



ӨЖ 547.2

А.К. Батталова

Қазақстан Республикасы Әділет министрлігі Сот сараптамалары орталығы РМҚК филиалы
Шығыс Қазақстан облысы бойынша Сот сараптамалары институты, Өскемен қ.

СПИРТҚҰРАМДЫ СҰЙЫҚТЫҚ ҚҰРАМЫНДАҒЫ ЭТИЛ СПИРТІН ИҚ- ЖӘНЕ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИЯ ӘДІСТЕРІМЕН САРАПТАУ

В статье рассматривались исследования спиртосодержащих жидкостей во время решение диагностических задач путем межметодного сличения, в частности, классической метод исследования этилового спирта, в том числе возможности использования ИК- и ЯМР-спектроскопии.

Мақалада спиртқұрамды сұйықтықтар бойынша диагностикалық міндеттерді шешу үшін әдісаралық салыстыру жүргізу арқылы, атап айтқанда этил спирті классикалық әдістермен қоса, ИҚ- және ЯМР-спектроскопия әдісі көмегімен зерттеу мүмкіншіліктері қарастырылды.

The article covers investigation of alcohol containing liquids in solving diagnostic challenges via inter method collation, particularly the classical method of these liquids investigation including possibilities of applying infrared and magnetic nuclear resonance spectroscopy.

Кілт сөздер: спиртқұрамды сұйықтықтар, этил спирті, инфрақызыл (ИҚ) спектроскопия, ядролық магниттік резонанс (ЯМР) спектроскопиясы.

Кейінгі уақытта орын алып жатқан қылмыстық істердің ішінде спиртқұрамды сұйықтықтарды (СҚС) сертификатсыз және лицензиясыз дайындау, сату, өткізу, сонымен қатар Қазақстан Республикасы территориясына ішімдік өнімдерін тасуда акциздік салықты есептеу үшін тауар кодтарын меншіктеу сияқты құқық бұзушылық кеңінен таралып барады. Мұндай категориядағы істерді де тергеу және сотта қарау үшін СҚС-ға сот-сараптамалық зерттеу жүргізу қажет. Осы орайда арзан бағалы ішімдіктерді дайындаудағы сусынды сұйылту фактісін анықтау, сусынды белгілі бір типке, түрге, маркаға, өнім партиясына жатқызу білікті сарапшылық зерттеу жүргізуді талап етеді. Спиртқұрамды сұйықтықтарды сот-сараптамалық зерттеу сұйықтықтың құрамын, түрін, шығу тегін, спецификалық жағдайын, жасалу жолын, фальсификациялық фактісін және мемлекеттік стандартқа сәйкестігін анықтауға бағытталады [1].

Жалпы спиртқұрамды сұйықтықтарды сараптамалық зерттеудің объектілері белгілі бір көлемдегі СҚС бақылау бойынша әртүрлі мақсаттағы тағайындау, соның ішінде табиғаты өзге сұйықтықтар, СҚС өнеркәсіптік дайындау: спирт, арақ, коньяк, шарап және т.б. спирттік сусындардың фальсификаттары, жасанды жолмен дайындалған СҚС (самогон, чача, тұнба), СҚС әртүрлі тасымалдаудағы іздер, жасанды жолмен дайындалған күшті спирттік сусындар үшін бейімдеу, конструкция, құралдар, өнеркәсіптік-технологиялық үрдістер және құралдар, салыстырмалы зерттеу үшін СҚС үлгілері, сонымен қатар арақ өнімін дайындауда негізгі шикізат көзі этил спирті болып табылады.

Сарапшылық зерттеу нысаны ретінде СҚС жіктелуі келесі талаптарды қанағаттандыруы қажет:

- барлық деңгейдегі кластарға біріккен саналуандылық және СҚС түсінігіне біріккен жалпылама ауқымды құрылымы жөнінде түсінік беру;
- оқиғаның сипатын және СҚС қасиеттерінің өзара байланысын ашу;
- объектілерді аналитикалық зерттеуде сарапшының нақты сұлбаны бағдарлауы;
- зерттелетін СҚС классификациялық категориясын «тек» және «топ» анықтаудағы негізгі қызмет.

СҚС сараптамасы объектілерін зерттеу барысында күрделілігі әртүрлі дәрежедегі сараптамалық міндеттердің екі тобы шешіледі. Бірінші топ - диагностикалық және классификациялық міндет, екінші топ – идентификациялық міндет. Классификациялық міндетті шешуге алдын ала

белгілі бір техникалық жағдайда ММСТ-мен белгіленген объектілерді жатқызуға болады. Диагностикалық міндетті шешуге фальсификация фактісін, объектінің жағдайы мен қасиетін, табиғатын, объектінің белгілі бір құрамға жататындығын немесе жатпайтындығын, өзге сұйықтықтармен араласу фактісін, шикізат белгілерін, СҚС дайындау әдісін және тағайындау мақсатын, СҚС түрін анықтау жатады. Идентификациялық міндет мазмұны жекеше нақты ұқсастықты белгілеу сияқты криминалистикалық идентификация теориясымен анықталады. Идентификациялық белгілердің мәні нақты сыйымдылыққа, «сыйымдылық – сұйықтық» шартына, оның өлшеміне, герметикалығына, сұйықтық құрамында шығу тегі өзге заттардың болуына байланысты. Бұл міндетті шешуде стандартталған өнімнің түріне, СҚС және шетелдік өнеркәсіптік шарап өнімдерінің өндіріс технологияларында реттелмеген қоспалардың болмауы қиындық туғызады. Аталмыш міндеттерді шешу барысында ең алдымен заттай дәлелдеме объектілерінің өзіндік қасиеттерін кең көлемде зерттеп білуі қажет, яғни зерттеуге ұсынылатын сұйықтықтың алдымен табиғатын анықтау қажет болады.

СҚС сот-сараптамалық зерттеудің жіктелуін белгілеу мақсаты органолептикалық, химиялық және физика-химиялық әдістер негізінде анықталған белгілерінің жиынтығына негізделеді. СҚС-дың құрамын химиялық көзқараспен қарасақ су және этил спиртінен басқа да көпкомпонентті жүйені құрайды. Атап айтқанда, метанол, изопропанол, изобутанол, н-пропанол, амин спиртінің изомерлері; этиллактат, альдегидтер және күрделі эфирлер – ацетальдегид, этилформиат және этилацетат; сонымен қоса қант, органикалық қышқылдар, көміртек диоксиді, күкірт ангидридi, ароматикалық заттар және т.б. [2]. Аталмыш құрамдардың ішінде метанол – жүйке және тамырға қоздырғыш әсер ететін, этанол – сұйық есірткі, ұзақ әсер еткенде жүйке, ас қорыту, қан тамыр, бауыр ауруларын тудыратынын және тағы сол сияқты көпшілік құрамдардың улы болып келетінін әрі бұлардың құрылымдық формулалары өзара ұқсас болып келетіндігін ескерсек, сараптама жүргізу барысында сұйықтықтың табиғатын анықтау үшін, яғни диагностикалық міндеттерді шешу үшін тек бір ғана әдіспен шектеліп қалу аздық етеді.

Сол себепті сұйықтық құрамындағы этил спиртіні анықтау барысында жүргізілетін диагностикалық зерттеу кезінде тек қана классикалық әдістермен шектеліп қалмай әдісаралық салыстыруды қолдану, яғни ИҚ- және ЯМР-спектроскопия әдістерінің көмегімен зерттеу жүргізу өзекті болып табылады.

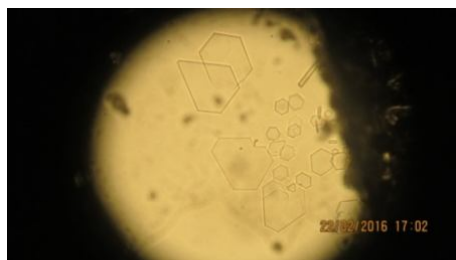
Мақалада СҚС-ды сараптау барысында классикалық әдістермен қоса, инфрақызыл (ИҚ) және ядролық магниттік резонанс (ЯМР) спектроскопия әдістерін қолдану мүмкіншілігі қарастырылды.

Зерттеу жүргізу үшін сот сараптамасына келіп түскен айғақ зат, яғни СҚС зерттеу нысаны ретінде алынып, классикалық, ИҚ- (FT-801 Simex) және ЯМР-спектроскопия (Avance III 500 MHz Bruker) әдістері көмегімен сараптау жұмыстары жүргізілді.

Классикалық әдіс барысында сұйықтықтың табиғатын анықтау үшін этил спиртіне сапалық реакция жасалады. Зерттеу сынамасының 2 мл-не 10 %-ды 1 мл сілті ерітіндісі және сары түс жоғалғанға дейін люголь ерітіндісі тамшылатып құйылады. Зерттеу барысында қоспаны қайнату нәтижесінде сарғыш түсті тұнба түзілді. Оны микроскопиялық сараптау арқылы сұйықтықтың тұнбасында алтыбұрышты йод пішінді кристалдардың түзілгені анықталды (1-сурет). Бұл сұйықтықта этил спиртінің бар екендігін көрсетеді [3].

Ары қарай сұйықтықтағы этил спиртінің концентрациясы «Этил спирті. Қолдану тәртібі және анализдеу әдісі» Р 5962–51 ММСТ негізінде анықталды [4]. Концентрация 10 °С температурада 0,1 туралықта АСП–1 санатты ареометрдің көмегімен анықталды. Жүргізілген зерттеудің нәтижесінде этил спиртінің концентрациясы 37,5 көлемдік пайызға (градуска) тең екендігі белгілі болды.

СҚС құрамындағы этил спиртіні ИҚ-спектроскопия әдісімен анықтау үшін 0,1 мл зерттелетін ерітінді кюветаға құйылып, оның ИҚ спектрлері алынды (2-сурет). ИҚ спектрі бойынша $-\text{CH}_2-$ топшасының сигналы $\nu=2910\text{ см}^{-1}$ аралығында, $-\text{CH}_3$ топшасы $\nu=2940\text{ см}^{-1}$, OH топшасы $\nu=3350\text{ см}^{-1}$, ал $\text{C}-\text{O}$ топшасы $\nu=1050\text{ см}^{-1}$ аумағында көрінді. Осы нәтижеге негізделіп, топшалардың жұтылу мәндері арқылы этил спиртінің құрылымдық формуласын нақтылауға болады [5].



