Начальные условия для системы уравнений будут следующими: значения переменных $v(t)$, $L(t)$, $x(t)$, $\dot{x}(t)$, соответствующие концу для третьего этапа погружения.

После остановки снаряда в грунте наступает пятый этап погружения, при котором платформа продолжает колебательное движение, описываемое задачей Коши

$$\ddot{x} + \frac{ab\rho}{M}\dot{x} + \frac{\rho gab}{M}x = 0.$$

Начальные условия для вышеприведенного уравнения будут следующими: $x(t) = L_n$, $\dot{x}(t) = V$, где t – момент времени конца четвертого этапа.

Рассмотрим пример решения задачи для конкретного случая. В качестве примера взяты модернизированная пушка М-46 (М-47) и понтон, соответствующий платформе.

Для решения поставленной задачи используем численные методы, метод Рунге-Кутта 2-го порядка. Для расчетов воспользуемся пакетом MathCad.

В результате расчетов получены следующие характеристики: заглубление строительного элемента в грунт равно L = 3,373 м, максимальный подъема платформы: L = 0,07 м. Полученные результаты показывают возможность застреливания на достаточную глубину в дно водоема (до 3,5 м) строительных элементов из откатных артиллерийских орудий, расположенных на понтонах, находящихся на водной поверхности. Способ застреливания строительных элементов с понтонов предлагается использовать при возведении легких причалов, пристаней и небольшого водного строительства.

Список литературы

1. Серебряков М.Е. Внутренняя баллистика ствольных систем и пороховых ракет. – М.: Оборонгиз, 1962. – 703 с.

2. Пенский О.Г. Сопряженные модели динамики импульсно-тепловых машин и проникания недеформируемых тел в сплошную среду: монография / В.В. Маланин, О.Г. Пенский. – Пермь: Перм. ун-т, 2007. – 199 с.

Химические науки

ПЕРСПЕКТИВЫ КОМПЬЮТЕРИЗАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Танганов Б.Б., Крупенникова В.Е.

Восточно-Сибирский государственный технологический университет, Улан-Удэ, e-mail: tanganov@rambler.ru

Бурный рост компьютерных и информационных технологий создал благоприятные предпосылки для широкой математизации и компьютеризации химических процессов и технологий, основными заказчиками, потребителями и эксплуатантами которых являются специалисты в области теории и практики физической и аналитической химии.

Арсенал применения компьютеров весьма широк и обширен: автоматический сбор, обработка, запоминание и поиск данных, усиление отклика измерительной аппаратуры, управление самим процессом, например, анализ, классификация и идентификация соединений, прогноз методик и свойств исследуемых систем, функции экспертов в определенных областях химического знания, в частности, в судебной медицине.

Очень часто традиционные классические методы анализа, требующие больших затрат труда, времени, уникального оборудования, дорогих реактивов, могут быть заменены на косвенные методы с применением компьютеров, которые гораздо быстрее и дешевле, позволяют не только интерпретировать результаты, но и с высокой степенью достоверности предсказывать, прогнозировать свойства веществ [1].

Нами показано [2], что компьютерные технологии вполне приемлемы в полимерной химии – при выборе наиболее подходящего растворителя для синтеза термостойких полимеров, в биологии для предсказания выхода алкалоидов в лекарственных травах различных природных зон и регионов, в медицинских исследованиях – в прогнозировании холелитиаза, другими словами, роста камней в печени подопытных крыс до летального исхода в опытных и контрольных группах с применением и без применения лекарственных добавок и т.д.

Мир по своей природе сложен и многомерен. Можно добавить, что в природе (равно как и в обществе), хотим мы этого или нет, всё взаимосвязано со всем. Эта закономерность обычно не просматривается, если иметь в виду два функциональных параметра. Но полипараметрическая многоуровневая многомерная функциональная взаимосвязь наблюдается в случае,

когда в качестве базисных принимается не менее четырех характеристик, влияющих на искомый параметр [1, 3]. Нами разработаны основы многопараметрических взаимозависимостей.

