логнормальное распределение отвечает определенному режиму передачи данных.

4. АППРОКСИМАЦИЯ ИЗМЕРЕНИЙ СЕТЕВОГО ТРАФИКА НА ОСНОВЕ КОЭФФИЦИЕНТА ДЕТЕРМИНАЦИИ R^2

Определенным ограничением коэффициента МНК S_{ols} (2), используемого для оценки точности аппроксимации, является то, что его величина зависит от разных факторов, например, количества аппроксимируемых точек $[x_i, y_i]$, значения величин $[y_i]$ и т.д. Без учета этих факторов знание величины коэффициента МНК не дает никакой информации о точности аппроксимации анализируемых данных.

Для оценки точности желательно использовать критерий, численное значение которого ограничено в некотором диапазоне, где одна из границ соответствовала бы грубой аппроксимации, а другая — наиболее точной, при которой все экспериментальные точки ложились бы на некоторую теоретическую кривую.

С этой целью мы предлагаем использовать для оценки точности аппроксимации данных наблюдения в качестве критерия коэффициент детерминации R^2 (англ. coefficient of determination R^2).

Коэффициент детерминации R^2 — это доля дисперсии зависимой переменной, объясняемая рассматриваемой моделью зависимости, то есть объясняющими переменными. Коэффициент R^2 рассматривают как универсальную меру зависимости одной случайной величины от множества других:

$$R^2 = 1 - \frac{V(y|x)}{V(y)} = 1 - \frac{\sigma^2}{\sigma_y^2}, \quad (5)$$

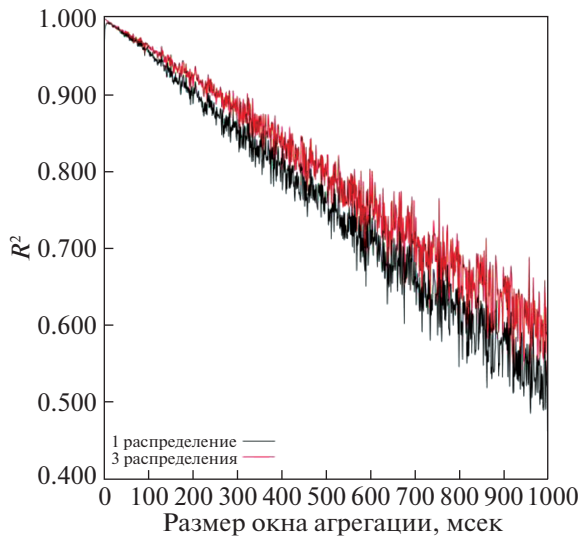


Рис. 16. Зависимость коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только ТСР пакеты, полученные в дуплексном режиме.

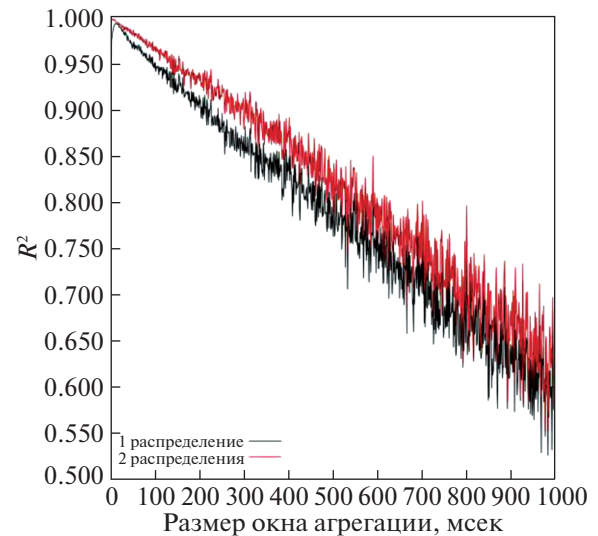


Рис. 17. Зависимость коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только ТСР пакеты, полученные в симплексном режиме.

где $V(y|x) = \sigma^2$ — условная (по факторам x) дисперсия зависимой переменной (дисперсия случайной ошибки модели).

Если используется выборочная оценка значений соответствующих дисперсий, то из (5) следует формула для выборочного коэффициента детерминации (он обычно и подразумевается под коэффициентом детерминации):

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}}, \quad (6)$$

где SS_{res} — сумма квадратов остатков регрессии:

$$SS_{res} = \sum_{k=1}^N (y_i - \hat{y}_k)^2 = \sum_{k=1}^N [y_k - f(x_k)]^2 = S_{ols},$$

$$SS_{tot} = \sum_{k=1}^N (y_i - \bar{y}_k)^2.$$

Откуда получаем выражение коэффициента детерминации R^2 для оценки точности аппроксимации экспериментальных данных определенной функциональной зависимостью:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{k=1}^N [y_k - f(x_k)]^2}{\sum_{k=1}^N (y_k - \bar{y}_k)^2} = 1 - \frac{S_{ols}}{\sum_{k=1}^N (y_k - \bar{y}_k)^2}.$$

Коэффициент детерминации R^2 принимает значения от 0 до 1, чем ближе его значение к 1, тем

точнее аппроксимация экспериментальных данных теоретической кривой.

