

2. Бор Н. Атомная физика и человеческое познание (сб. статей). Пер. с англ. – М.: ИЛ, 1961.
3. Гейзенберг В. Физика и философия. Часть и целое. – М.: Наука, 1989.
4. Судзуки Д., Кацуки С. Дзэн-Буддизм. Бишкек.: Одиссей, 1993.
5. http://om-aditya.ru/userfiles/ufiles/rigveda/brikhadaranyaka_upanishada.docx
6. Спасский Б.И., Московский А.В. // О нелокальности в квантовой физике. Успехи физических наук. 1984.Т.142. вып.4.

© О.В.Гришина, 2015

УДК 517.9

С. Н. Ефимов

студент 5 курса факультета прикладной математики, физики и информационных технологий
Чувашский государственный университет им. И. Н. Ульянова

Н. И. Гордеев

к. т. н., доцент кафедры дискретной математики и информатики
Чувашский государственный университет им. И. Н. Ульянова
Г. Чебоксары, Российская Федерация

ПРИБЛИЖЕННЫЙ АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ПРОСТЕЙШЕЙ ЗАДАЧИ КЛАССИЧЕСКОГО ВАРИАЦИОННОГО ИСЧИСЛЕНИЯ

Рассмотрим конкретную простейшую задачу классического вариационного исчисления [1]

$$J[y(x)] = \int_0^{\pi/2} (2y + y^2 - y'^2) dx \rightarrow \text{extr}, \quad (1)$$

$$y(0) = 0 \quad (2), \quad y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0 \quad (3),$$

где $y = y(x)$ – искомая функция одной независимой переменной x .

Исследуя и решая задачу (1) - (3) вариационным методом [2], находим экстремаль (рис. 1.)

$$y_*(x) = \cos x + \sin x - 1, \quad (4)$$

на которой достигается максимум функционала $J[y(x)]$:

$$J_{\max} = J[y_*(x)] = \int_0^{\pi/2} (2y_*(x) + [y_*(x)]^2 - [y'_*(x)]^2) dx; \quad (5)$$

здесь

$$y'_*(x) = \cos x - \sin x, \quad (6)$$

Ниже приведем методику приближенного аналитического решения поставленной вариационной задачи (1) - (3).

Особо необходимо (следует) подчеркнуть, что процесс построения (синтеза) приближенного аналитического решения поставленной задачи (1) - (3) с наперед заданной точностью, является итерационным.

Вначале отметим, что задача (1) - (3) зависит от трех условий: от двух граничных условий (2) и (3) и одного условия, связанного с экстремумом функционала $J[y(x)]$. Исходя из этих соображений, в качестве первого приближения к решению задачи (первый шаг итерационного процесса) предложим алгебраический полином (многочлен) второй степени относительно переменной x :

$$y_1(x) = a_2 x^2 + a_1 x + a_0. \quad (7)$$

Коэффициенты полинома a_2, a_1, a_0 будем вычислять, опираясь на три упомянутых условия.

Найдем производную первого порядка по x от $y_1(x)$ (7):

$$y'_1(x) = 2a_2 x + a_1. \quad (8)$$

Учитывая граничные условия (2) и выражение $y_1(x)$ (7) получим:

$$\begin{cases} y(0) = 0, \\ y_1(0) = a_0, \end{cases} \Rightarrow a_0 = 0. \quad (9)$$

Значение (9) подставим в (7):

$$y_1(x) = a_2 x^2 + a_1 x. \quad (10)$$

Учитывая граничное условие (3) и выражение $y_1(x)$ (10) получим:

$$\begin{cases} y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0, \\ y_1\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{\pi}{4}(\pi a_2 + 2a_1), \end{cases} \Rightarrow \pi a_2 + 2a_1 = 0. \quad (11)$$

Полученное равенство (11) позволяет выразить коэффициент a_1 через коэффициент a_2 :

$$a_1 = -\frac{\pi}{2} a_2. \quad (12)$$

Выражение для a_1 (12) подставляем в (8) и (10) и преобразуем:

$$y_1(x) = \frac{1}{2} a_2 (2x^2 - \pi x), \quad (13)$$

$$y'_1(x) = \frac{1}{2} a_2 (4x - \pi). \quad (14)$$

Подставим в подынтегральную функцию функционала $J[y(x)]$ вместо $y(x)$ и $y'(x)$ соответственно $y_1(x)$ (13) и $y'_1(x)$ (14) и преобразуем:

$$2y_1(x) + [y_1(x)]^2 - [y'_1(x)]^2 = \frac{1}{4} \{4(a_2)^2 x^4 - 4\pi(a_2)^2 x^3 + [8a_2 + (\pi^2 - 16)(a_2)^2]x^2 + 4\pi[2(a_2)^2 - a_2]x - \pi^2(a_2)^2\}. \quad (15)$$

