19. ***Nielsen, H. H.*** The vibration-rotation energies of molecules and their spectra in the infrared / H. H. Nielsen // Handbook der Physik. – 1957. – Vol. 37, № 1. – P. 173–313.
20. ***Yoshida, H.*** A New Approach to Vibrational Analysis of Large Molecules by Density Functional Theory: Wavenumber-Linear Scaling Method / H. Yoshida, K. Takeda, J. Okamura, A. Ehara, H. Matsuura // J. Phys. Chem. A. – 2002. – Vol. 106, № 14. – P. 3580–3586.

УДК 539.374

ВЛИЯНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ПРОЧНОСТЬ И УСТОЙЧИВОСТЬ ПОДЗЕМНЫХ ТРУБОПРОВОДОВ, НЕФТЯНЫХ СКВАЖИН И РЕЗЕРВУАРОВ СО ВЗРЫВООПАСНЫМИ ПРОДУКТАМИ

Н.Т. Курбанов, В.Г. Бабаджанова, Ш.А. Керимова

Настоящая работа посвящена применению статистических методов в расчетах на прочность и надежность твердых деформируемых систем, находящихся под действием случайных внешних воздействий, в основном применительно к машиностроительным конструкциям. К случайным воздействиям относятся нагрузки, обусловленные атмосферной турбулентностью и землетрясением, акустическое давление, нагрузки от морского волнения, силовые и температурные воздействия при проведении разнообразных технологических процессов и т.д.

Ключевые слова: *сейсмодинамика, стохастически, корреляционный, неоднородный, случайная гауссовская функция, многообразие.*

Key words: *seism dynamics, stochastic, correlation, non-uniform, casual qausov`s function, variety.*

Необходимость более глубокого изучения явлений землетрясения, других природных катастроф и т.д. требует учета большого количества действующих факторов, новых связей и взаимодействий, сопровождающих каждое рассматриваемое явление, требует исследования новых задач в теоретическом и прикладном аспектах. Построение и последующее изучение математических моделей в сейсмодинамике требует, с одной стороны, глубоких знаний физической природы рассматриваемых процессов, а с другой – научно-обоснованного и умелого применения строгих математических методов, позволяющих проводить широкие теоретические исследования этих процессов. Одной из таких задач является изучение случайных волновых полей в случайно-неоднородных средах. Необходимость создания более надежных, чем существующие в настоящее время, методов расчета тел и конструкций с учетом их реальных свойств и реальных условий эксплуатации. Обычно применяемый детерминированный метод расчета является первым и во многих случаях недостаточным приближением. Недостатки детерминированного подхода в практике расчетов на прочность, например, покрываются назначением коэффициентов запаса, которые во многих случаях выбираются без достаточных обоснований и их значения не являются оптимальными. Это приводит либо к неиспользованным резервам прочности в реализуемых конструкциях, либо к преждевременному их разрушению. Поэтому возрастает значение научного прогноза и роль статистических методов исследования соответственно. Среди большого многообразия статистических задач механики твердых деформируемых тел важную роль играют, в частности, задачи о реакции механических систем на случайные внешние воздействия. Настоящая работа посвящена применению статистических методов в расчетах на прочность и надежность твердых деформируемых систем, находящихся под действием случайных внешних воздействий, в основном применительно к машиностроительным конструкциям. К случайным воздействиям относятся нагрузки, обусловленные атмосферной турбулентностью, акустическое давление, нагрузки от морского волнения, силовые и температурные воздействия при проведении разнообразных технологических процессов и т.д.

При теоретических исследованиях случайные нагрузки будем разделять на три больших класса: а) статические; б) квазистатические; в) динамические. Под квазистатическими понимаются нагрузки, являющиеся функциями времени, не изменяющиеся на заметную величину за время, значительно превышающее периоды собственных колебаний рассматриваемого тела. В этом случае ускорениями точек тела можно пренебречь и рассматривать задачу в статической постановке, причем время в уравнения задачи входит как параметр. При динамических нагрузках необходимо учитывать силы инерции.

Можно предложить следующую классификацию нагрузок внутри каждого из указанных выше трех классов: однопараметрические, n-параметрические (n = 2, 3, 4…), распределенные. Случайные статические однопараметрические нагрузки (сосредоточенная сила N, равномерно распределенное давление ρ и т.п.) задаются одним параметром, являющимся случайной величиной; n-параметрические – совокупностью в общем случае коррелированных, случайных величин; распределенные – случайными функциями пространственных координат и времени.