а

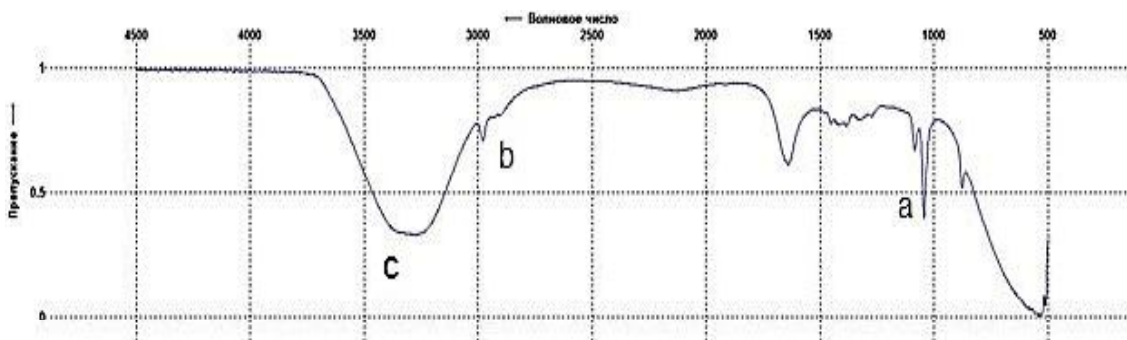


а



б

1-сурет – а, ә, б - бірнеше есе үлкейтілген алтыбұрышты йод пішінді кристалдардың электронды микросуреттері



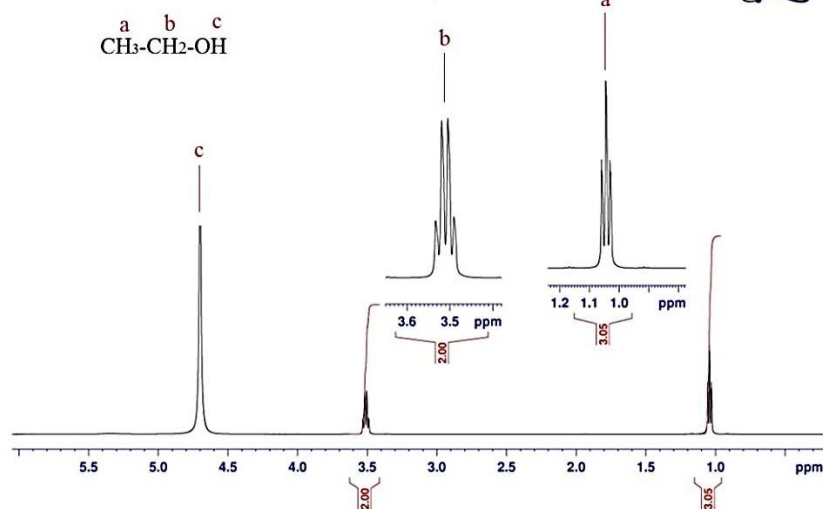
2-сурет – этил спиртінің ИҚ спектрі

ИҚ спектрометрдегі этил спиртінің құрылымдық формуласындағы топшалардың жұтылу мәндері

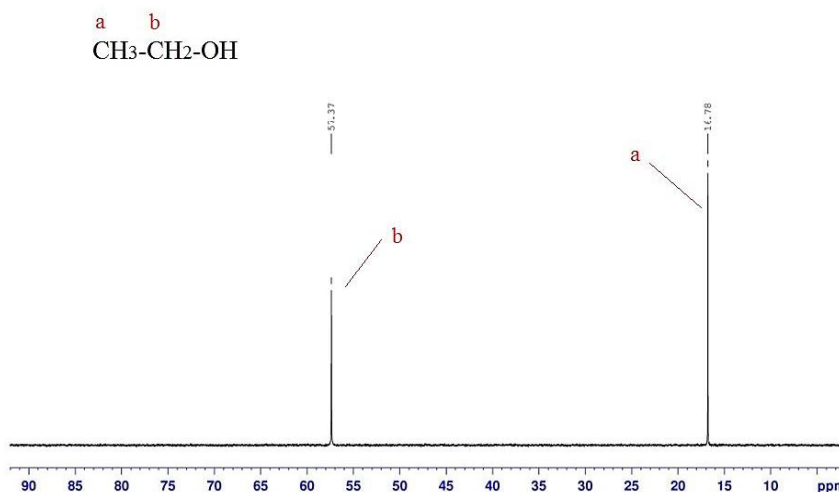
Атом нөмірі	Функционалдық топ	ν , cm^{-1}
a	-C-O	1050
b	-CH ₂ -	2910
b	-CH ₃	2940
c	-OH	3350

СҚС-ды зерттеу барысында қолданылған келесі әдіс – ЯМР-спектроскопия әдісі. Бұл әдісте 0,1 мл зерттелетін ерітіндіні 1 мл суда - D₂O (немесе H₂O) ерітіп, спектрометрде протондық (¹H) және көміртектік (¹³C) спектрлері түсірілді (3-4-суреттер). ¹H спектрі бойынша этил спиртінің құрылымдық формуласындағы -CH₃ топшасының сигналы $\delta=1$ ppm аралығында, -CH₂- топшасы $\delta=3,5$ ppm, ал OH топшасы $\delta=4,8$ ppm аумағында көрінді. Ал, ¹³C спектрінде -CH₃ топшасындағы көміртек атомының сигналы $\delta=16,78$ ppm, -CH₂ көміртек атомының сигналы $\delta=57,37$ ppm аумағында көрінді. Бұл этил спиртінің құрылымдық формуласындағы әрқайсысы топшалардың электрон тығыздығымен және электронға ынтықтығымен түсіндіріледі [6].

Avance 111 500 1H C2H5OH-1in D2O

3-сурет – этил спиртінің ^1H ЯМР спектрі – D_2O

Avance 111 500 13C C2H5OH-1in D2O

4-сурет – этил спиртінің ^{13}C ЯМР спектрі – D_2O

Қорыта келгенде зерттеу барысында алынған нәтижелерге сүйене отырып, СҚС-ды зерттеуде әдісаралық салыстыру жүргізу арқылы, ИҚ- және ЯМР-спектроскопия әдістерін қолдану этил спиртінің сапалық анализін әрі тез, әрі нақты сараптауға тиімді екендігі анықталды.

Әдебиеттер тізімі:

1. Белкин Р.С. Курс криминалистики. – М., 1997. – Т. 1. – 136 с.
2. Вороненко Л.А. Методика судебно-экспертного исследования этиловых спиртов. - Астана, 2010. – 94 с.
3. Вороненко Л.А. Судебно-экспертное исследование спиртов и водок: Метод. рекомендации для экспертов / Л.А. Вороненко, А. Сулейман. - Алматы, 2006. – 113 с.

4. ГОСТ 5962-2013. Спирт этиловый. Правила приёмки и методы анализа. – М., 2014. – 4 с.
5. Нифантьев И.Э. Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса: Метод. разработка / И.Э. Нифантьев, П.В. Ивченко. – М., 2006. – 61 с.
6. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. – М.: Мир, 1965. – 182с.

Получено 16.08.2017

УДК 635.611, 519.863

Б. Даулетбаков, М.Е. Кизатова, Е.Б. Медведков

Алматинский технологический университет, г. Алматы

А.А. Шевцов

Воронежский государственный университет инженерных технологий, г. Воронеж

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ПРОКАЛЫВАНИЯ КОЖУРЫ ДЫНИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИМ ШИПОМ

При создании и расчете новой установки для очистки дыни от кожуры и ее измельчения одним из основных показателей является усилие прокалывания, которое влияет на величину мощности электродвигателя. С использованием математико-статистических методов разработана математическая модель прокалывания кожуры дыни цилиндрическим шипом, позволившая определить оптимальные параметры шипа для достижения минимального усилия.

Қауынды қабығынан тазалау және оны ұсақтауға арналған жаңа қондырғыны есептеуде және құрастыруда электрқозғалтқыштың қуатына әсер ететін негізгі көрсеткіштердің бірі - қауын қабығын тесу күші. Иненің оңтайлы параметрін анықтауға қажетті минималды күшті анықтау үшін математикалық-статистикалық тәсілдерді пайдалана отырып, үшкір цилиндр тәріздес инемен қауын қабығын тесуге арналған математикалық модель жасалған.

In development of and making calculations for the new melon peeling and crushing plant, piercing force is one of the major performances that affects the electric engine capacity. A mathematical model for piercing the melon peel with a cylindrical pin has been developed with the use of mathematical and statistical methods; the model made it possible to determine the optimal parameters of the pin for achieving a minimum force.

Ключевые слова: дыня, диаметр шипа, усилие прокалывания.

В научной практике исследования сложных процессов, к каким относится прокалывание кожуры дыни, получить достоверное и в то же время простое математическое описание зачастую не удастся. Однако, как показал опыт научных разработок последних лет, такие процессы можно исследовать экспериментально-статистическими методами. Это позволяет получить достоверные математические модели, адекватные поставленному эксперименту, на базе которых с определенной точностью и простотой можно решить сформулированные задачи [1].

Объекты и методы исследований. В качестве объекта исследования и моделирования был взят сорт дыни «Инжирная». Для обозначения рассматриваемого процесса прокалывания кожуры дыни, механизм функционирования которого сложен и неизвестен, нами была использована концепция «чёрного ящика» (рис. 1).

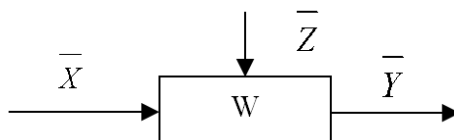


Рисунок 1 - Модель процесса прокалывания кожуры дыни

Как следует из приведенной на рис. 1 схемы, выходные переменные $\bar{Y}$ являются результатом воздействия на систему W в процессе прокалывания кожуры дыни $\bar{X}$ - входных и $\bar{Z}$ - возмущающих факторов. Таким образом, чтобы узнать, как развивается технологический процесс прокалывания кожуры дыни в системе, нужно знать, как система W трансформирует входные и возмущающие воздействия в выходные переменные. Описание связи выходных переменных с входными и возмущающими в виде некоторых уравнений называется математической моделью технологической системы, в нашем случае процесса прокалывания кожуры дыни.