Коэффициент R^2 применялся нами для оценки точности аппроксимации ПВР сетевого трафика и ПВР скорости передачи сетевых пакетов, построенных по экспериментальным данным при разных размерах окна агрегации, логнормальным законом: одним, или суммой нескольких логнормальных распределений.

На рис. 16 и рис. 17 приведены графики зависимости коэффициента детерминации R^2 от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только ТСР пакеты, полученные, соответственно, в дуплексном и симплексном режимах. Для количественной и качественной оценки R^2 , как инструмента точности аппроксимации, сравнивались значения R^2 , рассчитанные при аппроксимации экспериментальных данных одним и суммой нескольких логнормальных распределений.

• На рис. 16 показаны графики при аппроксимации ПВР интенсивности сетевого трафика одним логнормальным распределением и суммой трех логнормальных распределений. Поскольку ПВР интенсивности сетевого трафика, полученного в дуплексном режиме, содержит два ярко выраженных пика интенсивности (см. рис. 5), то, в отличие от графика, приведенного на рис. 17, для аппроксимации использовалась сумма трех, а не двух логнормальных распределений. При этом, если сумма двух логнормальных распределений обеспечивает высокий уровень аппроксимации двухпиковой ПВР интенсивности сетевого

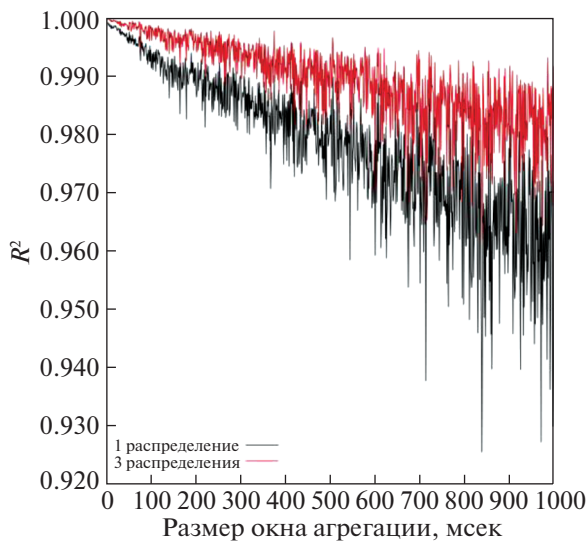


Рис. 18. Зависимость коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР скорости передачи сетевых пакетов, в котором учитывались только TCP пакеты, полученные в дуплексном режиме.

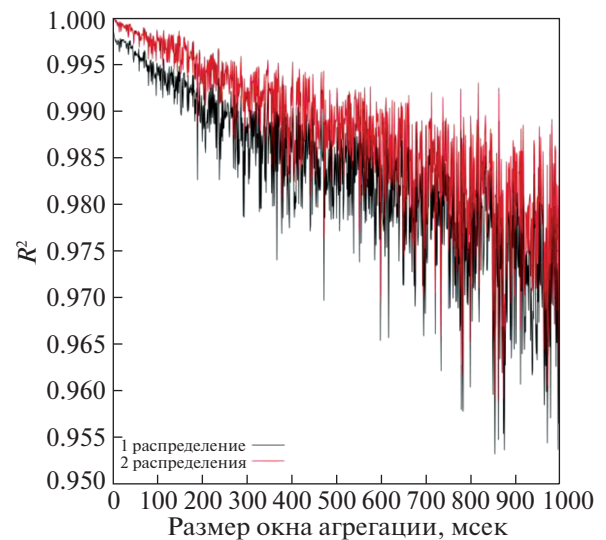


Рис. 19. Зависимость коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР скорости передачи сетевых пакетов, в котором учитывались только TCP пакеты, полученные в симплексном режиме.

трафика, то дополнительное (третье) слагаемое позволяет повысить точность аппроксимации, достигнутую (в первом приближении) суммой двух первых распределений.

