

Реферат

Компьютерное моделирование кинетического и гидродинамического приближения сложных статистических систем

Перечень ключевых слов: нейтронное рассеяние, наносистемы и материалы, дифракция нейтронов, рентгеновская дифракция, нейтронная спектроскопия, камера высокого давления, импульсные источники нейтронов, конструкционные материалы, высокопрочные сплавы, нанотрубки, каркасно-нанокластерные бориды, углеволокно, высокотемпературные сверхпроводники, эластомеры. Объектами исследования и разработки в данной работе являются наносистемы и наноматериалы, твердые сплавы, функциональные материалы, в том числе каркасно-нанокластерные бориды, композиты из углеродных волокон, карбид кремния, высокотемпературные сверхпроводники нового поколения и родственные им соединения, моносилициды переходных металлов, сложные оксиды, кобальтиты.

Целью данной работы является получение новых знаний и результатов в области структурных и динамических свойств наносистем и наноматериалов, исследование наносистем и материалов методом рассеяния тепловых и эпитепловых нейтронов, рентгеновской дифракции, обеспечение научно-исследовательских работ, проводимых организациями Российской Федерации, с предоставлением им возможности использования методов научных исследований, разработанных или освоенных для уникальной установки – Нейтронного комплекса ИЯИ РАН.

Метод проведения работы: настоящая работа была выполнена при использовании нейтронных методик исследования конденсированных сред в сочетании с комплементарными рентгеновскими методами. Использовались нейтронная дифракция, нейтронная спектроскопия, рентгеновская дифракция, Мессбауэровская спектроскопия.

Результаты работы: На Нейтронном комплексе ИЯИ РАН, прочих нейтронных источниках, на рентгеновских дифрактометрах в ИЯИ РАН, на Мёссбауэровском спектрометре в ИЯИ РАН были исследованы структурные и динамические свойства материалов, в том числе наносистем, включающих в себя твердые сплавы с нановключениями, каркасно-кластерные бориды с высокими термоэлектрическими свойствами, высокотемпературные сверхпроводники нового поколения и родственные им системы, сложные оксиды на основе переходных металлов, композитные материалы на основе углеволокна для авиакосмических приложений, система углерод-кремний с высокими механическими качествами и химической стойкостью. Была проведена работа по дальнейшему совершенствованию экспериментальной базы Нейтронного комплекса ИЯИ РАН, предназначенной для нейтронной спектроскопии и нейтронной дифракции. В ходе работ по реализации задач этапа было привлечено в исследования по тематике Госконтракта несколько студентов и аспирантов.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: все нейтронные установки Нейтронного комплекса ИЯИ РАН основаны на

методике регистрации нейтронов по времени пролета. Особенности источника являются относительно жесткий нейтронный спектр и возможность вариации длительности импульса. Важной для повышения эффективности измерений особенностью рентгеновского оборудования ИЯИ РАН является наличие позиционно-чувствительного детектора (imageplate).

Степень внедрения: степень внедрения результатов НИР будет выяснена после завершения работ по Госконтракту.

Рекомендации по внедрению или итоги внедрения результатов НИР: рекомендации по внедрению результатов НИР будут сделаны после завершения работ по Госконтракту. Область применения: исследуемые наносистемы и материалы будут применяться в энергетике, научном приборостроении, химической промышленности, авиакосмической промышленности, атомной энергетике.

Экономическая эффективность или значимость работы: оценка экономической эффективности и значимости работы будет сделана после завершения работ по Госконтракту.

Прогнозные предположения о развитии объекта исследования: прогнозные предположения будут сделаны после завершения работ по Госконтракту.

Содержание

1	Введение	6
2	Кинетическое описание полидисперсной системы	10
2.1	Уравнения Больцмана	10
2.2	Существующие подходы к созданию всячины	10
3	Конструкторский раздел	14
3.1	Архитектура всячины	14
3.2	Подсистема всякой ерунды	14
3.2.1	Блок-схема всякой ерунды	14
4	Технологический раздел	16
5	Экспериментальный раздел	18
	Заключение	19
	Список использованных источников	20
А	Картинки	21
Б	Еще картинки	22

Глоссарий

Распределённый — Слово, которое нельзя употреблять. Но надо протестировать длинные строки в глоссарии.