Основной задачей нашего исследования является оптимизация параметров процесса прокалывания кожуры дыни: x_1 – угла заточки шипа (α , град); x_2 – диаметра шипа (d , мм), при которых силы прокалывания кожуры дыни F (Н) имеют наилучшие (оптимальные) значения. Решение поставленной задачи получено методами планирования многофакторных экспериментов, статистической обработки опытных данных и поисковой оптимизации. Для этого были отобраны параметры оптимизации и наиболее значимые факторы, влияющие на процесс прокалывания кожуры дыни, определен план проведения экспериментальных исследований, и на базе полученных опытных данных разработана математическая модель, на которой исследовалось влияние регулируемых факторов на выходные параметры процесса в стационарной области факторного пространства. Параметры прокалывания кожуры дыни и выбранные уровни их варьирования приведены в табл. 1.

Таблица 1

*Исследуемые параметры прокалывания кожуры дыни
и их уровни варьирования в лабораторных условиях*

Регулируемые параметры: кодированные (натуральные)	Кодированные уровни			Интервал варьирования
	-1	0	+1	
x_1 – угол заточки шипа, град	30	60	90	30
x_2 – диаметр шипа, мм	1,4	2,1	2,8	0,7

Матрица планирования и результаты опытов полнофакторного эксперимента (ПФЭ) типа 2^2 приведены в табл. 2. Опыты по определению усилия прокалывания проведены с помощью автоматического прибора «Структурометр СТ-2», описание которого приведено в источнике [2].

Таблица 2

Матрица планирования и результаты опытов ПФЭ типа 2^2

Номер опыта	Факторы в натуральном масштабе		Факторы в безраз- мерной системе координат			Выходной параметр					
	z_1	z_2	x_0	x_1	x_2	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_{cp}
1	30	1,4	0	-1	-1	5,16	5,1	4,85	4,72	3,81	4,73
2	90	1,4	0	1	-1	7,12	6,73	5,41	5,13	4,9	5,86
3	30	2,8	0	-1	1	16,3	16	15,8	8,7	9,7	13,30
4	90	2,8	0	1	1	17,98	16,9	17,89	16,91	17,11	17,36
5	60	2,1	0	0	0	8,52	10,77	9,98	10,59	8,76	9,72
6	90	2,1	0	1	0	12,02	10,79	10,12	9,1	14,19	11,24
7	30	2,1	0	-1	0	9,94	9,22	8,9	9,12	8,15	9,07
8	60	2,8	0	0	1	17,68	16,21	16,31	16,49	14,15	16,17
9	60	1,4	0	0	-1	5,99	5,38	4,92	4,83	4,7	5,16

Лабораторное исследование процесса прокалывания кожуры дыни проводилось по схеме полного трехфакторного планирования экспериментов.

Оптимум (максимум) целевых функций: показатель Y - сила прокалывания кожуры дыни (F , H) определялся в пакете прикладных программ (ППП) STATISTICA 10.0 методом поисковой оптимизации [3]. После этого найденное решение корректировалось с учетом результатов, полученных методами планирования экспериментов. Предварительно охарактеризуем полученную совокупность экспериментальных данных, рассчитав статистические характеристики основных показателей параметров прокалывания кожуры дыни (табл. 3).

Таблица 3

Статистические характеристики параметров прокалывания кожуры дыни

Статистические характеристики	Условное обозначение	Параметр		Y
		x_1	x_2	
Объем наблюдений	N	9	9	9
Среднее арифметическое	M	60	2,1	10,29
Стандартная ошибка	m	8,660	0,202	1,551
Стандартная ошибка, % от M	m , %	14,434	9,623	15,071
Медиана	med	60	2,1	9,24
Мода	mod	30	1,4	#Н/Д
Стандартное отклонение	s	25,981	0,606	4,652
Дисперсия выборки	s^2	675	0,368	21,641
Экссесс	E	-1,714	-1,714	-1,251
Асимметрия	A	0,000	0,000	0,301
Размах	R	60	1,4	12,63
Минимум	min	30	1,4	4,728
Максимум	max	90	2,8	17,358
Коэффициент вариации, %	V	43,3	28,9	45,21

По данным эксперимента для каждого показателя в табл. 2 оценены: среднее M и ошибка средней m , медиана (med) и мода (mod), стандартное (среднеквадратическое) отклонение s и дисперсия s^2 , наименьшее (min – минимум) и наибольшее (max – максимум) значения, размах R , показатели асимметрии A и эксцесса E , коэффициент вариации V . Статистические характеристики (табл. 3) дают количественное представление об эмпирических данных и в первом приближении проверяют предположения, лежащие в основе регрессионного анализа. Стандартные ошибки результирующих показателей составляют менее 15% от соответствующих средних значений. Наблюдается примерное равенство среднего и медианы. Мода для Y отсутствует, а значения эксцесса отрицательны; минимальное и максимальное значения примерно равно удалены от среднего. Это свидетельствует о близости эмпирического и нормального или обобщенно-нормального распределений.

Следующим этапом нашего исследования было построение нелинейной регрессии процесса прокалывания кожуры дыни. В нашем исследовании вид функции отклика $Y_i = f(x_1, x_2)$, $i = 1, 2$ от регулируемых параметров неизвестен. При отмеченной ранее нелинейности процесса прокалывания кожуры дыни, как принято при использовании многофакторного планирования эксперимента, уравнение регрессии представляют в виде полинома второй степени при достаточном количестве экспериментальных точек. Выбранный план (табл. 2) имеет 9 экспериментальных точек и позволяет рассчитать математиче-

скую модель процесса силы прокалывания кожуры дыни в виде полной квадратичной функции двух исследуемых параметров:

$$Y_i = b_0 + b_1x_1 + b_{11}x_1^2 + b_2x_2 + b_{22}x_2^2. \quad (1)$$

Аппроксимация (приближение) критериев оптимальности Y_i полиномом второй степени позволяет получить хорошее представление о форме поверхности отклика. В результате реализации вычислительных процедур, реализованных в компьютерной программе Statistica 10.0, рассчитаны пять b-коэффициентов нелинейной регрессии при кодированных переменных x_1 и x_2 , их стандартные ошибки, t-критерии Стьюдента для проверки значимости компонентов регрессии, уровни вероятности p, верхние и нижние 95%-е доверительные границы (табл. 4).

Таблица 4

*Результаты регрессионного анализа регулируемых параметров
прокалывания кожуры дыни*

Фактор	Коэффициент регрессии	Стандартная ошибка	t-критерий Стьюдента	p-уровень значимости	95%-е доверительные границы	
					нижняя	верхняя
Y – силы прокалывания кожуры дыни (F, H)						
–	10,07333	0,345501	29,15574	0,000089	8,97380	11,17287
x_1	1,22767	0,189239	6,48740	0,007435	0,62542	1,82991
x_1^2	-0,09300	0,327771	-0,28373	0,795069	-1,13611	0,95011
x_2	5,17933	0,189239	27,36932	0,000107	4,57709	5,78158
x_2^2	0,41800	0,327771	1,27528	0,292005	-0,62511	1,46111
x_1x_2	0,73200	0,231769	3,15832	0,050937	-0,00559	1,46959

Таким образом, используя оценки b-коэффициентов, можно записать следующие уравнения квадратичной регрессии двух параметров прокалывания кожуры дыни:

$$Y = 10,07333 + 1,22767x_1 - 0,093000x_1^2 + 5,17933x_2 + 0,41800x_2^2 + 0,73200x_1x_2, \quad (2)$$

где Y – сила прокалывания кожуры дыни (F, Н).

Анализ полученных значений t-критерия Стьюдента и соответствующих уровней значимости p подтверждает существенное влияние на результирующие показатели силы прокалывания кожуры дыни: x_1 – угла заточки шипа, град; x_2 – диаметра шипа, мм. Значимым оказалось влияние параметров x_1 и x_2 , а также $x_1 \cdot x_2$, у которых $p < 0,05$. Значение x_1^2 и x_2^2 несущественно влияет на результирующие критерии Y. На основе полученных в экспериментах данных методом наименьших квадратов рассчитаны уравнения квадратичной регрессии (2).

Для проверки качества полученных уравнений регрессии (2) были рассчитаны коэффициент множественной корреляции R, коэффициент детерминации R^2 , критерий Фишера F и критерий Дарбина-Ватсона d (табл. 5).

Приведенные в табл. 5 значения статистических критериев свидетельствуют о том, что полученные уравнения регрессии с 95%-й доверительной вероятностью достоверно и адекватно описывают влияние исследуемых параметров силы прокалывания кожуры дыни.

Достаточно высокие значения коэффициента множественной корреляции ($R = 0,998$) свидетельствуют об очень тесной взаимосвязи результирующих показателей Y и вклю-

ченных в исследование регулируемых параметров силы прокалывания кожуры дыни. Коэффициент детерминации ($R^2 = 0,996$) характеризует 99,6% вариации соответствующего отклика в экспериментальных данных. Значения критерия Фишера F , равные 160,570 соответственно для Y , и рассчитанные уровни значимости $p < 0,001$ свидетельствуют о достаточно высокой аппроксимирующей способности полученных уравнений. Как свидетельствуют значения критерия Дарбина-Ватсона d , можно считать, что сериальная корреляция отсутствует.

Таблица 5

Проверка адекватности и достоверности моделей регрессии для обоснования параметров силы прокалывания кожуры дыни

Статистические показатели качества и критерии адекватности	Отклик
	Y
Множественная корреляция R	0,998
Коэффициент детерминации R^2	0,996
Нормированный R -квадрат	0,990
Стандартная ошибка	0,464
Число степеней свободы $df : k_1; k_2$	5; 3
Критерий Фишера F	160,570
Значимость F	0,000769
Критерий Дарбина-Ватсона d	1,48

Примечание: k_1 и k_2 – число степеней свободы для числителя и знаменателя соответственно.