- На рис. 17 показаны графики для случая аппроксимации ПВР интенсивности сетевого трафика одним логнормальным распределением и суммой двух логнормальных распределений. При этом, поскольку ПВР интенсивности сетевого трафика, полученного в симплексном режиме, содержит только один ярко выраженный пик интенсивности (см. рис. 3), то одно логнормальное распределение аппроксимирует ПВР интенсивности сетевого трафика в первом приближении, а второе распределение уточняет аппроксимацию первого логнормального распределения.

Видно, что, чем больше логнормальных распределений используется для аппроксимации ПВР интенсивности сетевого трафика, тем сильнее коэффициент детерминации R^2 стремится к 1. Такая зависимость очевидна, т.к. чем больше логнормальных распределений используется для аппроксимации ПВР интенсивности сетевого трафика, тем меньше должно быть отклонение случайной величины R_x^2 (3) от 1. Исключения составляют начало и конец указанных распределений.

Из приведенных на рис. 16 и рис. 17 графиков видно, что в области малых значений окна агрегации (от 0 мсек до 50 мсек) коэффициент детерминации R^2 , начиная с величины ≈ 0.95 , быстро растет, достигая максимального значения ~ 1 , после чего следует медленный спад. При этом вели-

чина коэффициента R^2 длительное время остается в допустимой области, отвечающей высокой точности аппроксимации анализируемых данных логнормальным распределением.

Уменьшение коэффициента детерминации R^2 с ростом размера окна агрегации вызвано падением точности аппроксимации данных логнормальным законом, а рост ширины коридора разброса обусловлен увеличением погрешности при вычислении ПВР интенсивности сетевого трафика из-за уменьшения числа регистрируемых сетевых пакетов.

Для анализа данных сетевого трафика, накопленных за некоторый промежуток времени на сайте [10], с помощью пакета Wireshark [11] извлекалась и использовалась следующая информация: время прихода сетевого пакета t_i , размер сетевого пакета s_i (заголовок сетевого пакета и данные, переданные сетевым пакетом) о совокупности сетевых пакетов $\{p_i(t, s)\}$.

На рис. 18 и 19 приведены графики зависимости коэффициента детерминации R^2 от размера окна агрегации для ПВР скорости передачи TCP-пакетов (без учета содержащейся в них информации), полученные, соответственно, в дуплексном и симплексном режимах.

Из приведенных на рис. 18, 19 графиков можно сделать вывод о том, что их поведение в целом повторяет то, что мы видели на рис. 16, 17. Видно, что коэффициент R^2 в случае аппроксимации ПВР скорости передачи сетевых пакетов (рис. 18, 19)

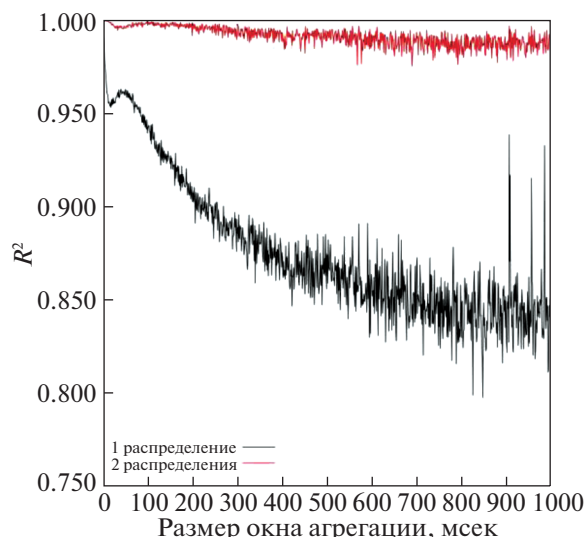


Рис. 20. Зависимость коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в дуплексном режиме.

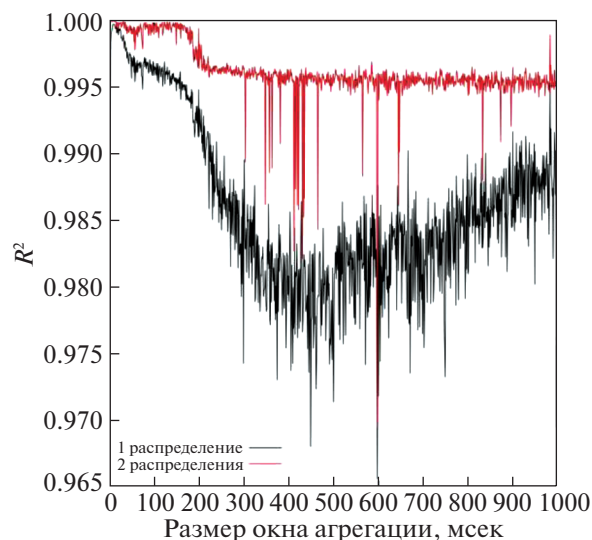


Рис. 21. Зависимость коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР скорости передачи сетевых пакетов, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в дуплексном режиме.