Обозначения и сокращения

АИС — Автоматизированная информационная система. Но надо протестировать длинные строки в определениях.

1 Введение

В природе гранулярная материя является одним из самых распространенных типов вещества, начиная от песка под нашими ногами, сахара для чая, различных порошков для строительства и техногенного производства, заканчивая космической пылью в аккреционных дисках зарождающихся звездных и галактических системах. Гранулярная материя характеризуется в основном диссипативными свойствами при контактном взаимодействии составных частиц. Частный случай гранулярных систем, так называемый *гранулярный газ*, является объектом интереса в нашей работе [1]. Под газообразной мы будем подразумевать систему в которой все контактные взаимодействия бинарные, т.е. в любой момент времени во всех взаимодействиях участвуют только два объекта, а тройные, четверные и т.д. взаимодействия исключены. Таким образом, подобная система может быть описана классическими уравнениями Больцмана-Энскога.

Объектом наших исследований являются кольца Сатурна. Данный выбор был неслучаен, и был стимулирован успехом масштабного проекта NASA, Европейского Космического Агентства и Итальянского Космического Агентства – миссия Кассини-Гюйгенс. В рамках этого проекта, 15 октября 1997 года, на орбиту вокруг Сатурна был отправлен космический исследовательский аппарат Кассини. Целью данной миссии было исследование планеты Сатурн, его колец и лун. На борту космического аппарата находилась автоматическая станция Гюйгенс, предназначенная для посадки на Титан, крупнейший из лун Сатурна. 1 июля 2004 года, комплекс вышел на орбиту вокруг Сатурна. 25 декабря 2004 года, станция Гюйгенс отделилась от основного комплекса и 14 января 2005 года вошла в атмосферу Титана. Изначально миссия была запланирована до 2008 года, однако была несколько раз продлена, и в итоге 15 сентября 2017 года космический аппарат Кассини завершил свою миссию, пролетев в непосредственной близости от колец и вошел в атмосферу Сатурна. Пример снимка сделанного аппаратом Кассини в 2009 году показан на Рис. 1.1. Весь масштаб данной миссии можно привести в виде статистических данных (Табл. 1.1).

Таблица 1.1 — Итоговая статистика миссии Кассини-Гюйгенс по окончании 20 летнего периода активности

Общая стоимость проекта	около 3,26 миллиард долларов США
Длительность миссии	19 лет, 335 дней
Объем полученных научных данных	635 Гб
Найдено новых лун	6 наименованных
Количество стран участниц	27 стран со всего мира
Опубликовано научных публикаций	3 948
Сделано снимков	453 048

