Таблица 1.

Влияющий элемент	Содержание элементов гипотетического образца после приращения содержания влияющего элемента, %				Поверхностная плотность, $г/см^2$
	Cr	Fe	Ni	Ir	
Cr	22,85	22,4	22,4	32,35	0,0001
Fe	22,4	22,85	22,4	32,35	0,0001
Ni	22,4	22,4	22,85	32,35	0,0001
Ir	22,4	22,4	22,4	32,8	0,0001
m	22,5	22,5	22,5	32,5	0,00015
Образец сравнения	22,5	22,5	22,5	32,5	0,0001
Относительная среднеквадратическая погрешность σ по данным 15 определений, %	0,07	0,06	0,06	0,11	

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Дуймакаев Ш.И., Тарнопольский М.Г., Дуймакаева Т.Г., Шполянский А.Я. / Заводская лаборатория. 1993. №11. С. 16-19.
2. Дуймакаев Ш.И., Тарнопольский М.Г., Дуймакаева Т.Г., Шполянский А.Я. / Заводская лаборатория. 1994. №4. С. 18-20.

ГРАДУИРОВКА УРАВНЕНИЙ СПОСОБА ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ПОПРАВОК С ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫМ ПОСТРОЕНИЕМ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ СВЯЗИ

Дуймакаев Ш.И., Сорочинская М.А., Дубинина Ю.А., Цветянский А.Л.
Ростовский государственный университет
Ростов-на-Дону, Россия

Применительно к РСФА гомогенных образцов обоснована целесообразность построения уравнений связи следующим образом:

1. Строят на основе планирования по Шеффе [1] феноменологические уравнения [2] общего вида (1):

$$I_A = f(C_A, C_B, ...). \quad (1)$$

2. По построенным моделям для соответствующих составов рассчитывают интенсивности флуоресценции элементов, которые используют далее для построения уравнений способа теоретических поправок (ТП) и которые можно представить в общем виде (2):

$$C_A = \varphi(I_A, I_B, ...). \quad (2)$$

Т.е. в рамках способа ТП используют не теоретические зависимости интенсивности элемента A от состава, а феноменологические зависимости, полученные на основе реального градуировочного эксперимента. Это перспективно применительно к РСФА гетерогенных образцов.

В случае, когда феноменологические («прямые») уравнения (1) строить на основе активного планирования эксперимента не представляется возможным, можно построить их на основе пассивного эксперимента.

Для описания 4-компонентной системы *1-Ni, 2-Zn, 3-Ge, 4-Mo* построены на основе планирования по Шеффе феноменологические (1а) и обобщенные (2а) уравнения связи:

$$I_i = \sum_{1 \le i \le q} \gamma_i C_i + \sum_{1 \le i < j \le q} \gamma_{ij} C_i C_j , \quad (1а)$$

$$C_i = \sum_{1 \le i \le q} \beta_i I_i + \sum_{1 \le i < j \le q} \beta_{ij} I_i I_j , \quad (2а)$$

где C_i - содержание *i*-го компонента пробы; β_i, β_{ij}; γ_i, γ_{ij} - коэффициенты полинома; I_i, I_j - относительные интенсивности линий соответствующих компонентов.

Современный уровень развития физики рентгеновских лучей позволяет с высокой точностью рассчитывать относительные интенсивности флуоресценции элементов гомогенного образца известного химического состава. Это позволяет проверить адекватность моделей (1а) и (2а) с использованием теоретических интенсивностей.

Интенсивности флуоресценции элементов, рассчитанные по формулам вида (1а), используют далее для построения уравнений способа ТП с использованием модели «сжимаемого образца».

Коэффициенты влияния вычисляют по формулам

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{I_i^{OC}} \cdot \frac{\partial I_i}{\partial C_j}, \quad (3)$$

где I_i^{OC} - относительные интенсивности линий соответствующих компонентов образца сравнения.