логнормальным законом заметно ближе к 1, чем для случая ПВР сетевого трафика (рис. 16, 17). Т.е. аппроксимация логнормальным распределением ПВР скорости передачи сетевых пакетов оказывается точнее в сравнении с ПВР интенсивностью сетевого трафика. Это связано с тем, что в отличие от интенсивности сетевого трафика, который зависит как от времени передачи сетевых пакетов, так и от объема данных, передаваемых в сетевых пакетах, скорость передачи сетевых пакетов зависит только от времени их передачи. Поэтому на ПВР скорости передачи сетевых пакетов влияют меньше случайных параметров.

С учетом вышеизложенного, можно сделать вывод о том, что ПВР скорости передачи сетевых пакетов может служить простым и удобным критерием для оценки работы сетевого оборудования без использования дополнительного, ресурсозатратного сбора и анализа сетевых данных.

Для определения значений коэффициента детерминации R^2 , начиная с которых можно говорить о хорошей точности аппроксимации экспериментальных данных логнормальным законом, нами был проведен детальный анализ зависимостей коэффициента детерминации R^2 от размера окна агрегации для:

1. ПВР интенсивности сетевого трафика, измеренных в дуплексном и симплексном режимах, в которых анализировались:

- все сетевые пакеты,
- только ТСР-пакеты,
- только служебные сетевые пакеты.

2. ПВР скорости передачи сетевых пакетов, измеренных в дуплексном и симплексном режимах, в которых анализировались:

- все сетевые пакеты,
- только ТСР-пакеты,
- только служебные сетевые пакеты.

В результате проведенного анализа было установлено, что при $R^2 > 0.75$ точность аппроксимации может считаться допустимой, для $R^2 > 0.90$ – высокой, а в случае $R^2 > 0.95$ – близкой к идеальной. При этом графики для ПВР интенсивности сетевого трафика и ПВР скорости передачи сетевых пакетов, полученные для ТСР-пакетов и для всех сетевых пакетов, зарегистрированных в дуплексном и симплексном режимах, повторяют поведение графиков, наблюдаемое нами ранее: смотри, в частности, рис. 16, 17.

Несколько иное поведение графиков наблюдается в случае обработки только служебных сетевых пакетов. На рис. 20, 21 приведены зависимости коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика и ПВР скорости передачи сетевых пакетов, полученные при обработке только служебных пакетов, зарегистрированных в дуплексном режиме.

На рис. 22, 23 показано поведение соответствующих графиков для служебных пакетов, полученных в симплексном режиме.

Из приведенных графиков видно, что для обоих типов передачи данных с ростом размера окна агрегации заметно растет разброс ошибок, при-

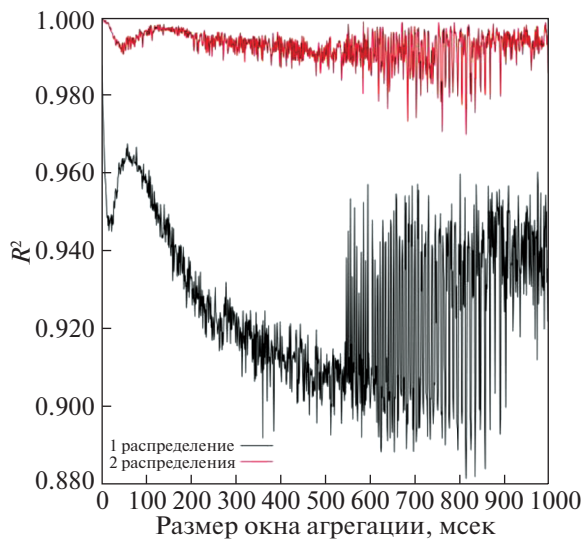


Рис. 22. Зависимость коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в симплексном режиме (мас: "00 0e 39 e3 34 00").

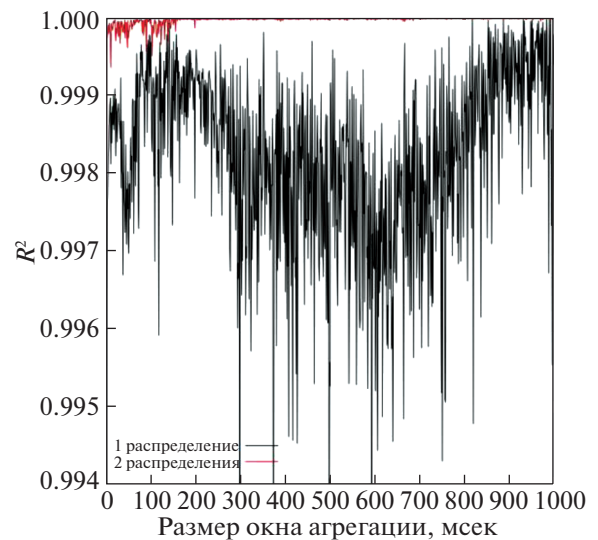


Рис. 23. Зависимость коэффициента R^2 от размера окна агрегации для ПВР скорости передачи сетевых пакетов, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в симплексном режиме (мас: "00 0e 39 e3 34 00").