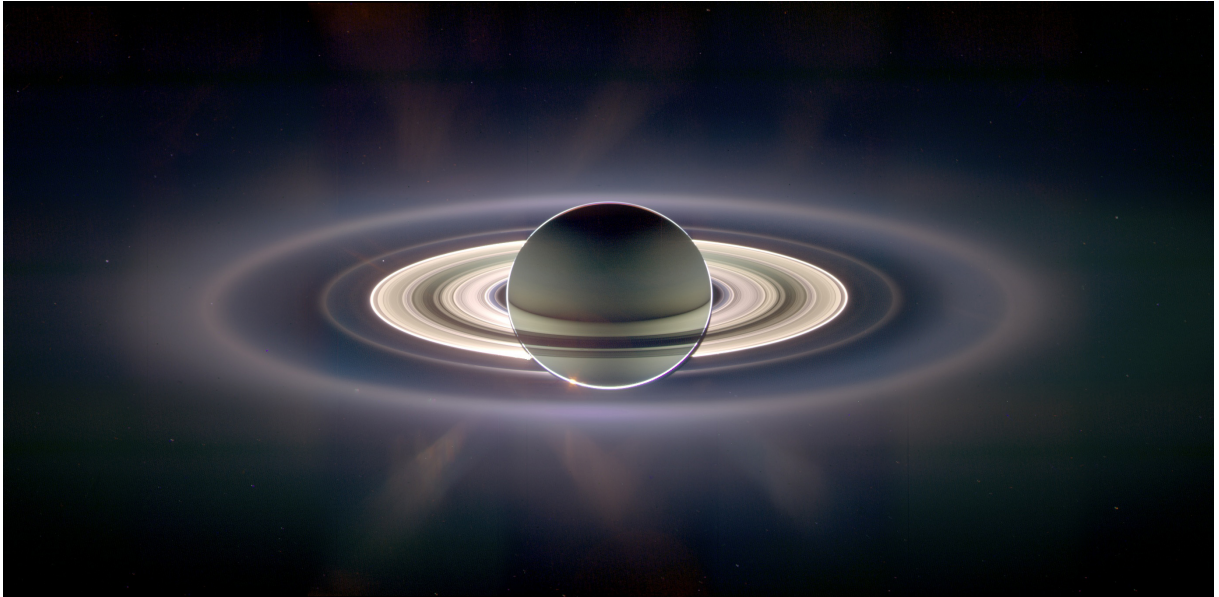


Рисунок 1.1 — Фотография Сатурна и его колец отправленная аппаратом Кассини в октябре 2009 года

Большая доля этих исследований посвящено изучению динамики и свойств колец Сатурна, которые являются ярким примером гранулярных газов в природе. Сами кольца состоят в основном из водяного льда и силикатных образований. Размеры частиц материала кольца составляют от микрометров до нескольких десятков метров. Объекты больших размеров, от нескольких сот метров до километров и более, классифицируются уже как отдельные луны Сатурна. Некоторые из подобных лун, как Пан и Дафнис (которые были обнаружены аппаратом Кассини), вращаются вокруг Сатурна на орбитах, находящихся внутри самих колец, имеют свое гравитационное поле которое серьезно воздействует на динамику мелких объектов кольца. Однако в нашей работе мы ограничимся системами, размеры составляющих частиц которых не превышают порядка нескольких метров. В этом случае можно исключить из рассмотрения гравитационные взаимодействия и сконцентрироваться только на контактных, механических взаимодействиях при описании динамики гранулярного газа.

Для простоты описания механики столкновения частиц газа, будем рассматривать их как сферические объекты с заданными параметрами как масса m , радиус r , модуль Юнга Y , коэффициент Пуассона η , поверхностная энергия (адгезивность) γ , коэффициент вязкой диссипации A . Обозначенные выше параметры будут использованы для построения компьютерной модели столкновений, однако для теоретического описания системы все механические свойства объединены в единый параметр, так называемый *коэффициент реституции* — ε . Для описания динамики сухих гранулярных газов, коэффициент реституции играет ключевую роль, и показывает количество диссипированной энергии при столкновениях. Математически описывается следующим образом:

$$g'_{12} = -\varepsilon g_{12} , \quad (1.1)$$

где g_{12} – относительная скорость частиц 1 и 2 до столкновения, g'_{12} – относительная скорость после столкновения. Коэффициент реституции в общем случае всегда лежит в пределах $0 \leq \varepsilon \leq 1$. При $\varepsilon = 0$ – мы имеем абсолютно неупругое столкновение, при $\varepsilon = 1$ – абсолютно упругое столкновение. В данной работе мы будем рассматривать только сухие гранулярные системы, т. е. такие системы для которых коэффициент адгезивности $\gamma = 0$. Таким образом, контактные взаимодействия частиц можно полностью описать двумя параметрами: r – линейный размер частицы, который характеризует массу ($m \propto r^3$), поверхностное сечение ($\sigma \propto r^2$) и т.д., и ε – коэффициент реституции, который описывает диссипативные свойства материала частицы. Мы будем предполагать, что материал частиц везде единообразен, и для всех столкновений ε будет одинаковый.