Метод многоуровневого (многомерного) моделирования (ММУМ) позволяет математически моделировать те или иные химические процессы в различных средах, а также оценивать отсутствующие (дефицитные), а иногда и уточнить маловероятные характеристики в физико-химических исследованиях. Отметим, что зависимость определяется простым уравнением ММУМ:

$$Y - y_{ср} = b_1(X_1 - X_{1(ср)}) + b_2(X_2 - X_{2(ср)}) + ... + b_n(X_n - X_{n(ср)}), \quad (1)$$

причем коэффициенты b_1, b_2, ..., b_n находятся из системы линейных уравнений:

$$\begin{aligned} &b_1\Sigma x_1^2 + b_2\Sigma x_1x_2 + ... + b_n\Sigma x_1x_n = \Sigma x_1y_1;\\ &b_1\Sigma x_1x_2 + b_2\Sigma x_2^2 + ... + b_n\Sigma x_2x_n = \Sigma x_2y_2;\\ &\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\ &b_1\Sigma x_1x_n + b_2\Sigma x_2x_n + ... + b_n\Sigma x_n^2 = \Sigma x_ny_n. \end{aligned}$$

Реализация компьютерной программы «ММУМ», разработанной в недрах нашей кафедры, при моделировании и расчете энергий межмолекулярных взаимодействий приводит к уравнениям

$$\Delta H_1 = -0{,}2096 + 0{,}5672\cdot R_s + 0{,}06800\cdot\Sigma L\cdot 10^8 + 0{,}00376\cdot T + 0{,}4913\cdot\rho + 0{,}4902\cdot\eta + \\ + 0{,}1332\cdot p - 0{,}00531\cdot pK_s + 0{,}0212\, pK_{HCl} \quad (2)$$

с коэффициентом многоуровневого (многомерного) моделирования равен $K_{ММУМ} = 0{,}9889$,

$$\Delta H_2 = -55{,}0313 + 8{,}1355\cdot R_s - 3{,}4931\cdot\Sigma L\cdot 10^8 + 0{,}1550\cdot T - 1{,}1499\cdot\rho + 0{,}3591\cdot\eta - \\ - 4{,}2303\cdot p + 0{,}4878\cdot pK_s + 2{,}7799\, pK_{HCl}\; K_{ММУМ} = 0{,}9997. \quad (3)$$

В таблице представлены полученные данные по энергиям межмолекулярных взаимодействий ΔH (*Ккал/моль*) в растворителях от таких базисных свойств растворителя, как температура кипения T, плотность ρ, вязкость η, дипольный момент молекулы растворителя p, термодинамическая константа диссоциации хлороводорода pK_{HCl}, сумма длин связей $\Sigma L\cdot 10^8$ см, радиус молекулы растворителя $R_s\cdot 10^8$ см и показатель константы автопротолиза (ионное произведение) растворителя pK_s.

Базисные параметры и оценка энергий водородной связи ΔH (кДж/моль) растворителей ММУМ

№ п/п	$T_{кип}$	r	h	p	pK_{HCl}	ΣL	R_s	pK_s	ΔH (*Ккал/моль*) (*лит.*)	ΔH_1 (*Ккал/моль*) *по ур.*(2)	ΔH_2 (*Ккал/моль*) *по ур.*(3)
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
01	373,2	0,9971	0,894	1,84	-0,98	1,26	1,45	14,00	3,390	-	3,391
02	338,2	0,7914	0,547	1,70	1,20	3,48	1,89	17,30	4,490	-	4,472
03	351,5	0,7895	1,080	1,69	1,95	5,02	2,19	18,95	6,690	-	6,720
04	370,4	0,7995	2,256	1,68	2,51	6,56	2,50	19,46	9,042	-	9,050
05	390,4	0,8058	2,950	1,66	3,04	8,11	2,65	21,56	10,983	-	10,943
06	411,2	0,8098	3,820	1,65	3,62	9,65	2,81	20,65	-	-	11,607
07	430,7	0,8155	4,314	1,64	4,21	11,19	2,97	19,74	-	-	11,798
08	449,1	0,8188	5,779	1,70	4,51	12,73	3,09	22,53	-	-	12,710
09	468,4	0,8221	7,186	2,00	4,76	14,27	3,21	26,42	-	-	13,123
10	329,4	0,7920	0,316	2,88	4,00	5,27	2,30	32,50	3,327	3,361	-