обретая порой хаотический характер. Такое поведение объясняется тем, что количество регистрируемых служебных пакетов существенно меньше общего количества всех сетевых и ТСП-пакетов. Для того, чтобы исправить указанную ситуацию, можно при анализе служебных пакетов увеличить размер окна при агрегации измерений.

Более простое и интересное решение обсуждаемой проблемы представлено прямо на самих графиках. Видно, что при аппроксимации анализируемых данных суммой двух логнормальных распределений коэффициент детерминации R^2 выходит на уровень, близкий к 1 практически на всем диапазоне значений окна агрегации.

С учетом того, что в отличие от рассмотренных нами других сетевых пакетов, на служебные пакеты не оказывают воздействия различные случайные параметры, то можно предположить, что распределения служебных пакетов строго подчиняются логнормальному закону.

5. АНАЛИЗ СЕТЕВОГО ТРАФИКА ПО ДИНАМИКЕ МАКСИМУМА ЕГО ИНТЕНСИВНОСТИ

Для дополнительной оценки точности аппроксимации анализируемых данных логнормальным распределением анализировалась динамика зависимости максимума интенсивности сетевого трафика от размера окна агрегации.

Если гипотеза о логнормальном распределении сетевых данных верна, то следует ожидать, что с ростом размера окна агрегации максимум

интенсивности будет стремиться (при этом довольно интенсивно) к некой постоянной величине. В противном случае, положение пика интенсивности должно носить случайный характер.

Максимум интенсивности сетевого трафика, аппроксимируемого одним логнормальным распределением, вычисляется как:

$$f(x_{pick}) = 0,$$

где $f(x)$ определена равенством (1).

Откуда получаем выражение для вычисления пика максимума интенсивности (x_{pick}):

$$x_{pick} = e^{\mu - \sigma^2}.$$

На рис. 24, 25 приведены зависимости максимума (x_{pick}) интенсивности от размера окна агрегации для ПВР сетевого трафика в дуплексном и симплексном режимах, соответственно. Видно, что величина пика интенсивности x_{pick} при увеличении размера окна агрегации вначале резко возрастет, после чего медленно и плавно выходит на плато. Зависимости максимума интенсивности от размера окна агрегации для ПВР скорости передачи сетевых пакетов в указанных режимах ведут себя аналогичным образом.

Таким образом, зависимость максимума интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации хорошо согласуется с предсказанным поведением, а минимальный разброс данных наблюдения указывает на правильность выбора логнормального распределения для аппроксимации экспериментальных данных и высокой ее точности.

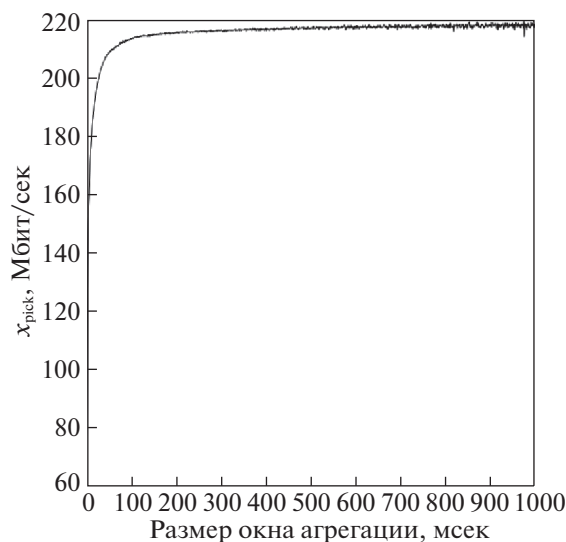


Рис. 24. Зависимость пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только ТСР пакеты, полученные в дуплексном режиме.