Таким образом, получены достоверные и адекватные уравнения регрессии (2) контролируемых параметров, достаточно полно характеризующие исследуемый технологический процесс силы прокалывания кожуры дыни.

В финальной части нашего исследования мы рассматривали анализ поверхностей отклика для показателей параметров силы прокалывания кожуры дыни в области факторного пространства. Функции отклика лучше всего представить в графическом виде. На рис. 2 изображены поверхности откликов и линии равных уровней (изолинии) силы прокалывания кожуры дыни в зависимости от различных сочетаний исследуемых параметров: (угла заточки шипа x_1 и диаметра шипа x_2).

Y - сила прокалывания кожуры дыни F , кодир. = $10,0733 + 1,2277 \cdot x_1 + 5,1793 \cdot x_2 - 0,093 \cdot x_1 \cdot x_1 + 0,732 \cdot x_1 \cdot x_2 + 0,418 \cdot x_2 \cdot x_2$,

где x_1 - угол заточки шипа, кодирован.; x_2 - диаметр шипа, кодирован.

Y - силы прокалывания кожуры дыни $F = -1,8829 + 0,0688 \cdot x_1 + 2,1604 \cdot x_2 - 0,0018 \cdot x_1 \cdot x_1 + 0,0928 \cdot x_1 \cdot x_2 - 0,2857 \cdot x_2 \cdot x_2$, (3)

где x_1 - угол заточки шипа, град.; x_2 - диаметр шипа, мм.

Трехмерная диаграмма (рис. 2, 3) дает наглядное представление о том, как показатель Y – силы прокалывания кожуры дыни (F , Н) связан с углом заточки иглы, град и диаметром иглы, мм при фиксированной скорости внедрения $v = 100$ мм/мин (рис. 3).

Цветовые метки или тона серого показывают посредством интенсивности величину силы прокалывания кожуры дыни (F , Н). По ним можно определить область значений угла заточки, град, и диаметра инденторов, мм, в которой сила прокалывания кожуры дыни (F , Н) имеет оптимальное значение (рис 3).

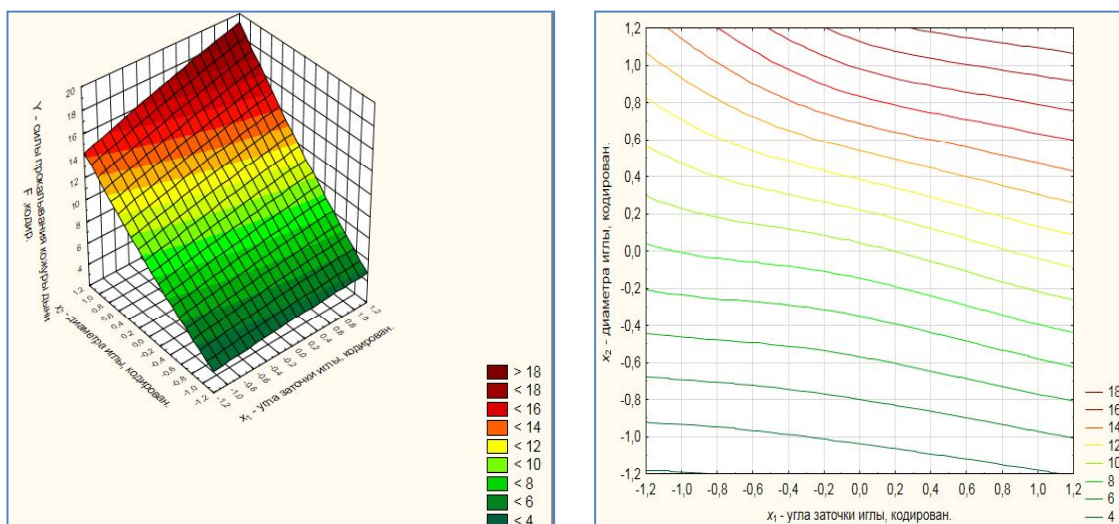


Рисунок 2 - Поверхность отклика и линии равного уровня угла заточки шипа и диаметра иглы в кодированных значениях (А)

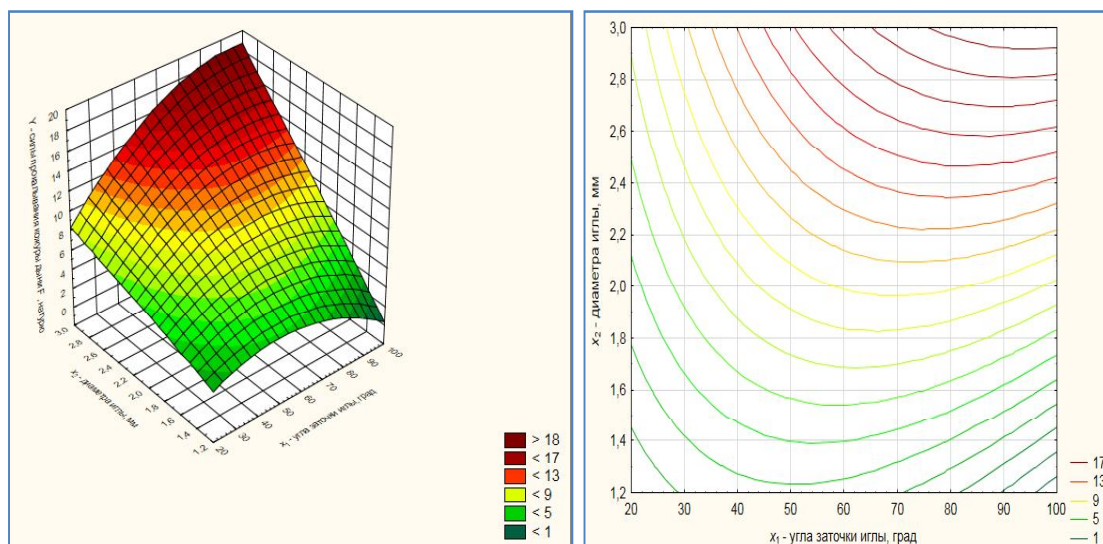


Рисунок 3 - Поверхность отклика и линии равного уровня угла заточки шипа и диаметр шипа в натуральных значениях (Б)

Изолинии или контурные диаграммы представляют собой проекции на горизонтальную плоскость горизонтальных сечений поверхности отклика, полученной в результате аппроксимации экспериментальных данных квадратичной регрессией. Справа от графиков находятся цветные метки, по которым можно определить область значений регулируемых параметров, где функция отклика $Y = F$ имеет оптимальное значение. Для определения оптимального значения Y полученные уравнения регрессии (3) были использованы в качестве целевых функций, а нижний и верхний уровни варьирования независимых переменных приняты за двусторонние ограничения на исследуемые параметры. Решены оптимизационные задачи методом релаксации. В этом случае нами выбирались шаги, исходя из эвристических предположений о виде функции отклика.

В данном случае исходной является точка с координатами $V_0=(30; 2)$.

Критерий оптимизации в исходной точке $U_{opt1}=18,63$ Н.

В последующих преобразованиях получили, что $x_1=39,9$. Координаты новой точки: $V_0=(39,9; 3,78)$. Величина критерия оптимизации $U_{opt}=16,77$ Н, так как дальнейшее изменение факторов x_1 и x_2 не приводит к значительному изменению критерия оптимизации. Результаты решения поставленных выше задач (координаты особых точек и соответствующие значения исследуемых функций откликов Y) приведены в табл. 6.

Таблица 6

Координаты особых точек и значения силы прокалывания кожуры дыни Y

Отклик	Координаты стационарных точек		Значение отклика
	x_1 – угол заточки шипа, град	x_2 – диаметр шипа, мм	
$Y, (F, H) (Y \rightarrow opt)$	39,9	3,78	16,77

При таких рекомендованных значениях параметров:

$x_1 = \alpha$ – угол заточки шипа, град.; $x_2 = d$ – диаметр шипа, мм.

Критерии оптимальности примут следующие значения:

$Y = F$ – сила прокалывания кожуры дыни, Н; $Y = 16,77$ Н.

На основании вышеизложенного можно сделать следующие выводы. Получены достоверные и адекватные уравнения регрессии технологических параметров, характеризующих наиболее полно исследуемый технологический процесс прокалывания кожуры дыни. Разработана математическая модель, которая позволит оптимизировать параметры процесса прокалывания кожуры дыни. Определено оптимальное значение (Y) силы прокалывания кожуры дыни и параметры шипа.

Список литературы

1. Грачев Ю.П. Математические методы планирования экспериментов / Ю.П. Грачев, Ю.М. Плаксин. - М.: ДеЛи. принт, 2005. - 296 с.
2. Медведков Е.Б. Механические характеристики мякоти дыни при сжатии / Е.Б. Медведков, М.Е. Кизатова, А.А. Шевцов и др. // Вестник гос. ун-та им. Шакарима. – 2016. - № 2 (74). – С. 60-65.
3. Боровиков В. Statistica. Искусство анализа данных на компьютере. - 2-е изд.– Изд-во «Питер», 2003. - 688 с.

Получено 16.08.2017

УДК 004.056

Ж.А. Жаныбек, Г.В. Попова

Восточно-Казахстанский государственный технический университет им. Д. Серикбаева,
г. Усть-Каменогорск

ИНФОРМАЦИОННАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ СИТУАЦИОННОГО ЦЕНТРА

Рассмотрены назначение и характеристика ситуационных центров (СЦ) как информационно-технологических объектов, обеспечивающих реализацию ситуационного управления. В качестве фактора проблемы информационной безопасности (ИБ) СЦ принимается различный уровень конфиденциальности обрабатываемой информации. Информационная безопасность представляется как защита информации.

Мақалада ақпаратты-технологиялы объект ретінде жағдай орталықтарының мақсаты мен сипаттамалары қарастырылды. Жағдай орталығының ақпараттық қауіпсіздік факторы ретінде өңделіп жатқан ақпараттың әртүрлі деңгейлі құпиялылығы қарастырылады. Ақпараттық қауіпсіздік ақпаратты қорғау ретінде ұсынылған.