Основным свойством гранулярного газа является его диссипативность, и как результат его *гранулярная температура* имеет свойство всегда уменьшаться, т.е. предоставленный самому себе гранулярный газ, всегда будет *охлаждаться*. Данное явление носит название закона Хаффа:

$$T(t) = \frac{T_0}{(1 + t/\tau_0)^2}, \quad (1.2)$$

где

$$\tau_0^{-1} \propto n\sigma^2 (1 - \varepsilon^2) \sqrt{T_0}. \quad (1.3)$$

Таким образом, если в систему не подводить внешний источник энергии, то со временем гранулярный газ придет к состоянию с нулевой энергией. Здесь мы коротко упомянули понятие гранулярной температуры, по аналогии с температурой обычных систем, однако оно не является температурой материала частицы в обычном понимании. Более детально мы рассмотрим ее в основной части работы.

Следующим важным моментом является *полидисперсность* системы. До этого мы считали что все частицы в газе одинакового размера, однако в реальных системах планетарных колец, размеры частиц очень сильно варьируются. Данное свойство привносит в систему один существенный эффект: если рассматривать полидисперсную систему как смешение большого количества монодисперсных гранулярных газов с различными размерами, то парциальная температура каждого из этих газов становится отличной друг от друга. Чем больше разница между размерами частиц этих монодисперсных газов, тем больше их разница в гранулярной температуре. Конечно, без внешнего источника энергии, все эти температуры со временем сравняются и станут нулевыми. Однако планетарные кольца находятся в центральном гравитационном поле своей планеты, и на самом деле являются дисками с дифференциальным вращением, и гранулярная система подпитывается за счет гравитационной энергии своей планеты. Более подробно мы остановимся на данном явлении в основной части работы. Здесь же, укажем что за счет данной подкачки энергии, температуры всех отдельных частей системы остановятся на определенном и различном стационарном значении, что является одним из результатов нашей работы. А также, мы покажем что подобная разница в стационарных температурах системы, оказывает влияние

на радиальное распределение размеров частиц друг относительно друга. Данный эффект неодинакового распределения частиц по размерам относительно центрального поля хорошо виден на Рис. 1.2.

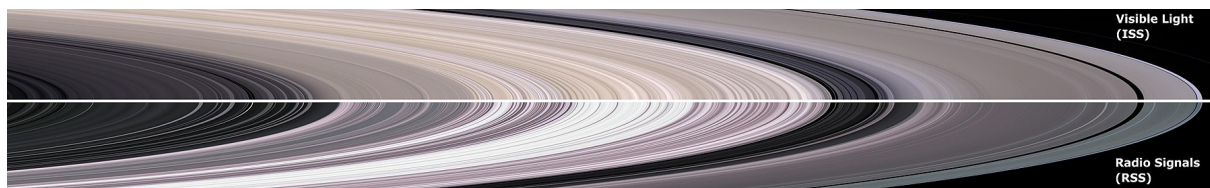


Рисунок 1.2 — Фотография колец Сатурна в радиальном срезе. Верхняя часть показана в оптическом диапазоне, нижняя в радиоволновом диапазоне, где цвета соотнесены с размерами частиц

2 Кинетическое описание полидисперсной системы

Для статистического описания неравновесной системы, мы будем исходить из кинетических уравнений Больцмана. Перед этим нам необходимо определить фазовое пространство в котором происходит эволюция динамики отдельно взятой частицы, а также более детально рассмотреть механику столкновений для составления интегралов столкновений.

2.1 Уравнения Больцмана

Динамика отдельно взятой частицы массы m описывается его векторами координат \mathbf{r} и скоростей \mathbf{v} в фазовом пространстве. В этом фазовом пространстве введем функцию распределения $f(m, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ которое имеет следующее важное свойство:

$$dN(m, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = f(m, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} , \quad (2.1)$$

где $dN(m, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ – функция числа частиц локализованных вокруг координаты \mathbf{r} и имеющих скорости в диапазоне от \mathbf{v} до $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$. Так как газообразные системы являются разреженными, то макропараметры системы могут быть определены как некие интегралы от одночастичной функции распределения.