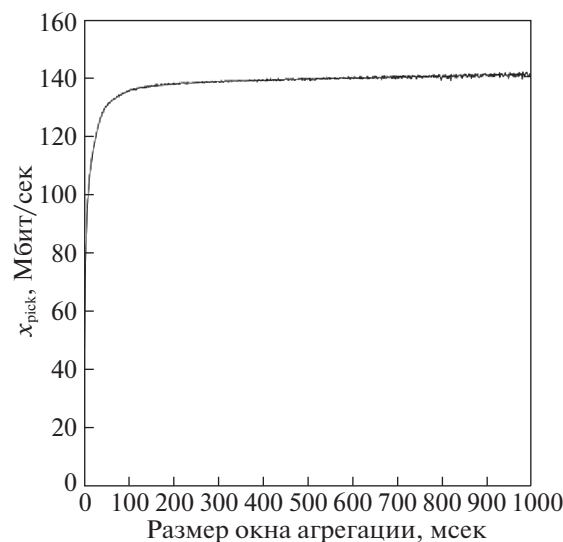


Рис. 25. Зависимость пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только ТСР пакеты, полученные в симплексном режиме.

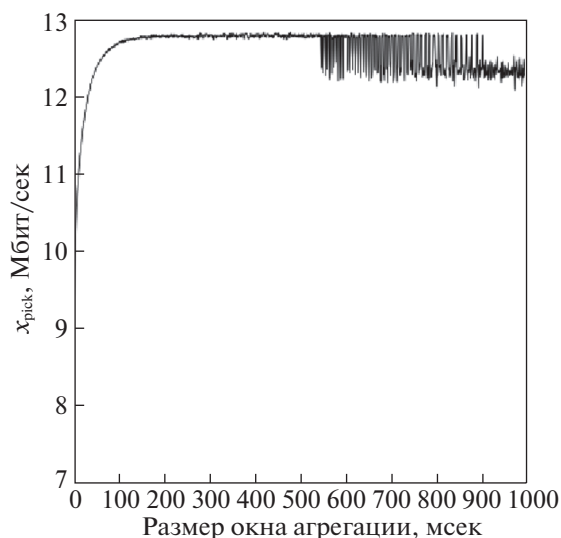


Рис. 26. Зависимость пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в симплексном режиме (мас: “00 0e 39 e3 34 00”).

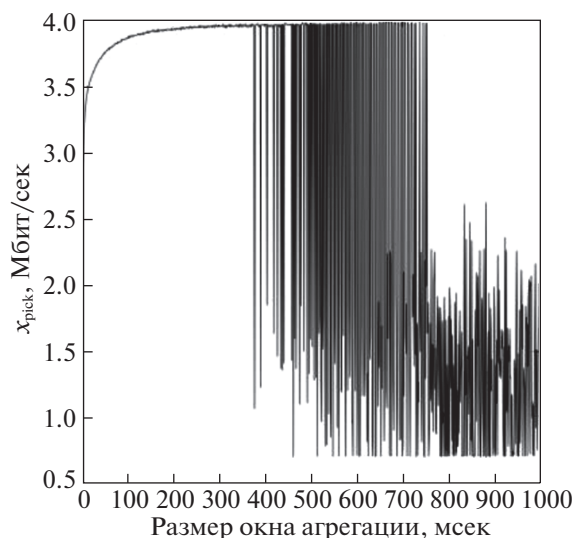


Рис. 27. Зависимость пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в симплексном режиме (мас: “6c 9c ed 7a 49 ca”).

На рис. 26–28 можно наблюдать хаотичное поведение пика интенсивности после некоторого критического значения размера окна агрегации (400+ msec), в результате которого практически постоянное значение пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации “разрушается”, что приводит к случайным, резким скачкам пика интенсивности x_{pick} при разных значениях размера окна агрегации.

При этом хаотичное поведение наблюдается только для зависимостей пика интенсивности для ПВР интенсивности сетевого трафика и ПВР скорости передачи сетевых пакетов, в которых учитывались только служебные сетевые пакеты. Такое поведение связано с небольшим количеством служебных сетевых пакетов среди всех собранных сетевых пакетов и, как следствие, высокой погрешностью при вычислении ПВР интенсивно-

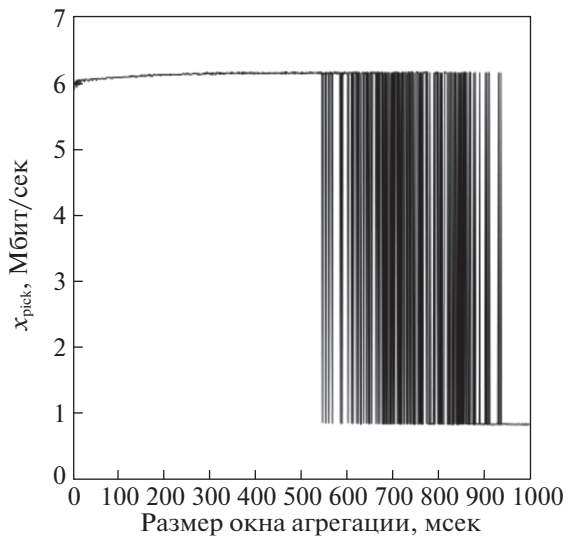


Рис. 28. Зависимость пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации для ПВР скорости передачи сетевых пакетов, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в симплексном режиме (мас: “6с 9с ed 7a 49 са”).