This article considers the purpose and characteristics of situational centers as information technology facilities that ensure the implementation of situational management. The variety of levels of confidentiality related to the processed information is a factor of situational centers information security. Information security is performed as information protection.

Ключевые слова: ситуационный центр; ситуационное управление; конфиденциальность; информационная безопасность; система защиты информации.

Ситуационный центр (СЦ) представляется как комплекс, который концентрирует информацию о подконтрольном пространстве от различных источников и обеспечивает ситуационное управление, принятие управленческих решений с широким использованием информационно-коммуникационных технологий (ИКТ), моделей и методов ситуационного анализа. Ситуационное управление как система становится эффективным, когда необходимо, чтобы «управляющее воздействие субъекта управления основывались на анализе вариантов принятия решения с учетом текущего состояния объекта управления, располагаемых вариантов действий и прогноза последствий принимаемых управленческих воздействий» [1].

Такая необходимость практически постоянно присутствует, когда объектами управления являются большие и сложные объекты, по своей природе являющиеся социотехническими системами. Ими могут быть управленческие, предпринимательские, производственные, финансово-операционные и прочие образования (организации, предприятия, фирмы, финансово-кредитные учреждения и т.д.). Если исходить из этого общего представления, СЦ должен иметь комплексную функциональную направленность обеспечения процессов управления и поддержки принятия решений и включать в себя следующие компоненты информационно-телекоммуникационной системы:

- комплекс аппаратно-программных средств (средства отображения информации, средства хранения информации, средства телекоммуникационные, средства защиты информации);
- комплекс специального программного обеспечения (ПО), реализующий выполнение функциональных задач по назначению СЦ;
- обслуживающий персонал, специально подготовленный для эффективного применения и поддержания функционирования СЦ в заданных режимах с соблюдением мер по информационной безопасности (ИБ).

Организационно СЦ состоит из четырех сегментов [2, 3]:

- 1) руководство органа управления;
- 2) мониторинг состояния контролируемого информационного пространства;
- 3) ситуационный анализ и поддержка процесса принятия управленческих решений, включая ситуационный зал;
- 4) администрирование информационного обеспечения, аппаратно-программных средств и средств защиты информации.

Таким образом, СЦ – это базирующийся на организационно-техническом комплексе информационно-технический объект в системе управления, обеспечивающий реализацию необходимых ИКТ, подготовку и предложение информационно-аналитических решений и поддержку процессов принятия решений на компетентном уровне (лица принятия решений – ЛПР) в режимах ситуационного управления. На его основе должны быть обеспечены мониторинг факторов влияния на развитие происходящих процессов, информа-

ционно-аналитическая поддержка процедур и процессов, позволяющих оперативно анализировать, моделировать, прогнозировать сценарии развития ситуаций и динамично вырабатывать эффективные решения.

Одним из определяющих факторов выбора регламентов и обеспечения управления функционированием СЦ, организации работы каждого из перечисленных компонентов, особенностей выбора технических и инженерных решений при создании и эксплуатации СЦ является характеристика конфиденциальности используемых информационных ресурсов. Как правило, собственные накапливаемые информационные ресурсы СЦ и привлекаемые внешние информационные ресурсы для обеспечения ситуационного управления и принятия решений независимо от вида объекта управления содержат в той или иной степени информацию, требующую контролируемого доступа.

Исходя из этого, в современных условиях при использовании для принятия решений больших объемов информации, различной по уровню конфиденциальности и признаку владения и распоряжения, к СЦ предъявляются повышенные требования по обеспечению ИБ. При этом под обеспечением ИБ в данной работе понимается решение системной задачи защиты информации от несанкционированной утечки информации или изменения (нарушения целостности) при обработке и хранении в информационно-аналитической системе (ИАС) СЦ, передаче в телекоммуникационные системы (ТКС), при реализации технологий ситуационного управления и принятия решений. Хотя это только часть сложной и многоаспектной проблемы обеспечения ИБ автоматизированных информационных систем на объектах информатизации [4].

Поскольку предметом защиты является информация, а СЦ выступает объектом реализации определенных ИТ, то системная задача защиты информации решается на всем технологическом пространстве СЦ в его компонентах, при реализации самих процессов управления, в которых участвует СЦ. С учетом данных предпосылок СЦ формируется как объект защиты, и одним из его системных компонентов должен быть компонент обеспечения защиты информации. Реализация мер организационного, технического характера по защите информации в СЦ возлагается на систему защиты информации (СЗИ), которая при проектировании СЦ как системы является ее обеспечивающей подсистемой [3].

В рамках архитектурного подхода к созданию СЦ базовым положением проектирования СЗИ выступает следующее требование: структурные, технические, технологические и организационные решения по защите информации должны быть неразрывно связаны с проектными решениями по СЦ и обеспечивающей его функционирование инфраструктуре.

По системному представлению СЗИ СЦ является автоматизированной организационно-технической системой управления ИБ и включает в себя функциональную и обеспечивающую части.

Функциональная часть СЗИ СЦ – это совокупность функциональных задач по нейтрализации угроз информации, которые могут иметь различные источники и быть различной природы. Функциональные задачи ставятся и решаются в отношении актуальных для СЦ угроз. При этом обеспечивается:

- рассмотрение всех угроз информации, влияющих на состояние защиты информации в СЦ;
- ранжирование актуальных угроз;
- введение в классификационную схему угроз информации всех выделенных актуальных угроз, учитываемых при создании СЗИ СЦ.

Схема формирования функциональных комплексов показана на рис. 1.

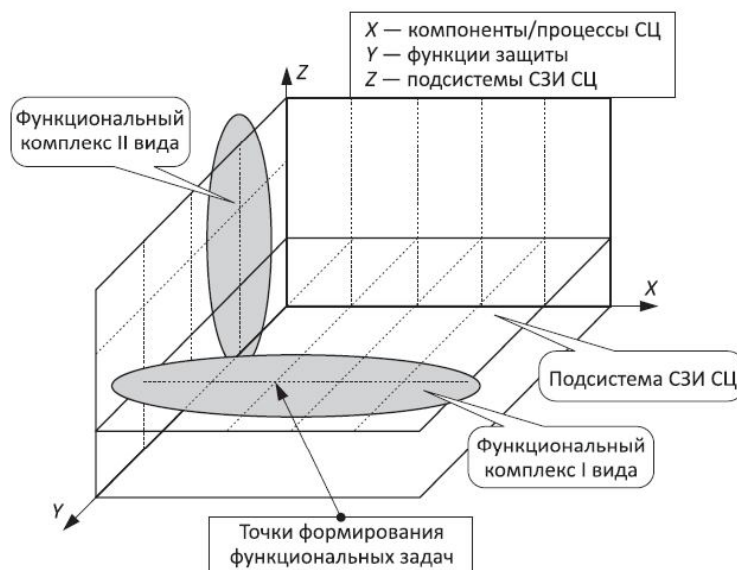


Рисунок 1 - Схема формирования функциональных комплексов

Обеспечивающая часть СЗИ СЦ – совокупность мер и средств, технических, организационных и правовых решений, обеспечивающих реализацию функциональных задач. К обеспечивающей части предъявляются общесистемные требования [5]:

- должны быть разработаны и доведены до уровня регулярного использования все необходимые механизмы гарантированного обеспечения требуемого уровня защиты информации;
- механизмы требуемого уровня защиты информации должны существовать в практической реализации в виде средств и технологий.

Проектирование и последующая эксплуатация СЗИ СЦ должна базироваться на концептуальных нормативных документах: модели угроз информационной безопасности, модели вероятного нарушителя и политики информационной безопасности СЦ. Модели угроз и вероятного нарушителя являются исходными концептуальными документами, подготавливаемыми в основном по результатам предпроектного обследования. Они позволяют определить актуальные угрозы, уязвимости, конкретизировать постановку задач по защите информации и тем самым обеспечить минимизацию затрат на ИБ. Схема структурных отношений между компонентами СЗИ СЦ представлена на рис. 2.

Ситуационные центры являются объектами информационной деятельности с отчетливо выраженной спецификой. Они должны обеспечить безопасное агрегирование получаемых из различных источников больших объемов различной информации и ее информационно-аналитическую обработку средствами собственной инфраструктуры.

В связи со спецификой СЦ, их усложнением и бурным развитием в настоящее время появляются новые актуальные задачи по обеспечению ИБ СЦ [6-8]. Практическое решение этих задач все более подтверждает тот факт, что функции защиты информации становятся неотъемлемой частью функциональных сервисов обработки информации и архитектурных решений при построении системных инфраструктурных компонентов. Это, безусловно, влияет на проектные решения СЗИ СЦ.

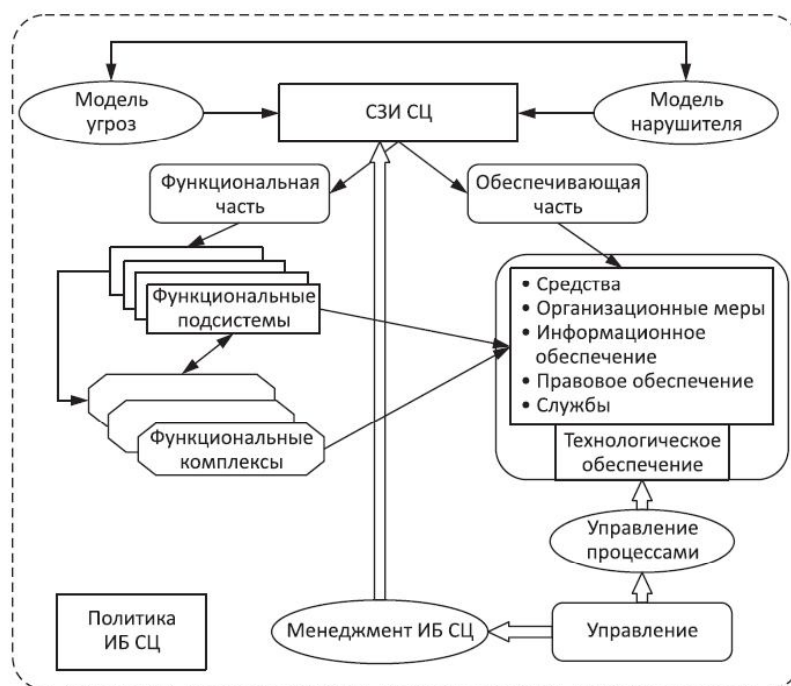


Рисунок 2 - Схема структурного отношения компонентов

К таким актуальным задачам можно отнести:

- создание защищенной шины информационного взаимодействия, способной объединить разнородные первичные ресурсы в случае их выраженной территориальной распределенности;

- построение СЦ как частного облака, когда возникает проблема виртуального пространства взаимодействия; это приводит к усложнению СЗИ СЦ с учетом специфических угроз, присущих виртуальной среде исполнения;

- реализацию режима чрезвычайной ситуации, когда все внимание СЦ направляется на формирование новостного информационного потока исключительно вокруг интересующего события. В этом случае уровень конфиденциальности СЦ может быть повышен до максимального уровня. Возможен разрыв стыков с открытыми контурами СЦ.