Нулевой момент дает нам функцию количественной плотности частиц

$$n(m, \mathbf{r}) = \int f(m, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} , \quad (2.2)$$

либо функцию плотности масс

$$\rho(m, \mathbf{r}) = mn(m, \mathbf{r}) = \int m f(m, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} . \quad (2.3)$$

В [?] указано, что...

Кстати, про картинки. Во-первых, для фигур следует использовать [ht]. Если и после этого картинки вставляются «не по ГОСТ», т.е. слишком далеко от места ссылки, — значит у вас в РПЗ **слишком мало текста!** Хотя и ужасный параметр !ht у окружения figure тоже никто не отменял, только при его использовании документ получается страшный, как в ворде, поэтому просьба так не делать по возможности.

2.2 Существующие подходы к созданию всячины

Известны следующие подходы...

а) Перечисление с номерами.

б) Номера первого уровня. Да, ГОСТ требует именно так — сначала буквы, на втором уровне — цифры. Чуть ниже будет вариант «нормальной» нумерации и советы по её изменению. Да, мне так нравится: на первом уровне выравнивание элементов как у обычных абзацев. Проверим теперь вложенные списки.

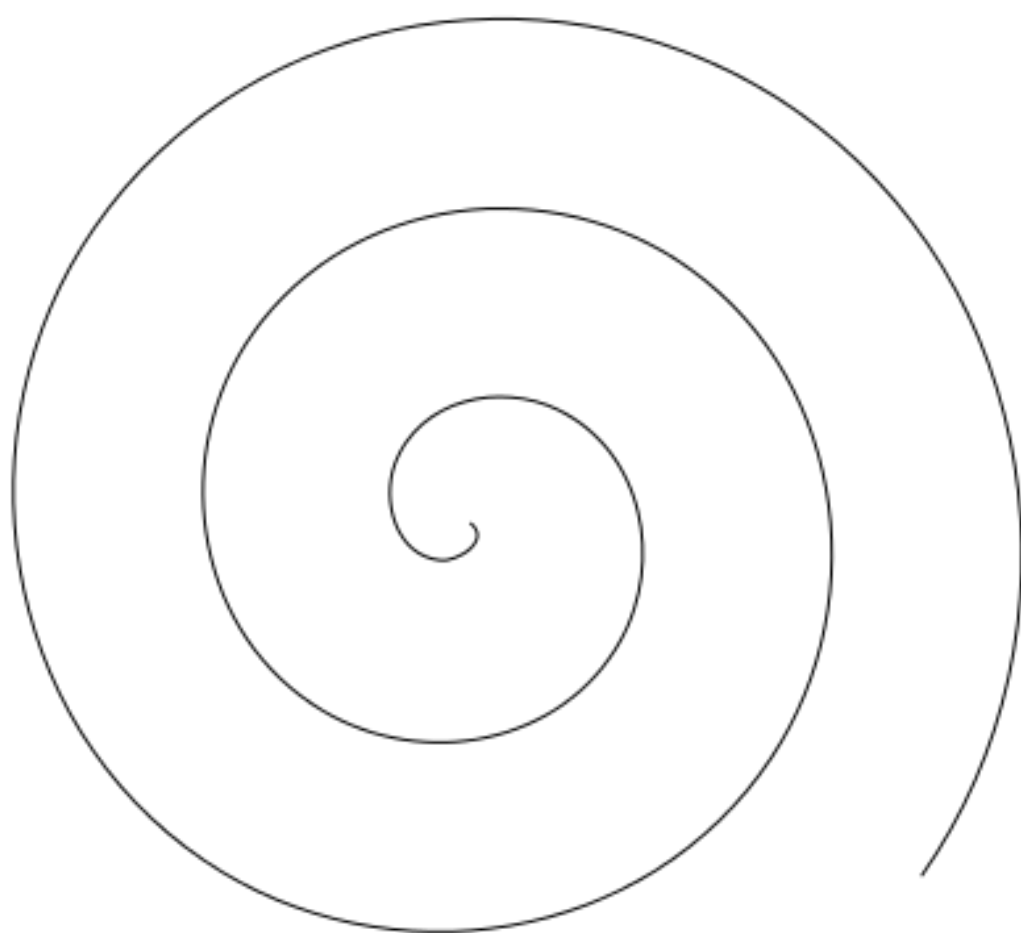


Рисунок 2.1 — Рисунок

Можно также использовать уменьшенный шрифт — но, пожалуйста, тогда уж во **всей** таблице сразу.

Таблица 2.2 — Пример длинной таблицы с длинным названием на много длинных-длинных строк

Вид шума	Громкость, дБ	Комментарий
Порог слышимости	0	
Шепот в тихой библиотеке	30	Конечно, это было до эпохи мобильных (внутри машины)