Исследование реакции деформируемых систем на случайные динамические нагрузки представляет большие трудности. Подавляющее большинство работ этого направления посвящено расчетам колебаний упругих балок и пластин при случайных нагрузках, задаваемых в виде случайных функций времени.

Задача построения вероятностных мер, соответствующих случайным волновым полям в неоднородных средах, представляет собой одну из наиболее важных проблем современной прикладной механики. Она возникает, в частности, при исследовании реальных физических полей, возникающих во время землетрясении, в теории распространения волн в турбулентных средах при решении задач теории случайных колебаний механических систем с распределенными параметрами и т.д. Исследование этих задач приводит к необходимости построения решения волнового уравнения, характеризуемого наличием случайных начальных условий, случайной правой части и случайных коэффициентов. Под решением волнового уравнения при заданной совокупности случайных функций будем понимать вероятностную меру случайного поля, удовлетворяющего волновому уравнению и присоединенным к нему начальным граничным условиям. В представленной работе рассматривается задача сейсмодинамики в более общей постановке, в которой случайная сейсмическая волна распространяется в стохастически неоднородной среде. Наличие стохастической неоднородности приводит к тому, что даже неслучайные (детерминированные) внешние и начальные возмущения порождают некоторое случайное волновое поле в неоднородной среде. Будем характеризовать свойства такой среды с помощью вероятностной меры, соответствующей фундаментальному решению задачи Коши для волнового уравнения со случайными коэффициентами.

Под фундаментальным решением задачи Коши для волнового уравнения будем понимать обобщенную случайную функцию $U(r,t)$, удовлетворяющую уравнению:

$$\frac{\partial^2 U(r,t)}{\partial t^2} - C^2(r)\Delta U(r,t) = 0, \qquad r \in R, \tag{1}$$

с начальными условиями:

$$U(r,0) = 0, \qquad \frac{\partial^2 U(r,t)}{\partial t^2}\Big|_{t=0} = \delta(r), \tag{2}$$

где U – радиальное смещение частиц среды при землетрясении, $\delta(r)$ – импульсивная функция, характеризующая очаг землетрясения.

Предположим, что

$$C^2(r) = C_0^2 + \varepsilon C_1^2(r),$$

где ε – малый параметр; $C_1(r)$ – случайная неотрицательная функция с характеристическим функционалом $\varphi(Z(r))$.

Интегро-дифференциальное уравнение, эквивалентное рассматриваемой задаче, имеет вид:

$$U(r,t) = t\delta(r) + C_0^2 \int_0^t (t-\delta)\Delta U(r,s)ds + \varepsilon C_1(r) \int_0^t (t-s)\Delta U(r,s)ds \tag{3}$$

Пусть $f_m(v_0(r,t),\dots\dots, v_m(r,t))$ – последовательность характеристических функционалов, соответствующих набору случайных функций $\{U_0(r,t),\dots\dots,U_m(r,t)\}$. Последовательность $f_m(v_0(r,t),\dots\dots,v_m(r,t))$ характеризует собой приближение к характеристическому функционалу фундаментального решения задачи Коши для волнового уравнения (1) с начальными условиями (2). Обозначая

$$\Phi(r,t) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_R \exp\left(-ixp \frac{\sin C_0 |x| t}{C_0 |x|}\right) dx \tag{4}$$

в соответствии с этим находим нулевое приближение:

$$f_0(v_0(r,t)) = \exp\left(i \int_R \int_T \Phi(\xi,\eta) v_0(\xi,\eta) d\xi d\eta\right) \tag{5}$$

Первое приближение для функционального характеристического решения задачи Коши получаем:

$$f_1(v_0(r,t), v_1(r,t)) = f_0(r,t)\varphi_2(z) \tag{6}$$

где

$$Z = \int_0^x \varphi_1(r,t)\Delta\Phi(r,t)dt; \quad \varphi_1(r,t) = \int_0^x (z-t) Z_1(r,t)ds \tag{7}$$

Здесь $Z_1(r,t)$ – характеристический функционал случайной функции $C_1(r)$.