Перечисленные и ряд других актуальных задач обеспечения ИБ СЦ, особенно связанных с планируемым созданием в сетей распределенных СЦ, требуют своего достаточно быстрого и качественного решения, чтобы поддержать большую востребованность СЦ для решения задач управления в современном быстро меняющемся обществе.

Список литературы

1. Словарь терминов МЧС. — М.: Федеральное государственное унитарное авиационное предприятие МЧС России. - EdwART, 2010.
2. Зацаринный А.А. Системы ситуационных центров специального назначения. Основные определения, понятия и подходы к созданию / А.А. Зацаринный, А.П. Сучков // Межотраслевая информационная служба. - 2015. - № 4. - С. 31-41.
3. Зацаринный А.А. Организационные и системотехнические подходы к построению современных ситуационных центров // Методы построения и технологии функционирования ситуационных центров: Сб. науч.-технич. статей / Под ред. А.А. Зацаринного. — М.: ИПИ РАН, 2011. — С. 10-25.

4. Королёв В.И. Методология построения комплексной защиты информации на объектах информатизации // Системы высокой доступности, 2009. - Т. 5. - № 4. - С. 4-24.
5. Королёв В.И. Интегрированные системы безопасности и влияние информационных рисков на деятельность организации / В.И. Королёв, И.Н. Сухотин, А.В. Королёв // Технологии безопасности: Официальный отчет X Междунар. форума: Сб. материалов / Под. ред. И.К. Филоненко, Н.В. Александровой. – М.: ПРОЭКСПО, 2005. - С. 284-291.
6. Андреев В. Защита информации в ситуационном центре – ключевые аспекты: Типовые и специальные задачи // Connect, 2012. - № 5. – Режим доступа: <http://www.connect-wit.ru/category/agazine/connect-wit-2015-7-8>.
7. Никифоров Д. Об информационной безопасности будущей системы ситуационных центров в России // Connect WIT, 2015. - № 7-8. – Режим доступа: <http://www.connect-wit.ru/category/magazine/connect-wit-2015-7-8>.
8. Шарай В.А. Логико-вероятностные модели угроз информационной безопасности ситуационных центров / В.А. Шарай, А.К. Малашихин // Научные труды КубГТУ, 2014. - № 6. - Режим доступа: <http://ntk.kubstu.ru/file/306>.

Получено 16.08.2017

УДК 538.911

F.M. Noskov, L.I. Kveglis

Siberian Federal University, g. Krasnoyarsk, Russian Federation

M.A. Sadenova

D. Serikbayev East Kazakhstan State Technical University, g. Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

**DESCRIPTION OF POLYMORPHOUS TRANSFORMATIONS IN METALS ON THE BASIS OF THE CLUSTER
MODEL OF STRUCTURAL FORMATION**

В работе рассматриваются процессы структурообразования, происходящие при полиморфных превращениях в металлах. С позиций кластерного подхода к структурообразованию выделена модель полиморфных переходов в металлах с ГЦК-, ГПУ- и ОЦК-решетками. В основе модели лежит представление о сохранении объема октаэдрических кластерных элементов соответствующих решеток. Сделанные расчеты показывают хорошее совпадение расчетных данных с модельными представлениями, предложенными в работе.

Жұмыста металдарда өтетін полиморфтық ауысудағы құрылымтүзілу процесі қаралады. Кластерлік әдіс тұрғысынан құрылымтүзілуге ГЦК-, ГПУ- және ОЦК-торлы металдардағы полиморфты ауысулардың үлгісі ұсынылған. Үлгінің негізіне тиісті торлардың октаэдрикалық кластерлік элементтер көлемінің сақталуы жатады. Жасалған есептеулер жұмыста ұсынылған үлгілік пайымдаулар мен есептік деректердің сәйкес келуін көрсетеді.

The work deals with the processes of structure formation that take place during polymorphic transformations in metals. From the positions of the cluster approach to structure formation, a model of polymorphic transitions in metals with FCC, HCP, and BCC lattices is proposed. The model is based on the idea of preserving the volume of the octahedral cluster elements of the corresponding lattices. The calculations made show a good coincidence of the calculated data with the model representations proposed in the paper.

Keywords: polymorphic transition; crystalline clusters; FCC, HCP, BCC lattice.

Research of features of polymorphic transitions in metals attract the attention of scientists for centuries. The understanding and prediction of the characteristics of polymorphic transitions is of great practical importance, because of the polymorphic transitions in equilibrium there are more than a dozen metals [1-3]. In nonequilibrium conditions, the list of metals capable of experiencing polymorphic transformation is expanding [4]. Of particular importance in the study of polymorphic transitions is the so-called martensitic transformation, which plays a decisive role in the phenomenon of hardening [5, 6].

At present, the most common method for describing the change in the type of crystal lattices in polymorphic transitions is the model of relative displacements of planar grids [7-9]. We, as well as the authors of numerous other works on the peculiarities of structural transformations, encountered the difficulty of describing the evolution of the structure, which is associated with various designations of atomic planes and vectors of direct and inverse lattices for structures with different symmetries.

In parallel with the model of plane meshes, was an approach of the geometrical volume [10]. Known method of modeling a cooperative movement of atoms in symmetric systems, while preserving their connectivity based on the representation of each structural state in the form of combinations of elementary crystalline clusters [11-21]. Consider the description of the most common types of crystal lattices in metals within the framework of the cluster model.

Pearson [11] describes the structure of the BCC lattice as a system consisting of 6 abnormal octahedra (Fig. 1, a). Such an octahedron has a height equal to the edge of the cube of the BCC lattice a , and the other two heights are equal $a \times \sqrt{2}$. Six irregular octahedra constitute a dodecahedron with twelve faces, shaped like rhombuses (rhombododecahedron). One rhombus height is equal to the edge of the cube of the BCC lattice a , and the other height is equal to $a \times \sqrt{2}$. Thus, the described abnormal octahedron can be represented as an elementary cluster of a BCC lattice.

According to [13] FCC-lattice can be represented as a combination of one correct octahedrons surrounded by the right tetrahedra associated common triangular faces (Fig. 1, b). Hexagonal close-packed (HCP) lattice can be represented as a combination of linked pairs correct octahedra, alternating with pairs of correct tetrahedra (Fig. 1). Thus, the elementary clusters FCC and HCP lattices are the correct octahedron (all of height equal to the edge of the cube a , and edges are equal $\frac{a}{\sqrt{2}}$) and a regular tetrahedron (all heights are equal $\frac{a}{\sqrt{3}}$ and whose edges are respectively equal to $\frac{a}{\sqrt{2}}$) [13].

The difference between FCC and HCP lattices is in the order of the arrangement of tetrahedra and octahedra. Thus, the interplanar distance d_{200} of the HCP lattice is equal to the d_{111} FCC lattice, i.e. one lattice can easily transfer to another as a result of minor displacements of individual atoms. The maximum value of such displacements is $\frac{a}{\sqrt{6}}$, as shown, for example in [22].

We emphasize that the edges of the octahedral and tetrahedral clusters of the constituent FCC or HCP lattice are equal within the crystal lattice of the same type, as is clearly seen from Figure 1, b, c.

In the literature, many examples of transitions from HCP to FCC are known with increasing temperature, this can be easily explained [13]. It is known that the density of space filling by atoms in FCC and HCP lattices is the same and is 0.74. The grid model of crystal structures assumes the arrangement of triangular grids in the FCC lattice in the $ABCABC$ system, and in the HCP lattice by the $ABABAB$ system. Thus, in order to move from the FCC lattice to the HCP lattice, it is sufficient to move one flat triangular grid C from the row of ABC by an amount $\frac{a}{\sqrt{6}}$. However, in reality, such an operation is impossible, while the displacement of individual atoms is quite possible.

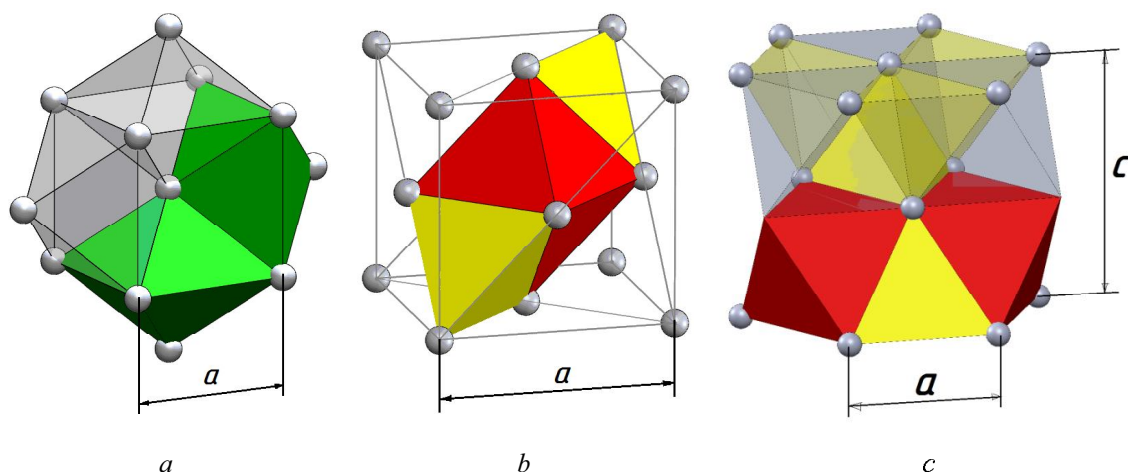


Figure 1 - The clustered representation of the crystal structures: a – abnormal octahedral clusters the BCC lattice [11]; b – rhombohedral cluster unit FCC-lattice [13], consisting of tetrahedral and octahedral cluster; c – cluster assembly of HCP-grid consisting of tetrahedral and octahedral clusters [11, 13]

The transition from BCC to HCP explain to ambiguous [11]. In our opinion [22], during phase transformation can occur by the displacement of atoms in BCC lattice at a distance equal to $0.15 \times a$ FCC lattice (the distance shown by arrows up and down in Figure 2).

