

где $\Delta \ln(H - X(t_j)) = \ln(H - X(t_j)) - \ln(H - X(t_{j-1}))$, $j \in \{1, \dots, n\}$.

Причем оценка $\hat{\mu}$ – несмещенная: $E\{\hat{\mu}\} = \mu$, $\forall n$, и является состоятельной в сред-неквадратическом смысле [3] :

$$E\{(\hat{\mu} - \mu)^2\} = D\{\hat{\mu}\} = \frac{\sigma^2}{t_n - t_0} \rightarrow 0, \quad t_n - t_0 \rightarrow +\infty,$$

а оценка $\hat{\sigma}^2$ – асимптотически несмещенная:

$$E\{\hat{\sigma}^2\} = \frac{\sigma^2(n-1)}{n} \rightarrow \sigma^2, \quad n \rightarrow +\infty.$$

Согласно результатам теорем 1 и 2, для статистических оценок (5), построенных в рамках предложенной здесь модели (3), удалось установить дополнительные оптимальные свойства, тогда как для модели Орнштейна – Уленбека (2) такие исследования затруднительны в силу вида оценок (4) (случайный знаменатель в выражении для $\bar{\mu}$).

Литература

1. Маталыцкий М. А. *Вероятность и случайные процессы*. Гродно, ГрГУ, 2005.
2. Медведев Г. А. *Математические модели финансовых рисков*. Часть 1. Мн., БГУ, 1999.
3. Харин Ю. С., Жук Е. Е. *Математическая и прикладная статистика*. Мн., БГУ, 2005.

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ: ВРЕМЕНА ЗАПАЗДЫВАНИЯ И СОПРЯЖЕННЫЕ УРАВНЕНИЯ

Ю. В. ЗАЙКА, Е. П. БОРМАТОВА (ПЕТРОЗАВОДСК, РОССИЯ)

Перспективы водородной энергетики и проблема защиты от водородной коррозии инициируют исследования в области моделирования переноса водорода в конструкционных материалах. Экспериментальный метод проницаемости [1] состоит в следующем. Мембрана толщины ℓ из исследуемого материала (металла или сплава) является перегородкой вакуумной камеры. При фиксированной температуре образца с входной стороны скачкообразно создается давление $\bar{p}_0$ молекулярного водорода. С выходной стороны производится вакуумирование и с помощью масс-спектрометра определяется плотность выходного десорбционного потока $J_\ell(t)$, t — время. Модификация эксперимента: по достижении стационара $J(t) \approx \bar{J} = \text{const}$, $t > t_*$, на входе резко увеличиваем давление до значения $p_0^+ > \bar{p}_0$ и дожидаясь следующего стационара $J(t) \approx \bar{J}^+$, $t > t^* > t_*$. Поверхностные процессы адсорбции и растворения учитываем согласно [2]. Краевая задача с поверхностной десорбцией (модель I):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= D(T) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad (t, x) \in (0, t_*) \times (0, \ell), \quad c(0, x) = 0, \quad x \in [0, \ell], \quad P \equiv \mu s(T) \bar{p}_0, \\ \frac{dq_0}{dt} &= P - b(T) q_0^2(t) + D(T) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad \frac{dq_\ell}{dt} = -b(T) q_\ell^2(t) - D(T) \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=\ell}, \quad t \in [0, t_*], \\ c_0(t) &\equiv c(t, 0) = g(T) q_0(t), \quad c_\ell(t) \equiv c(t, \ell) = g(T) q_\ell(t). \end{aligned}$$

Здесь $c(t, x)$ — концентрация растворенного атомарного водорода; $q_{0,\ell}(t)$ — поверхностные концентрации; μ — кинетическая константа; $s(T)$ — коэффициент прилипания водорода из газовой фазы к поверхности; $b(T)$ — коэффициент десорбции; $g(T)$ — параметр соответствия поверхностной и объемной концентраций (коэффициент быстрого растворения). Смысл граничных условий: дисбаланс потоков адсорбции, десорбции и диффузии идет на накопление атомов Н на поверхности. Параметры зависят от температуры по закону Аррениуса, например, $D(T) = D_0 \exp\{-E_D/[RT]\}$.

В качестве альтернативных (вырожденных по отношению к исходной) рассматриваются модель II с фиксированными концентрациями $c_0(t) \equiv c(t, 0) = \bar{c}_0 = \text{const}$, $c_\ell(t) \equiv c(t, \ell) = 0$, и модель III с объемной десорбцией и граничными условиями

$$P - \tilde{b}(T)c_0^2(t) = -D(T)\frac{\partial c}{\partial x}\Big|_{x=0}, \quad \tilde{b}(T)c_\ell^2(t) = -D(T)\frac{\partial c}{\partial x}\Big|_{x=\ell}, \quad \tilde{b} = bg^{-1}.$$

Решается задача параметрической идентификации: по информации $J(t)$ требуется оценивать значения D , b , g , s при заданных $T = \bar{T}$. Вырождения связаны с существенным преобладанием одних факторов переноса над другими. В физически оправданном диапазоне параметров по классической кривой проницаемости невозможно разделить модели I, II и III (по способности аппроксимировать экспериментальные данные с погрешностью 10–15%). Информации о двух переходных процессах в соответствии с указанной модификацией эксперимента достаточно для решения задачи. В алгоритме идентификации используется время запаздывания (точка пересечения с осью времени асимптоты графика количества водорода, прошедшего сквозь мембрану) и техника сопряженных уравнений [3] (интегральные операторы обработки измерений).