Исправление измеренной интенсивности на межэлементные влияния по формуле (4)

$$I_i^{испр} = I_i^{изм} \cdot \left(1 - \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ij} \Delta C_j\right) \qquad (4)$$

позволяет по зависимости вида (5)

$$C_i = W_i\left(I_i^{испр}\right) = \frac{C_i^{OC}}{I_i^{OC}} \cdot I_i^{испр} \qquad (5)$$

найти содержание определяемого элемента (компонента).

Диапазон изменения содержания элементов в анализируемых образцах 2-4% (*Ni*), 6-8% (*Zn*), 24-32% (*Ge*), 56-66% (*Mo*).

Эксперимент на математической модели в приближении возбуждения флуоресценции смешанным первичным излучением позволил получить результаты анализа с относительной среднеквадратической погрешностью $\sigma = 0{,}14\%$ (по данным 56 определений). Анализ тех же образцов с использованием «обобщенных» уравнений [3] общего вида (2) дал $\sigma = 0{,}26\%$.

Обобщенные уравнения построены на основе «квазиактивного» планирования (использовано допущение, что интенсивность элемента A пропорциональна содержанию элемента A, что справедливо только в первом приближении). При этом надо иметь в виду, что феноменологические уравнения (1) являются более корректными (определенными, однозначными), нежели «обобщенные» уравнения (2). Действительно, в любом случае факторы – содержания элементов коррелированы в меньшей степени, нежели факторы – интенсивности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Чемлева Т.А., Микешина Н.Г. В кн.: Новые идеи в планировании эксперимента. Под ред. В.В. Налимова. М.: Наука, 1969. С. 199-208.
2. Блохин М.А., Белов В.Т., Дуймакаев Ш.И., Цопова-Гречишина Л.Н. / Заводская лаборатория. 1973. №9. С. 1081-1085.
3. Белов В.Т., Дуймакаев Ш.И. / Заводская Лаборатория. 1974. №8. С. 958-960.

ОБОБЩЕННАЯ ЗАДАЧА ДИФФУЗИИ НА ПОЛУПРЯМОЙ

Мейланов Р.П., Назаралиев М.А., Бейбалаев В.Д., Шабанова М.Р.
Дагестанский государственный университет
Махачкала, Россия

В связи с проникновением идей фрактальной геометрии в современную науку предпринимаются активные попытки внедрения зависимостей с дробной размерностью для описания различных физико-химических процессов [1-4]. В ряде работ [1,5,6] показано, что в ветвящихся фрактальных структурах могут реализовываться сверхмедленные процессы переноса. Вместе с тем оказалось, что процессы, происходящие во фрактальных средах, можно описывать с помощью дифференциальных уравнений, содержащие дробные производные вместо обычных производных целого порядка.

В [1,2] показано, что ряд физико-химических систем, которые могут быть описаны уравнениями в дробных производных, должны содержать в себе каналы, входящие в состав ветвящейся фрактальной структуры.

Такими системами могут быть процессы теплопереноса и массопереноса в перколяционных кластерах, фрактальных и пористых средах. Причем [1,2] получено, что показатель дробной производной по времени соответствует доли каналов (ветвей), открытых для протекания. В [5] показано, что аномальная диффузия (диффузия Леви) имеет фрактальную природу, и получена взаимосвязь порядка дробной производной с показателями масштабного преобразования времени и Херста.

Рассмотрим обобщенную задачу диффузии на полупрямой:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial t^\alpha} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \\ &u(0,t) = A \qquad 0 < x < +\infty \qquad (1) \\ &\qquad\qquad\qquad 0 < t < +\infty \\ &u(x,t=0) = u(x,0) \end{aligned}$$

где t- время, u(x,t)-концентрация диффундирующего компонента; $\alpha -$ дробный порядок производной (характеризующий долю каналов, открытых для протекания), 0< α <1, D^2 -эффективный коэффициент диффузии на фрактале.

Для учета начального условия $u(x,t=0) = u(x.0)$ необходимо его явно внести в уравнение и исходить из уравнения следующего вида:

$$\frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial t^\alpha} - \frac{u(x,0)}{\Gamma(1-\alpha)t^\alpha} - D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^\alpha} = 0$$