сти сетевого трафика и ПВР скорости передачи сетевых пакетов (аналогично ситуации, описанной выше, см. раздел 4).

То, что хаотичное поведение зависимости пика интенсивности x_{pick} и коэффициента детерминации R^2 от размера окна агрегации имеют одинаковую природу, можно также предположить исходя из того, что хаотичное поведение возникает после одного и того же критического значения размера окна агрегации, как для зависимости пика интенсивности x_{pick} , так и для коэффициента детерминации R^2 . Например, на рис. 22 и 26 (зависимость коэффициента R^2 пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в симплексном режиме для мас: “00 0e 39 e3 34 00”) хаотичное поведение начинается с момента ≈ 600 мсек. На рис. 22 и 27 (зависимость коэффициента R^2 пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации для ПВР интенсивности сетевого трафика, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в симплексном режиме для мас: “6с 9с ed 7a 49 са”) хаотичное поведение начинается с момента ≈ 400 мсек. А на рис. 21 и 28 (зависимости коэффициента R^2 пика интенсивности x_{pick} от размера окна агрегации для ПВР скорости передачи сетевых пакетов, в котором учитывались только служебные пакеты, полученные в симплексном режиме для мас: “6с 9с ed 7a 49 са”), хаотичное поведение начинается с момента времени ≈ 550 мсек.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлены результаты применения двух численных подходов для аппроксимации суммой логнормальных распределений измерений сетевого трафика, зарегистрированных в магистральном канале, на основе: 1) метода наименьших квадратов, 2) коэффициента детерминации R^2 .

В первом и втором подходах был достигнут высокий уровень соответствия данных наблюдения логнормальному закону. При этом, после включения в аппроксимирующую функцию дополнительных слагаемых, точность аппроксимации заметно возрастает.

Показано, что зависимость коэффициента детерминации R^2 от размера окна агрегации для анализируемых сетевых пакетов позволяет контролировать точность аппроксимации данных наблюдения логнормальным законом.

В результате проведенного анализа было установлено, что при $R^2 > 0.75$ точность аппроксимации может считаться допустимой, для $R^2 > 0.90$ — высокой, а в случае $R^2 > 0.95$ — близкой к идеальной.

Интересное явление было обнаружено в случае анализа только служебных пакетов. При аппроксимации указанных измерений суммой двух логнормальных распределений коэффициент детерминации R^2 выходит на уровень близкий к 1 практически на всем диапазоне значений окна агрегации, что указывает на то, что распределения служебных пакетов строго подчиняются логнормальному закону. Отмеченное наблюдение требует отдельного, детального анализа.

Таким образом, проанализирована динамика максимума интенсивности измерений трафика в зависимости от размера окна агрегации и показано, что ее поведение указывает на правильность выбора логнормального распределения для аппроксимации данных наблюдения, а минимальный их разброс подчеркивает высокую ее точность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zrellov P.V., Ivanov Valery V., Ivanov Victor V., Kryukov Yu.A., Tatarinov I.I. Study of Internet-Traffic Features in the Trunk Channel, Physics of Particles and Nuclei Letters. 2019. V. 16. № 3. P. 289–299.
2. Antoninou I., Ivanov V.V., Ivanov Valery V., Zrellov P.V. On the Log-Normal Distribution of Network Traffic, Physica D. 2002. V. 167. № 7. P. 2–85.
3. Antoninou I., Ivanov V.V., Ivanov Valery V., Zrellov P.V. Statistical Model of Network Traffic, “Физика элементарных частиц и атомного ядра” (ЭЧАЯ). 2004. Т. 35. Вып. 4. С. 984–1019.
4. Бахрушин В.Е. Методы оценивания характеристик нелинейных статистических связей. Системные технологии, 2011. Т. 73. № 2. С. 9–14.