Для качественных выводов сопоставимось диффузии и поверхностных процессов как лимитирующих факторов описывается в терминах диффузионного $\xi = \ell^2/2D$ и поверхностного $\eta = 2/\sqrt{bP}$ времен. Последнее характеризует скорость насыщения входной поверхности в отсутствие существенного диффузионного оттока в объем. Отклонение модели I от II можно охарактеризовать величиной $\delta\sigma \equiv \delta t_0 + \delta\Theta$, $\delta t_0 = (t_0 - t_0^I)/\xi$. Здесь t_0 — время запаздывания, значения которого определяются по результатам эксперимента. «Всплеск-время» Θ , характеризующее начальный всплеск входного диффузионного потока, вычисляется по формуле

$$\Theta = \bar{J}^{-1} \int_0^{t_*} [F_0(\tau) - \bar{J}] d\tau, \quad F_0(t) \equiv -D\frac{\partial c}{\partial x}\Big|_{x=0}, \quad \delta\Theta = (\Theta - \Theta^I)/\xi, \quad \Theta^I = \ell^2/3D.$$

При переходе через значение $\nu \equiv \sqrt{g\ell} = 1$ наблюдается перегиб (седловой эффект) зависимости δt_0 от отношения времен η/ξ . При этом $\delta\Theta$ растет монотонно с увеличением ν до значения насыщения $\delta\Theta^{III}$. На рис. 1, 2 $\ell = 0.01$, $D = 10^{-6}$, значения ν — на врезках. При фиксированном g «производная выхода по входу» $\delta t_0/\delta\Theta$ слабо зависит от η , возрастая с ростом g от нуля значения насыщения в модели III.

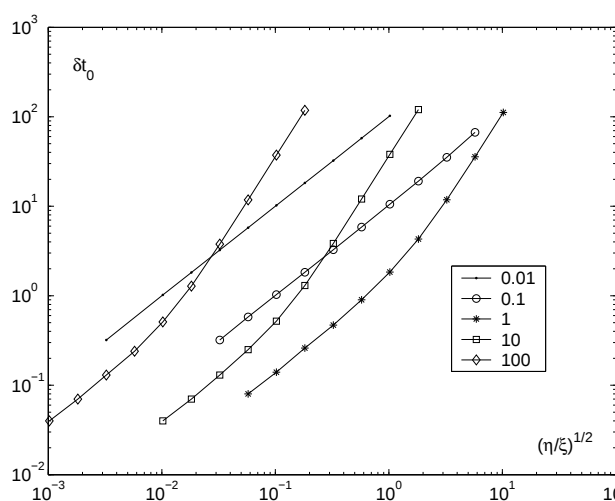


Рис. 1. Зависимость δt_0 от $\sqrt{\eta/\xi}$
(перегиб при $\nu = 1$)

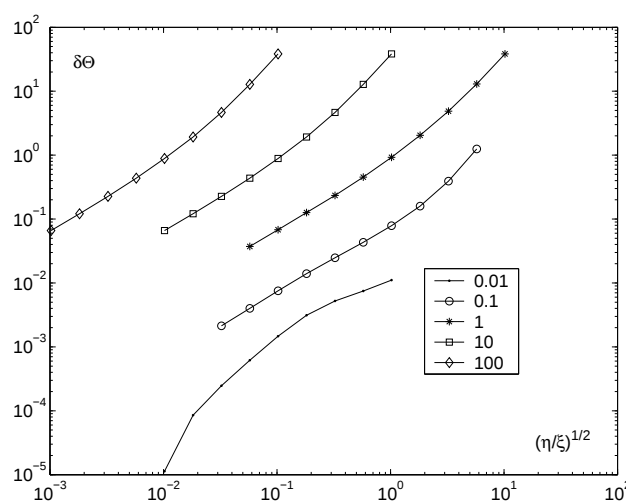


Рис. 2. Зависимость $\delta\Theta$ от $\sqrt{\eta/\xi}$
(монотонность по ν)

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 09-01-00439).

Литература

1. Кунин, Л.Л. *Проблемы дегазации металлов* / Кунин Л. Л., Головин А. И., Суровой Ю. И. Хохрин В. М. М.: Наука, 1972.
2. *Взаимодействие водорода с металлами* / Ред. А. П. Захаров. М.: Наука, 1987. С. 143–206.
3. Марчук Г.И. *Сопряженные уравнения и анализ сложных систем*. М.: Наука, 1992.

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И ЭФФЕКТИВНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА НЕФТЕПЕРЕРАБАТЫВАЮЩЕМ ЗАВОДЕ

В. А. Ирхин (Минск, Беларусь), О. Н. Гайдук (Мозырь, Беларусь)

Предупреждение аварийных ситуаций и эффективное управление технологическими системами являются актуальными задачами нефтехимической отрасли. Качественное обучение операторов управления технологическими установками навыкам оптимальной и безаварийной эксплуатации технологических аппаратов и установок служит одним из наиболее важных инструментов повышения промышленной безопасности вышеуказанных объектов и снижения затрат на их функционирование [1,2]. В связи с этим одним из приоритетных направлений научно-технической деятельности в Республике Беларусь является разработка динамических компьютерных тренажеров для операторов технологических процессов в нефтехимии и нефтепереработке. Разработка таких тренажеров невозможна без моделирования физико-химических процессов в технологических установках.

В работе строятся математические модели неуставившегося неизотермического течения двухфазной среды для трубопровода, теплообменника, холодильника, печи,