Окончание табл.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
11	352,8	0,8054	0,428	2,79	4,45	6,81	2,40	31,00	4,070	3,800	-
12	375,7	0,8089	0,500	2,48	4,41	8,35	2,56	25,62	-	4,106	-
13	400,7	0,8304	0,542	2,16	4,35	9,89	2,68	25,30	-	4,365	-
14	425,7	0,9445	0,796	3,82	3,40	5,12	2,53	31,60	4,050	4,296	-
15	438,7	0,9366	0,919	3,79	3,30	6,66	2,72	31,20	4,055	4,591	-
16	508,2	1,0253	3,340	5,37	3,56	6,09	3,10	20,56	6,800	6,662	-
17	462,2	1,1014	1,960	4,30	3,06	5,82	2,37	32,30	5,421	5,105	-
18	558,2	1,2618	10,13	4,69	3,25	5,94	2,61	25,45	9,736	9,828	-
19	475,2	1,0327	1,830	4,09	2,80	6,66	2,70	24,15	5,135	5,327	-
20	353,3	0,7856	0,345	3,84	8,10	3,79	2,54	32,20	3,332	3,262	-
21	514,9	1,0257	2,510	4,94	1,15	6,70	3,12	29,20	6,260	5,953	-

Примечания: 1 – вода, 2 – метанол, 3 – этанол, 4 – пропанол, 5 – бутанол, 6 – пентанол, 7 – гексанол, 8 – гептанол, 9 – октанол, 10 – ацетон, 11 – метилэтилкетон, 12 – метилпропилкетон, 13 – метилбутилкетон, 14 – диметилформамид, 15 – диметилацетамид, 16 – гексаметилфосфортриамид, 17 – диметилсульфоксид, 18 – тетраметиленсульфон,19 – метилпирролидон, 20 – ацетонитрил, 21 – пропиленкарбонат.

Таким образом, использование в качестве базисных параметров термохимических (температура кипения, мольная теплота парообразования и др.), кинетических (вязкость и др.), электрических (дипольный момент и др.) свойств, молекулярных характеристик (сумма длин химических связей в молекуле растворителя) и др., по существу легко определяемых справочных величин, дает соответствие оцененных ММУМ величин с реальными экспериментальными или литературными значениями, независимо от природы и класса веществ [1]. Метод многоуровневого (многомерного) моделирования позволяет решать многочисленные задачи при отсутствии важных характеристик помимо химической науки и технологий в отраслях, не связанных в чистом виде с химией.

Список литературы

1. Танганов Б.Б., Балданов М.М., Мохосоев М.В. Множественные регрессии физико-химических характеристик неводных растворителей на расширенном базисе параметров // Ж. физ. химии. – 1992. – Т.66, №6. – С. 1476–1480.

2. Танганов Б.Б., Никитеев В.В., Могнонов Д.М., Дорошенко Ю.Е., Изынеев А.А. Уравнение множественной регрессии при выборе растворителя для поликонденсации // Известия СО АН СССР. – Сер.хим.наук. – №19. – Вып.6. – 1988. – С. 105-107.

3. Крупенникова В.Е., Раднаева В.Д., Танганов Б.Б. Программа расчета математической модели по восьми параметрам методом многоуровневого моделирования / Свидетельство ФСИСПТЗ о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010615116, зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 9 августа 2010 г.