5. Ершов Э.Б. Выбор регрессии, максимизирующий несмещенную оценку коэффициента детерминации (рус./англ.) // Айвазян С.А. Прикладная эконометрика. М.: Маркет ДС, 2008. Т. 12. Вып. 4. С. 71–83.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. Т. 1, 2. М.: Физматгиз, 1962, 464 с.
7. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. Под общ. ред. И.Н. Тихонова, 2-е изд. М.: Физматлит: Лаб. базовых данных; СПб.: Нев. диалект, 2002, 630 с.
8. Гельфанд И.М., Цейтлин М.Л. ДАН СССР. 1961. Т. 137. № 2. С. 295–98.
9. Ершов Э.Б. Распространение коэффициента детерминации на общий случай линейной регрессии, оцениваемой с помощью различных версий метода наименьших квадратов (рус./англ.) // ЦЭМИ РАН Экономика и математические методы. М.: ЦЭМИ РАН, 2002. Т. 38. Вып. 3. С. 107–120.
10. MAWI Working Group Traffic Archive. URL: <http://mawi.wide.ad.jp/mawi/>
11. Wireshark, May 2014, <http://www.wireshark.org>

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 4, pp. 382–396

Approximation of Internet Traffic Measurements in the Trunk Channel by the Sum of Lognormal Distributions

Valery V. Ivanov^{a,b}, Victor V. Ivanov^{b,c}, A. V. Kryanev^{c,b}, and I. I. Tatarinov^d

^a CJSC "MPOTC "TECHNOKOMPLEKT", Dubna, Moscow oblast, 141981 Russia

^b United Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow oblast, 141980 Russia

^c National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

^d Kaspersky Lab, Moscow, 123060 Russia

Received June 20, 2019; revised June 20, 2019; accepted June 25, 2019

Abstract—Two numerical approaches for approximating measurements of the network traffic recorded in a trunk channel based on the traditional least squares method and the coefficient of determination R^2 . To additionally estimate the accuracy of the approximation of the analyzed data by a lognormal distribution, the dynamics of the dependence of the maximum intensity of the network traffic on the size of the aggregation window has been analyzed. A high level of compliance of the observation data with a lognormal law has been achieved in both approaches. At the same time, the accuracy of approximation increases noticeably when additional terms are included in the approximating function. It has been shown that the dependence of the determination coefficient on the size of the aggregation window for the analyzed network packets allows one to control the accuracy of the observation data by a lognormal law.

Keywords: network traffic, intensity, approximation, lognormal distribution, aggregation window, coefficient of determination

DOI: 10.1134/S2304487X19040047

REFERENCES

1. Zrelov P.V., Ivanov Valery V., Ivanov Victor V., Kryukov Yu.A., Tatarinov I.I., Study of Internet-Traffic Features in the Trunk Channel, *Physics of Particles and Nuclei Letters*, 2019, vol. 16, no. 3, pp. 289–299.
2. Antoninou I., Ivanov V.V., Ivanov Valery V., and Zrelov P.V., On the Log-Normal Distribution of Network Traffic, *Physica D*, 2002, vol. 167, no. 7, pp. 2–85.
3. Antoninou I., Ivanov V.V., Ivanov Valery V., and Zrelov P.V., Statistical Model of Network Traffic, "Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra" [Physics of elementary particles and nucleus], 2004, vol. 35, no. 4, pp. 984–1019.
4. Bakhrushin V.E., Metody ocenivaniya kharakteristik nelineynykh statisticheskikh svyazey [Estimation methods of characteristics of nonlinear statistic connections]. *Sistemnye tekhnologii*, 2011, vol. 73, № 2, pp. 9–14.
5. Ershov E.B., Vybory regreessii maksimiziruyushchiy nesneschyonnuyu ocenku koeffitsienta determinatsii [A choice of regression that maximizes unbiased estimate of determination coefficient] // Ayvazyan S.A. *Prikladnaya ecometrica*. M.: Market DS, 2008, vol. 12, no. 4, pp. 71–83.
6. Berezin I.S., Zhidkov N.P., Metody vychisleniy [Methods of calculations]. Vol. 1, 2. M.: *Fizmatgiz*, 1962, 464 p.
7. Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M., Chislennyye metody [Numerical methods]. Red. by Tikhonov I.N., 2 ed. M.: *Fizmatlit: Lab. bazovykh dannykh*; SPb.: Nev. dialekt, 2002, 630 p.
8. Gel'fand I.M., Ceytlin M.L., DAN USSR, 1961, vol. 137, № 2, pp. 295–98.
9. Ershov E.B., Rasprostraneniye koeffitsienta determinatsii na obshchiy sluchay lineynoy regreessii, ocenivayemoy s pomosh'yu razlichnykh versiy metoda naimen'schikh kvadratov // CEMI RAN *Ekonomika i mat. metody*. M.: CEMI RAN, 2002, vol. 38, no. 3, pp. 107–120.
10. MAWI Working Group Traffic Archive. URL: <http://mawi.wide.ad.jp/mawi/>
11. Wireshark, May 2014, <http://www.wireshark.org>