Обычный разговор	60-70	
Звонок телефона	80	
Уличный шум	85	
Гудок поезда	90	
Шум электрички	95	
Порог здоровой нормы	90-95	Длительное пребывание на более громком шуме может привести к ухудшению слуха
Мотоцикл	100	(модель бензокосилки) (Doom в целом вреден для здоровья)
Power Mower	107	
Бензопила	110	
Рок-концерт	115	
Порог боли	125	feel the pain
Клепальный молоток	125	(автор сам не знает, что это)
Порог опасности	140	Даже кратковременное пребывание на шуме большего уровня может привести к необратимым последствиям
Реактивный двигатель	140	Необратимое полное повреждение слуховых органов Интересно, почему?..
	180	
Самый громкий возможный звук	194	

3 Конструкторский раздел

В данном разделе проектируется новая всячина.

3.1 Архитектура всячины

Проверка параграфа. Вроде работает.

Вторая проверка параграфа. Опять работает.

Вот.

— Это список с «палочками».

— Хотя он и не по ГОСТ, кажется.

1) Поэтому для списка, начинающегося с заглавной буквы, лучше список с цифрами.

Формула 3.1 совершенно бессмысленна.

$$a = cb \quad (3.1)$$

Окружение cases опять работает (см. 3.2), спасибо И. Короткову за исправления..

$$a = \begin{cases} 3x + 5y + z, & \text{если хорошо} \\ 7x - 2y + 4z, & \text{если плохо} \\ -6x + 3y + 2z, & \text{если совсем плохо} \end{cases} \quad (3.2)$$

3.2 Подсистема всякой ерунды

Культурная вставка dot-файлов через утилиту dot2tex (рис. 3.1).

3.2.1 Блок-схема всякой ерунды

Кстати о заголовках

У нас есть и **subsubsection**. Только лучше её не нумеровать.