An analogous transition can be proposed for the transition of the BCC lattice to FCC. To do this, it is also necessary to translate the abnormal BCC octahedron into the correct FCC lattice octahedron.

At high voltages, the lengths of all interatomic bonds tend to "equalize", which is easily related to repulsive energy, usually described by potentials $\frac{B}{r^n}$, where r is the interatomic distance, n is the natural number of numbers, and B is a constant [23]. The author [23] showed that repulsion in symmetric structures, such as clusters of the FCC lattice, plays a much smaller role. At high pressures, when the energy of the system is determined mainly by repulsive forces, those structures in which all bonds have approximately the same length are the most stable [23].

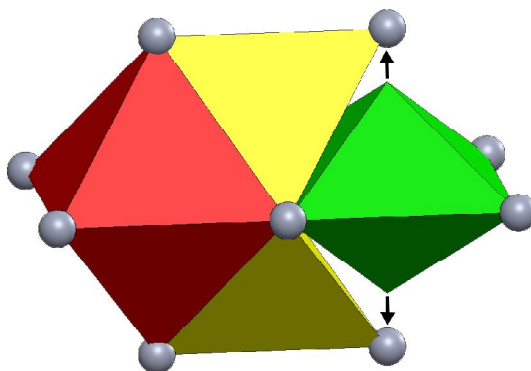


Figure 2 - Formation of a FCC lattice from an octahedral cluster BCC lattice (arrows indicate displacement of BCC atoms to the position of FCC atoms) [22]

In the Figure 2 shows that the green octahedral cluster, the BCC is significantly inferior to that of red octahedral FCC cluster. However, in accordance with our hypothesis, the amount of

these two cluster elements must be equivalent to one another. This can be achieved by small displacements of the atoms of the clusters from their idealized positions shown in Figure 2.

To analyze the possibility of the transition shown in Figure 2, the geometric parameters for the correct octahedron of a FCC or HCP lattice are calculated, as well as for an abnormal BCC octahedron (Figure 3). In Figure 3 shows the dependence of the volume of a correct octahedron and an abnormal octahedron of the bcc lattice on the length of the rib, as well as the lattice parameter of the FCC lattice composed of correct octahedra and tetrahedra with a given length of the edge.

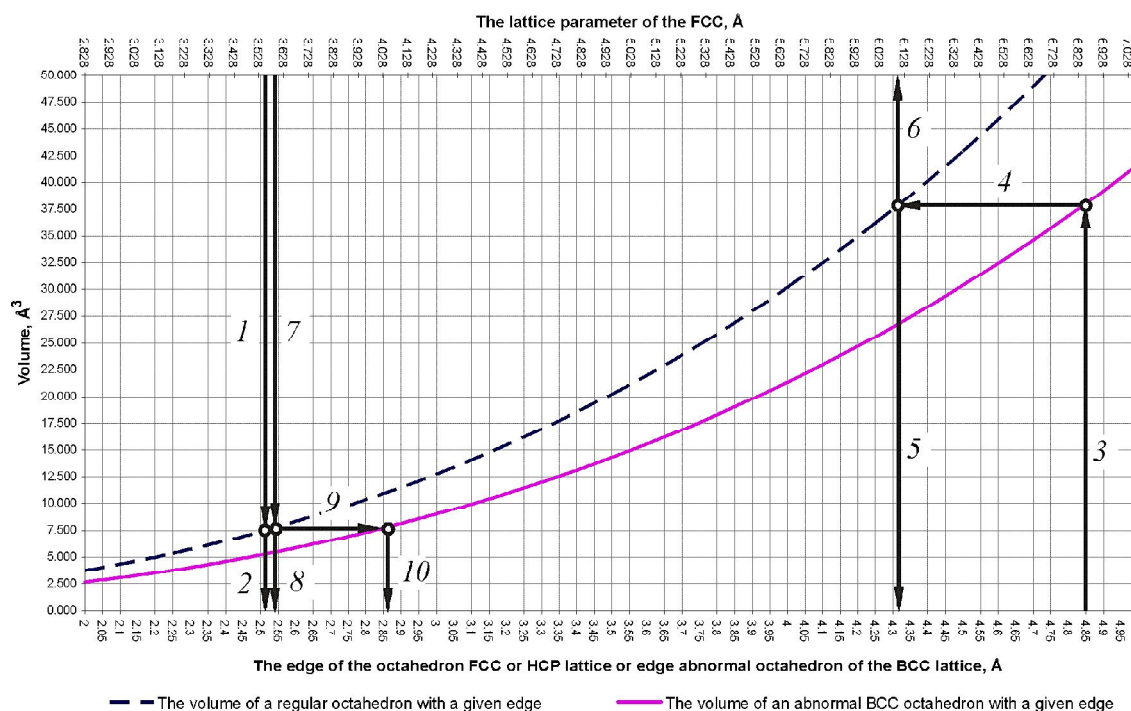


Figure 3 - Nomogram for the determination of lattice parameters in polymorphic transitions in metals

Consider the example of using nomograms. Cobalt It has $\beta\text{-Co} \rightarrow \alpha\text{-Co}$ a transition at 450 °C (table. 1). $\beta\text{-Co}$ a FCC crystal lattice with parameter $a=3,554 \text{ \AA}$, $\alpha\text{-Co}$ – lattice HCP with parameter $a=2,514 \text{ \AA}$. Assuming the cluster model of structure formation, the transition of $\beta\text{-Co} \rightarrow \alpha\text{-Co}$ is a small displacement of atoms in an elementary crystal clusters is less so interatomic distance (see Figure 1,b,c) that changes the order of octahedra and tetrahedra in the original FCC and the final HCP lattices. It is important that the elementary octahedral and tetrahedral clusters must be preserve volume in accordance with our hypothesis.

To analyze this transition, we use the nomogram in Figure 3. We find the crystal lattice parameter of the FCC corresponding to $\beta\text{-Co}$ and draw arrow 1 on the line describing the volume of the initial FCC phase octahedron. Knowing that the volumes of the octahedra of the initial and final phases must coincide, and therefore the edges of these correct octahedra must coincide, we draw arrow 2 on the axis describing the length of the edge of the octahedron of the HCP phase. Since the parameter a of the HCP phase is equal to the length of the edge of the correct octahedron (and tetrahedron) of the HCP lattice (see Figure 1,c), then arrow 2 will indicate it. Indeed, this characteristic is $2.514 \text{ \AA}$ (as in Figure 3 and the data in Table).

Consider another example of working with the nomogram. It is known that strontium equilibrium undergoes two phase transformations upon cooling: $\gamma\text{-Sr} \rightarrow \beta\text{-Sr}$ at 605 °C and $\beta\text{-Sr} \rightarrow \alpha\text{-Sr}$ at 215 °C. The characteristics of the various phases are given in tab. 1. Examine the lattice parameters of strontium in phase transitions. The transition $\gamma\text{-Sr}$ (BCC) $\rightarrow$ $\beta\text{-Sr}$ (HCP) can be traced back, taking as a basis the hypothesis about the equality of the volumes of the initial abnormal octahedron of BCC and the finite, the correct octahedron HCP. For this purpose, find the parameter corresponding to the edge length of the abnormal octahedron of the BCC lattice (it coincides with the parameter a of the crystal lattice of the BCC, see Figure 1, a). Determine the volume of irregular octahedron of BCC lattice in the direction of arrow 3 in Figure 3. The arrow 4 determine the correct volume of the octahedron HCP grid and the corresponding size of the source abnormal octahedron of the BCC, and according to the arrow 5 the edge length of the octahedron proper HCP grid (matching the parameter a). Again, as in the case of cobalt there is a good coincidence of the parameters of a real phase transition and descriptions made on the basis of the cluster model. The transition of $\beta\text{-Sr}$ (HCP) $\rightarrow$ $\alpha\text{-Sr}$ (FCC) is traced in direction of the arrow 6 and shows good agreement with experiment (see Figure 3 and table).

On the basis of the proposed model, calculations were made of the parameters of the crystal lattices of the elements, which undergo phase transitions in the equilibrium state, and the results are summarized in Table. Experimental data on the types and parameters of crystal lattices in the first five columns of Table 1 are given by [24].

From Table follows that the proposed method makes it possible, with an error not exceeding 1%, for the majority of pure metals to model the parameters of the crystal lattices of phases formed during polymorphous transformations.