Вычислим следующие определенные интегралы:

$$\int_0^{\pi/2} x^4 dx = \frac{\pi^5}{160} \quad (16), \quad \int_0^{\pi/2} x^3 dx = \frac{\pi^4}{64} \quad (17),$$

$$\int_0^{\pi/2} x^2 dx = \frac{\pi^3}{24} \quad (18), \quad \int_0^{\pi/2} x dx = \frac{\pi^2}{8} \quad (19), \quad \int_0^{\pi/2} dx = \frac{\pi}{2} \quad (20).$$

Вычислим определенный интеграл от функции (15) на отрезке $[0; \frac{\pi}{2}]$, учитывая значения определенных интегралов (16) - (20):

$$\begin{aligned} J(a_2) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \{2y_1(x) + [y_1(x)]^2 - [y'_1(x)]^2\} dx = \\ &= \frac{\pi^3}{960} [(\pi^2 - 40)(a_2)^2 - 40a_2]. \end{aligned} \quad (21)$$

Символ $J(a_2)$ означает, что полученное выражение определенного интеграла является функцией относительно неизвестного коэффициента a_2 .

Найдем производные первого и второго порядков по a_2 от функции $J(a_2)$:

$$\frac{dJ}{da_2} = \frac{\pi^3}{480} [(\pi^2 - 40)a_2 - 20], \quad (22)$$

$$\frac{d^2J}{da_2^2} = \frac{\pi^3}{480} (\pi^2 - 40). \quad (23)$$

Для нахождения стационарной точки функции $J(a_2)$ (21) решим уравнение

$$\frac{dJ}{da_2} = \frac{\pi^3}{480} [(\pi^2 - 40)a_2 - 20] = 0. \quad (24)$$

В результате получаем единственную стационарную точку

$$\tilde{a}_2 = 20/(\pi^2 - 40). \quad (25)$$

В стационарной точке \tilde{a}_2 (25) функция $J(a_2)$ (21) достигает своего локального максимума

$$\tilde{J}_{max} = J(\tilde{a}_2) = 5\pi^3/[12(40 - \pi^2)], \quad (26)$$

так как согласно второму достаточному условию экстремума функции

$$\left. \frac{d^2J}{da_2^2} \right|_{\tilde{a}_2} = \frac{\pi^3}{480} (\pi^2 - 40) < 0. \quad (27)$$

Подставив значение \tilde{a}_2 (25) в $y_1(x)$ (13) и преобразуя, получаем приближенное аналитическое решение поставленной вариационной задачи

(1) - (3) (рис. 2.):

$$y_1(x) = \frac{10}{\pi^2 - 40} (2x^2 - \pi x), \quad x \in \left[0; \frac{\pi}{2}\right]. \quad (28)$$