Рассмотрим задачу о нахождении первого приближения для характеристического функционала случайного волнового поля в стохастически неоднородной среде при наличии неслучайных, ненулевых внешних и начальных возмущений:

$$U(r,0) = b_0(r); \qquad \frac{\partial U(r,t)}{\partial t}\Big|_{t=0} = b_1(r) \tag{8}$$

Тогда при нулевом приближении

$$f_0(v_0(r,t)) = \exp\left(-i\left(b_0(r), \frac{\partial \varphi_0(r,t)}{\partial t}\Big|_{t=0}\right) + i(b_1(r), \varphi_0(r,0))\right) \tag{9}$$

Используя обозначение (6), получаем первое приближение для характеристического функционала случайного волнового поля, которое имеет следующий вид:

$$f_1(v_0(r,t), v_1(r,t)) = f_0(\ v_0(r,t))\varphi_2(z_1)\ , \tag{10}$$

где

$$z_1 = \int_0^\infty \varphi_1(r,t)\Delta\Phi_0(r,t)dt; \quad \Phi_0(r,t) = \int_{R^n} \frac{\partial \Phi(\eta,t)}{\partial t} b_0(r)d\eta + \int_{R^n} \Phi(\eta,t) b_1(r)d\eta, \tag{11}$$

т.е. выражается через значения характеристического функционала случайной неоднородности среды. Более сложной оказывается задача о нахождении первого приближения для характеристического функционала волнового поля в стохастически неоднородной среде при наличии случайных начальных и внешних возмущений. В качестве примера предположим, что начальные возмещения отсутствуют, а внешнее возмущение представляет собой случайную гауссовскую функцию, независимую от $C_1(r)$, с нулевым математическим ожиданием и корреляционным оператором K. При введенных предположениях находим:

$$\varphi_0 = (Z_0(r)\ldots\ldots, Z(r,t)) = e^{-\frac{1}{2}(KZ,Z)}\varphi_2(Z_2(r)), \tag{12}$$

или

$$f_0 = (v_0(r,t)) = e^{-\frac{1}{2}(Kv_1,v_1)}, \tag{13}$$

где

$$v_1(r,t) = \int_{R^n}\int_t^\infty \Phi(q-r,s-t)v_0(q,s)dqds \tag{14}$$

Первое приближение будет иметь вид:

$$f_1(v_0(r,t),v_1(r,t)) = f_0(\ v_0(r,t))N(r,t) \tag{15}$$

Функция $N(r,t)$ зависит от $\Phi(r,t)$, $v_1(r,t)$ сложным образом, и ее выражение из-за громоздкости здесь не приводится. Интегрирование в этих выражениях производится по обобщенным мерам.

Библиографический список

1. ***Гасанов, А. Б.*** Исследование реакции вязкоупругих систем на случайные воздействия / А.Б. Гасанов // Известия НА Азербайджанской Республики. – 2005. – № 1. – С. 112–117. – (Сер. физико-технических и математических наук).

2. ***Гасанов, А. Б.*** Исследование случайных волновых полей сейсмодинамики с применением вероятностных мер // А. Б. Гасанов, А. Б. Садыхов // Известия АН Азербайджанской Республики. – 2006. – Т. 23, № 2. – С. 52–55. – (Сер. физико-технических математических наук).

3. ***Гасанов, А. Б.*** Реакция механических систем на нестационарные внешние воздействия / А. Б. Гасанов. – Баку : Элм, 2004. – 247 с.

4. ***Курбанов, Н. Т.*** Кручение вязкоупругой цилиндрической оболочки / Н. Т. Курбанов // Материалы IV Республиканской конференции по математике и механике. – Баку, 1983.

5. ***Работнов, Ю. Н.*** Элементы наследственнной механики твердых тел / Ю. Н. Работнов. – М. : Наука, 1977.

УДК 539.193/.194;535.33/.34

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ 1,4-ЦИКЛОГЕКСАДИЕНА И ЕГО КИСЛОРОДОЗАМЕЩЕННЫХ АНАЛОГОВ

Л.М. Элькин, Е.А. Джалмухамбетова, И.И. Гордеев

Выполнен расчет параметров адиабатического потенциала 1,4-циклогексадиена, 4Н-пирана и диоксина в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний. Построены структурно-динамические модели исследуемых соединений, выяснено влияние ангармонических резонансов на сдвиг полос фундаментальных колебаний.

***Ключевые слова**: 1,4-циклогексадиен, 4Н-пиран, диоксин, адиабатический потенциал, молекулярное моделирование, неэмпирические методы, DFT, колебательный спектр, ИК-спектр.*

***Key words**: 1,4-cyclohexadiene, 4H-pyran and dioxin, adiabatic potential, molecular modeling, ab initio methods, DFT, vibrational spectra, IR-spectra.*