Experimental and calculated parameters of crystal lattices of phases experiencing polymorphic transformations

Transformation	Type of initial lattice	Type of final lattice	The crystal lattice parameter of the initial phase a , Å	The parameter of the crystal lattice of the final phase is a , Å	The calculated parameter of the crystal lattice of the final phase, Å	The difference between the real and calculated parameters of the crystal lattice, %
$\beta\text{-Co} \rightarrow \alpha\text{-Co}$	FCC	HCP	3,554	2,514	2,513	0,04
$\delta\text{-Fe} \rightarrow \gamma\text{-Fe}$	BCC	FCC	2,93	3,671	3,692	-0,56
$\gamma\text{-Fe} \rightarrow \alpha\text{-Fe}$	FCC	BCC	3,65	2,89	2,897	-0,24
$\delta\text{-Mn} \rightarrow \gamma\text{-Mn}$	BCC	FCC	3,08	3,862	3,881	-0,48
$\beta\text{-Ca} \rightarrow \alpha\text{-Ca}$	HCP	FCC	3,94	5,56	5,572	-0,22
$\beta\text{-Li} \rightarrow \alpha\text{-Li}$	BCC	HCP	3,5093	3,086	3,126	-1,31
$\beta\text{-Th} \rightarrow \alpha\text{-Th}$	BCC	FCC	4,12	5,0843	5,191	-2,10
$\gamma\text{-Sr} \rightarrow \beta\text{-Sr}$	BCC	HCP	4,85	4,32	4,321	-0,02
$\beta\text{-Sr} \rightarrow \alpha\text{-Sr}$	HCP	FCC	4,32	6,085	6,109	-0,40
$\gamma\text{-La} \rightarrow \beta\text{-La}$	BCC	FCC	4,26	5,296	5,367	-1,35
$\beta\text{-La} \rightarrow \alpha\text{-La}$	FCC	HCP	5,296	3,754	3,745	0,24
$\beta\text{-Tl} \rightarrow \alpha\text{-Tl}$	BCC	HCP	3,882	3,456	3,458	-0,07
$\beta\text{-Ti} \rightarrow \alpha\text{-Ti}$	BCC	HCP	3,28	2,951	2,922	0,98
$\beta\text{-Zr} \rightarrow \alpha\text{-Zr}$	BCC	HCP	3,62	3,232	3,225	0,21
$\beta\text{-Hf} \rightarrow \alpha\text{-Hf}$	BCC	HCP	3,615	3,195	3,221	-0,80
$\delta\text{-Ce} \rightarrow \gamma\text{-Ce}$	BCC	FCC	4,12	5,143	5,191	-0,93
$\gamma\text{-Ce} \rightarrow \beta\text{-Ce}$	FCC	HCP	5,143	3,65	3,637	0,37

The method shows good results when analyzing not only pure metals, but also certain alloys. As an example, let us consider the phase transition in ferromanganese alloys with a manganese content of 15%. The data from [25] show that solid manganese solutions in crystalline lattices based on α - (BCC), γ - (FCC) and ϵ - (HCP) iron can be present in this alloy, with parameters a equal to 2,868, 3,586 and 2,535 Å, respectively. To trace the transition of FCC $\rightarrow$ HCP $\rightarrow$ BCC in this alloy it is possible along the lines 7, 8, 9, 10 (Figure 3).

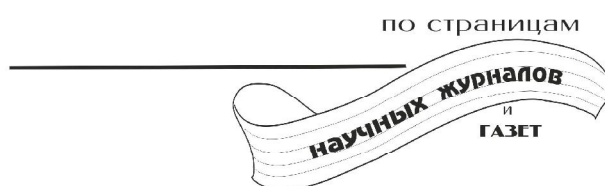
Thus, it was shown that the cluster model of structure formation is adequate and allows modeling the parameters of crystal lattices of phases under polymorphic transformations both in pure metals and in certain metal alloys.

References

1. King H.W. Struktura chistyykh metallov [The structure of pure metals] In the book: Physical Metallurgy. Ed. R. Kahn. 1967, p. 11-52. (inRuss).
2. Verma A.R., P. Krishna Polimorfizm i politipizm v kristallakh [Polymorphism and polytypism in crystals] Moscow: Mir, 1969. - 274 p. (inRuss).
3. Christian J.W. Fazovyye prevrashcheniya [Phase transformations] In the book: Physical Metallurgy. Ed. R. Kahn. M."The World", 1968, p. 227-340. (inRuss).
4. V.D. Blank, E.I. Estrin. Fazovyye prevrashcheniya v tverdykh telakh pri vysokom davlenii [Phase transformations in solids at high pressure] Moscow: Fizmatlit, 2011. - 410 s. (inRuss)
5. V.A. Lobodyuk, E.I. Estrin. Martensitnyye prevrashcheniya [Martensitic transformations] Moskva : Fizmatlit, 2009. - 351 s. (inRuss).
6. M.P. Kashchenko Volnovaya model' rosta martensita pri γ - α prevrashchenii v splavakh na osnove zheleza [Wave model of martensite growth in the γ - α transformation in iron-based alloys] Izhevsk: SIC Regular and chaotic dynamics, Izhevsk Institute of Computer Research, 2010. - 280 p. (inRuss).
7. B.A. Bilbi, I.V. Khristian. Martensitnyye prevrashcheniya [Martensitnye Transformations] UFN, 1960, - 70, - 515-564 (inRuss).
1. 8. R.U. Kan, P.T. Khaazen Fizicheskoye metallovedeniye Tom 2 Fazovyye prevrashcheniya v metallakh i splavakh i splavy s osobymi fizicheskimi svoystvami [Physical metallurgy Vol. 2 Phase transformations in metals and alloys and alloys with special physical properties] M: Metallurgiya, 1987. - 624 p. (inRuss).
8. V.G. Pushin, V.V. Kondrat'yev, V. N. Khachin; Predperekhodnyye yavleniya i martensitnyye prevrashcheniya [Pretransitional phenomena and martensitic transformations] RAN. Ur. otd-niye. In-t fiziki metallov, Sib. otd-niye. - Yekaterinburg : UrO RAN, 1998. - 367 p. (inRuss).
9. F. Lavez Prostranstvennyye ogranicheniya v geometrii kristallicheskih struktur metallov i intermetallicheskih soyedineniy [Spatial restrictions in the geometry of crystal structures of metals and intermetallic compounds] Stability of phases in metals and alloys M.: Mir, 1970. - P. 244-258. (inRuss).
10. Pirson U., Kristallokhimiya i fizika metallov i splavov [Crystal chemistry and physics of metals and alloys] M.: Mir, 1977. - T. 2. - 472 p. (inRuss).
11. Bul'yenkov, N. A. Obosnovaniye ponyatiya «kristallicheskiy modul'» [Substantiation of the concept of "crystal modulus"] Vestnik Nizhegorodskogo universiteta im. N.I. Lobachevskogo. Ser. Fizika tv. tela. - 1998. - Vyp. 1. - S. 19-30. (inRuss).
12. N. A. Bul'yonkov, D. L. Tytik Modul'nyy dizayn ikosaedricheskikh metallicheskih klasterov [Modular design of icosahedral metal clusters] Izvestiya AN.Ser.khimicheskaya. - 2001. - № 1. - S. 2-19. (inRuss).
13. V.S. Kraposhin, A.L. Talis, Ya. Van Geometricheskaya model' polimorfnykh prevrashcheniy v titane i tsirkonii [Geometric model of polymorphic transformations in titanium and zirconium] MIOM. - 2005. - №9. - P. 18-22. (inRuss).
14. V.S. Kraposhin, A.L. Talis Kristallografiya i veshchestvo [Crystallography and matter] Nature. - 2014. - No. 11. - P. 3-15. (inRuss).
15. V.S. Kraposhin, A.L. Talis Kombinatorika i prochnost' stali [Combinatorics and strength of steel] Nature. - 2014. - No. 12. - P. 3-12. (inRuss).
16. V.S. Myasnichenko, M.D. Starostenkov Primeneniye predstavleniya o strukturnykh mnogogrannikakh zapolneniya koordinatsionnykh sfer v ob'yemnykh kristallakh k probleme poiska

- ustoychivyykh form nanoklasterov [The application of the concept of structural polyhedra filling the coordination spheres in bulk crystals to the problem of searching for stable forms of nanoclusters. I] Fundamental Problems of Modern Materials Science. -2011. - Т. 8. - No. 2. - P. 49-52. (inRuss).
17. V.S. Kraposhin, A.L. Talis, M.N. Pankova. Politopnyy topologicheskiy podkhod k opisaniyu martensitnogo prevrashcheniya [The polytopic topological approach to the description of the martensitic transformation] Metal Science and Heat Treatment of Metals. - 1999. - № 8. С.23-28. (inRuss).
18. F.C. Frank, J.S. Kasper Complex alloy structures regarded as sphere packings. I. Definitions and basic principles Acta Cryst. – 1958. – V. 11. – P. 184–189.
19. V.S. Kraposhin, A.L. Talis, M.N. Pankova Politopnyy topologicheskiy podkhod k opisaniyu martensitnogo prevrashcheniya [The polytopic topological approach to the description of the martensitic transformation] Metal Science and Heat Treatment of Metals. - 1999. - № 8. С.23-28. (inRuss).
20. V.S Kraposhin., A.L. Talis, J.M. Dubois Structural realization of the polytope approach for the geometrical description of the transition of a quasicrystal into a crystalline phase J. Phys.: Condens. Matter. – 2002. –V.14. – P.8987–8996.
21. I. Kveglis, F.M. Noskov, M.N. Volochaev, A.V. Dzhes Martensitnyye prevrashcheniya v nikelide titana cherez promezhutochnuyu fazu s GTSK-reshetkoy [Martensitnye transformations in titanium nickelide through an intermediate phase with an fcc lattice] Phys. Mesomech. - 2016. - Т. 19. - No. 2. - P. 100-107. (inRuss).
22. Berdett, J. Khimicheskaya svyaz' [Chemical bond] Moscow: The World, 2008. - 245 p. (inRuss)
23. Metallovedeniye i termicheskaya obrabotka stali [Metallurgy and heat treatment of steel: a handbook: in 3 tons] ed. ML Bernshtein and AG Rakhshadt. - Т. 1 - М.: Metallurgy, 1983 - 352 p. (inRuss).
24. Gudremon, E. Spetsial'nyye stali [Special steel] in 2 tons Т. 1 - М.: Metallurgy, - 1966. - 736 p. (inRuss).

Получено 16.08.2017



ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЙ СТАЛО БОЛЬШЕ

Наша планета переживает пик частоты мощных землетрясений. С 1977 по 1999 год не случилось ни одного сейсмического явления с магнитудой 8,5 баллов и выше. Но с тех пор до апреля 2017 года таких сильных землетрясений было уже шесть. Подобные пики отмечались и ранее. Так, с 1950 по 1965 год произошло семь катастроф с магнитудой 8,5 баллов и более.

«Наука и жизнь» № 10, 2017