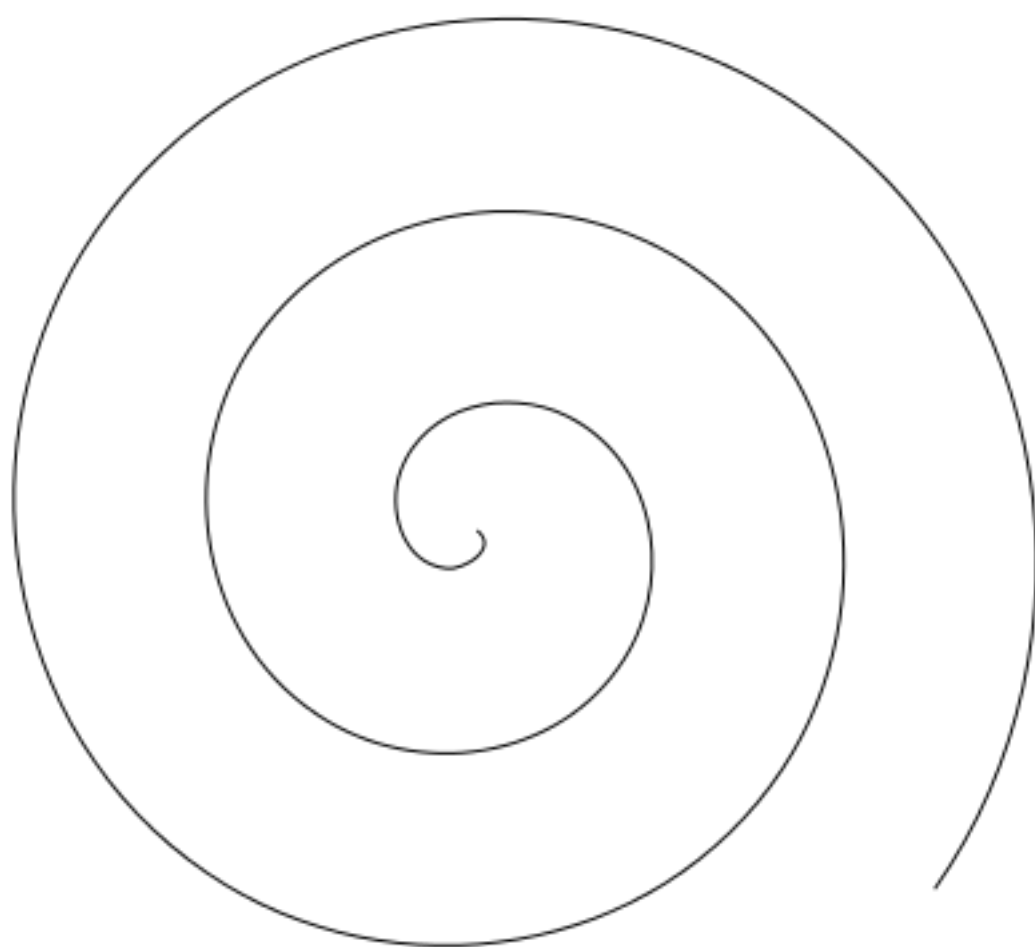


Рисунок 3.1 — Рисунок

4 Технологический раздел

В данном разделе описано изготовление и требование всячины. Кстати, в LaTeX нужно эскейпить подчёркивание (писать «some_function» для **some_function**).

Для вставки кода есть пакет **listings**. К сожалению, пакет **listings** всё ещё работает криво при появлении в листинге русских букв и кодировке исходников utf-8. В данном примере он (увы) на лету конвертируется в koi-8 в ходе сборки pdf.

Есть альтернатива **listingsutf8**, однако она работает лишь с **\lstinputlisting**, но не с окружением **\lstlisting**

Вот так можно вставлять псевдокод (питоноподобный язык определен в **listings.inc.tex**):

Листинг 4.1 — Алгоритм оценки дипломных работ

```
1 def EvaluateDiplomas():
2     for each student in Masters:
3         student.Mark ← 5
4     for each student in Engineers:
5         if Good(student):
6             student.Mark ← 5
7         else:
8             student.Mark ← 4
```

Еще в шаблоне определен псевдоязык для BNF:

Листинг 4.2 — Грамматика

```
1 ifstmt → "if" "(" expression ")" stmt |
2         "if" "(" expression ")" stmt1 "else" stmt2
3 number → digit digit *
```

В листинге 4.3 работают русские буквы. Сильная магия. Однако, работает только во включаемых файлах, прямо в **TeX** нельзя.

Листинг 4.3 — Пример (**test.c**)

```
1 #include <stdio.h>
2 int main()
3 {
4     return 0;
5 }
```

Можно также использовать окружение **verbatim**, если **listings** чем-то не устраивает. Только следует помнить, что табы в нём «съедаются». Существует так же команда **\verbatiminput** для вставки файла.


```
a_b = a + b; // русский комментарий
if (a_b > 0)
    a_b = 0;
```

5 Экспериментальный раздел

В данном разделе проводятся вычислительные эксперименты. А на рис. 5.1 показана схема мыслительного процесса автора...