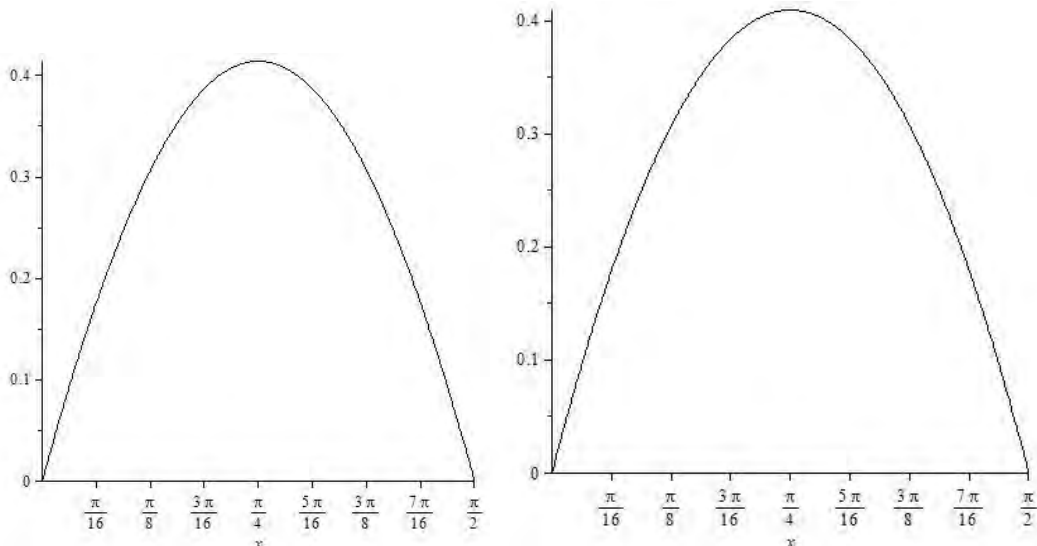


Рис. 1. График функции $y_*(x)$

Рис. 2. График функции $y_1(x)$

График функции $J(a_2)$ (21) (рис. 3) наглядно показывает, что эта функция достигает своего локального максимума в стационарной точке $a_2 = \tilde{a}_2$ (25). А это означает, что для приближенного решения $y_1(x)$ (28) имеет максимум функционала

$$J[y_1(x)] = \tilde{J}_{max} = 5\pi^3 / [12(40 - \pi^2)]. \quad (29)$$

Вычислим относительную погрешность приближенного значения функционала

$$\delta = \frac{|J_{max} - \tilde{J}_{max}|}{|\tilde{J}_{max}|} = |\pi^3 - 24\pi^2 - 240\pi + 960| / 5\pi^3 = 0.00099 \dots < \varepsilon, \quad (30)$$

где $\varepsilon = 0.001$.

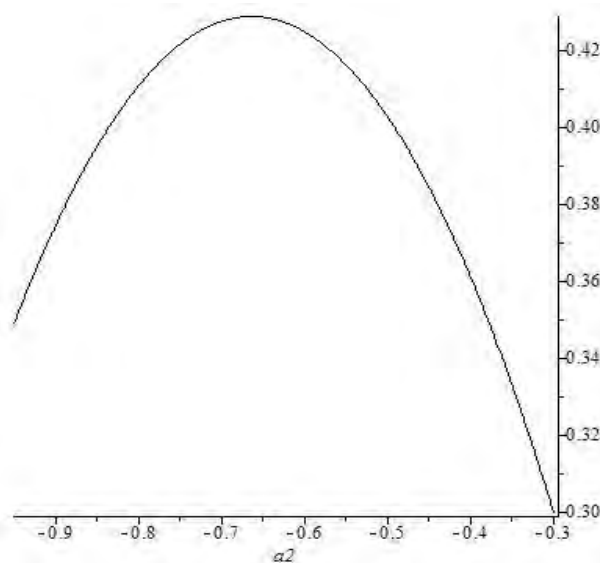


Рис. 3. График функции $J(a_2)$

Рассмотрим функцию

$$\varphi(x) = y_*(x) - \tilde{y}_1(x) = \cos x + \sin x - 1 + 10(2x^2 - \pi x) / (40 - \pi^2). \quad (31)$$

Найдем от $\varphi(x)$ (31) производную первого порядка по x :

$$\varphi'(x) = \cos x - \sin x + 10(4x - \pi)/(40 - \pi^2). \quad (32)$$

Решая уравнение

$$\varphi'(x) = 0, \quad (33)$$

находим единственную стационарную точку функции $\varphi(x)$ (31): $x = \frac{\pi}{4} \in [0; \frac{\pi}{2}]$.

Вычислим значения функции $\varphi(x)$ (31) при $x = 0$, $x = \frac{\pi}{2}$ и $x = \frac{\pi}{4}$:

$$\varphi(0) = 0 \quad (34), \quad \varphi\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0 \quad (35),$$

$$\varphi\left(\frac{\pi}{4}\right) = [160(\sqrt{2} - 1) - \pi^2(4\sqrt{2} + 1)]/[4(40 - \pi^2)]. \quad (36)$$

Вычислим расстояние нулевого порядка между кривыми $y_*(x)$ и $\tilde{y}_1(x)$ на отрезке $[0; \frac{\pi}{2}]$, имея функцию $\varphi(x)$ (31) и значения этой функции (36):

$$\begin{aligned} \rho_0 = \rho[y_*(x), \tilde{y}_1(x)] &= \max_{0 \leq x \leq \frac{\pi}{2}} |\varphi(x)| = \max_{0 \leq x \leq \frac{\pi}{2}} \varphi(x) = \\ &= \max \left\{ \varphi(0), \varphi\left(\frac{\pi}{2}\right), \varphi\left(\frac{\pi}{4}\right) \right\} = \varphi\left(\frac{\pi}{4}\right) = 0.004759 \dots \end{aligned} \quad (37)$$

Оценка относительной погрешности δ (30) и полученное значение расстояния нулевого порядка ρ_0 (37) дают основание утверждать, что первое приближение $y_1(x)$ (28) к решению данной задачи (1) - (3) обладает достаточно высокой точностью, и поэтому на первом шаге итерационный процесс можно завершить.