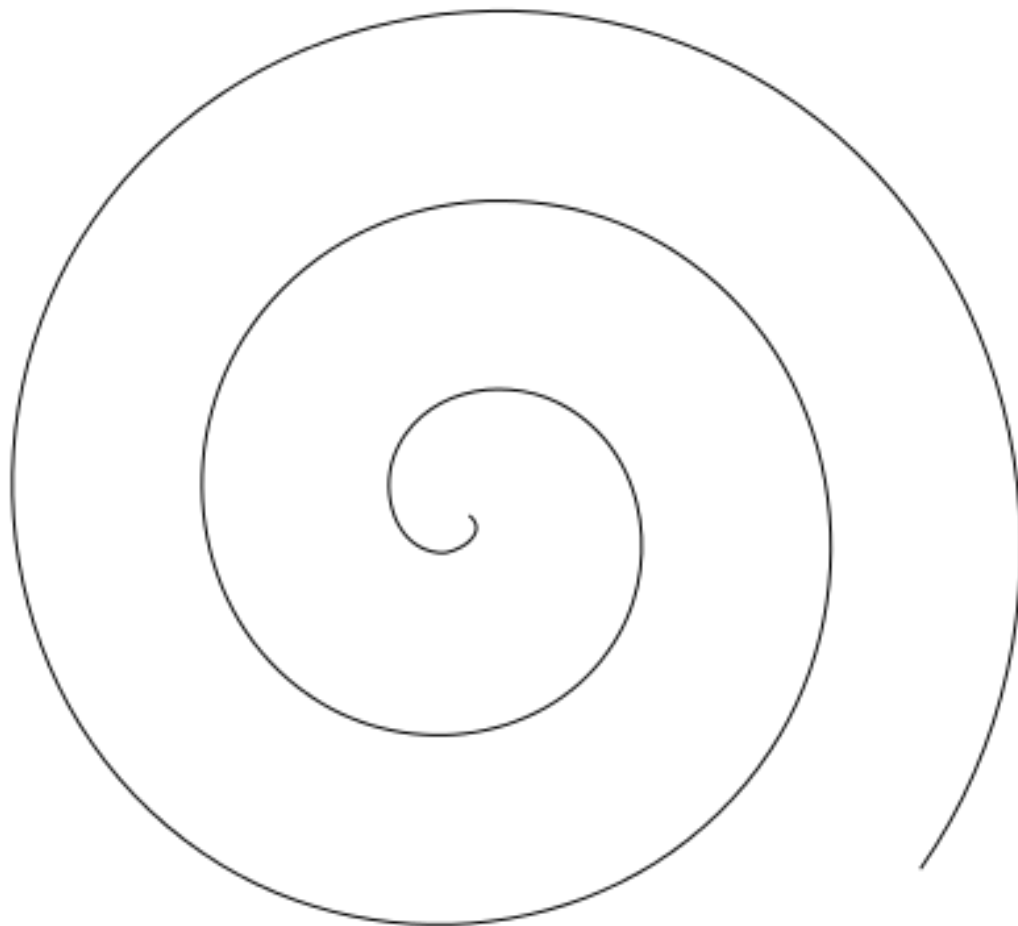


Рисунок 5.1 — Как страшно жить

Заключение

В результате проделанной работы стало ясно, что ничего не ясно...

Список использованных источников

1. *Brilliantov, N. V.* Kinetic Theory of Granular Gases / N. V. Brilliantov, T. Pöschel.
— 1st edition. — Oxford University Press, 2004.

Приложение А Картинки

Рисунок А.1 — Картинка в приложении. Страшная и ужасная.

Приложение Б Еще картинки

Рисунок Б.1 — Еще одна картинка, ничем не лучше предыдущей. Но надо же как-то заполнить место.