Предположим (выдвигаем гипотезу), что полученное первое приближение $y_1(x)$ (28) не удовлетворяет заданной точности решения. Тогда следует перейти к следующему (второму) шагу итерационного процесса, полагая, что второе приближение к решению задачи описывается уже алгебраическим полиномом третьей (более высокой) степени относительно переменной x :

$$y_2(x) = a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0. \quad (38)$$

Неизвестные коэффициенты a_0, a_1, a_2 и a_3 полинома (38) следует вычислять по методике, аналогичный методике для первого приближения. Такой итерационный процесс продолжается до тех пор, пока не будет получена приближенное решение с наперед заданной точностью.

Реализованную в данной работе методику можно рекомендовать также для приближенных аналитических решений других простейших задач классического вариационного исчисления.

Список использованной литературы:

1. Алексеев В. М., Галеев Э. М., Тихомиров В. М. Сборник задач по оптимизации. Теория. Примеры. Задачи: Учеб. пособие / В. М. Алексеев, Э. М. Галеев, В. М. Тихомиров. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. – С. 100.
2. Эльсгольц Л. Э. вариационное исчисление: Учебник / Л. Э. Эльсгольц. – М.: КомКнига, 2006. – С.22 – 41.

© С. Н. Ефимов, Н. И. Гордеев, 2015

O. V.Dyakonova

assistant professor,

S. A.Sokolova

assistant professor,

V. V.Kotov

professor

The Faculty of Technology and Merchandizing
Voronezh State Agricultural University after Emperor Peter the Great
Voronezh, Russian Federation

THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF ION-EXCHANGING POLYAMIDE ACID MEMBRANES SYNTHESIZED AT VARIOUS TEMPERATURES

Abstract

The peculiarities of structure of new ion-exchanging polyamide acid membranes, received by thermal processing of a solution of a copolymer 1,2,4,5-benzotetracarboxylic acid with 4,4'-diaminodiphenyl ether in dimethylformamide were researched. By a method of IR-spectroscopy it is shown, that depending on temperature of synthesis it is possible to vary over a wide range the contents of functional carboxyl groups, and also the correlation of amide and imide groups in a phase of a membrane and, as a result, to change its physical and chemical properties. By means of methods of a nuclear magnetic resonance (NMR) with a pulse gradient of a magnetic field and electronic spin resonance (ESR) structural characteristics of transport channels in gel phase of membranes are determined. Distinctions in structure of membranes, received at different temperatures, are proved also by a method of reference porometry.

Keywords

Polyamide acid membrane; Synthesis; Ion-exchanging; Structure; IR-spectroscopy; Reference porometry; NMR-spectroscopy; Self-diffusion coefficients; ESR-spectroscopy.

1. Introduction

The receiving of new membrane materials, possessing high selectivity, thermo stability, mechanical durability, is a necessary condition for wide use of membrane processes of division in the solution of urgent technological and ecological problems. In this connection the big interest represents polyamide membranes, received by the thermal processing of aromatic polyamide acids (PAA).

While changing the temperature of influence on PAA, we have received the materials, combined properties of the ion-exchange membranes, the polyamides (PA) and polyimides (PI) [1]. The received membranes are characterized by a wide range of a variation of an exchanging capacity, optimal hydrophobic-hydrophilic balance, good thermal stability, high selectivity to one-charged cations of metals.

The information on structural peculiarities as to a surface, and a volumetric phase of membranes is necessary for revealing mechanisms of functioning of the given membranes in various processes of division. With this purpose the whole complex of physical and chemical methods of research has been involved: sorption, IR-, NMR-spectroscopy, reference porometry, scanning probe microscopy.

2. Experimental Part

2.1. The thermal synthesis polyamide acid membranes

The polyamide acid membranes were synthesized by two-leveled thermal processing of 12-20% solution of polyamide acids – an aromatic copolymer 1,2,4,5-benzotetracarboxylic acid with 4,4'-diaminodiphenyl ether in dimethylformamide (DMPA), produced on NPO "Plastic", Moscow. Molecularly-mass distribution of a copolymer was within the limits of 15-55 ths. c.u. The weight of an elementary link made up 418 c.u., and the contents of carboxyl groups 4.18 mmol/g of dry substance.

The substrate with the solution of PAA was located in an autoclave, where as a result of thermal processing, was exposed to imidization. At the first step at the temperature of 353K within one hour the gradual removing of a great mass of solvent