

Учреждение образования
«Белорусский государственный
технологический университет»

ТРУДЫ БГТУ

Научный журнал

*Издается с июля 1993 года
Выходит один раз в месяц*

№ 6 (170) 2014 год

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

Минск 2014

Учредитель – учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет»

Главный редактор журнала – Жарский Иван Михайлович, ректор, профессор, кандидат химических наук

Редакционная коллегия номера:

В. М. Марченко, профессор кафедры высшей математики БГТУ, доктор физико-математических наук, профессор (главный редактор номера);

И. И. Наркевич, профессор кафедры физики БГТУ, доктор физико-математических наук, профессор (заместитель главного редактора номера);

В. С. Вихренко, профессор кафедры теоретической механики БГТУ, доктор физико-математических наук, профессор;

П. П. Урбанович, заведующий кафедрой информационных систем и технологий БГТУ, доктор технических наук, профессор;

В. Л. Колесников, профессор кафедры информационных систем и технологий БГТУ, доктор технических наук, профессор;

М. А. Журавков, заведующий кафедрой теоретической механики и робототехники БГУ, доктор физико-математических наук, профессор;

А. И. Калинин, заведующий кафедрой методов оптимального управления ФПМИ БГУ, доктор физико-математических наук, профессор;

Н. Т. Квасов, заведующий кафедрой физики БГУИР, доктор физико-математических наук, профессор;

В. И. Кувшинов, генеральный директор Объединенного института энергетических и ядерных исследований НАН Беларуси, доктор физико-математических наук, профессор;

Л. И. Минченко, заведующий кафедрой информатики БГУИР, доктор физико-математических наук, профессор;

Я. В. Радыно, заведующий кафедрой функционального анализа БГУ, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент НАН Беларуси;

И. Ф. Соловьева, доцент кафедры высшей математики, кандидат физико-математических наук (секретарь).

Адрес редакции: ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.

Телефоны: главного редактора журнала – (+375 17) 226-14-32,
главного редактора номера – (+375 17) 327-10-20.

E-mail: inform@belstu.by, <http://www.trudy.belstu.by>

Свидетельство о государственной регистрации средств массовой информации

№ 1329 от 23.04.2010, выданное Министерством информации Республики Беларусь.

*Журнал включен в «Перечень научных изданий Республики Беларусь
для опубликования результатов диссертационных исследований»*

Редактор Т. Е. Самсанович

Компьютерная верстка: О. Ю. Шантарович, Е. В. Ильченко, С. С. Белявская

Корректор Т. Е. Самсанович

Подписано в печать 29.09.2014. Формат 60×84¹/₈.

Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 19,7. Уч.-изд. л. 21,1.

Тираж 110 экз. Заказ 406.

Издатель и полиграфическое исполнение: УО «Белорусский государственный технологический университет».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя, распространителя печатных изданий № 1/227 от 20.03.2014. ЛП № 02330/12 от 30.12.2013.

Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.

© УО «Белорусский государственный
технологический университет», 2014

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

МАТЕМАТИКА

УДК 517.935.2+519.71

В. М. Марченко, доктор физико-математических наук, профессор (БГТУ);

И. М. Борковская, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);

О. Н. Пыжкова, кандидат физико-математических наук, доцент, заведующая кафедрой (БГТУ)

МЕТОД ПРОСТРАНСТВА СОСТОЯНИЙ В ДИСКРЕТНО-НЕПРЕРЫВНЫХ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-РАЗНОСТНЫХ СИСТЕМАХ¹

Приводится пример инвестиций, математическая модель которых представляет гибридную дискретно-непрерывную систему, сводящаяся, в свою очередь, к гибридной дифференциально-разностной системе. Для таких систем обсуждается подход к исследованию качественной теории управления на основе метода пространства состояний. Формулируются игровые задачи управляемости.

In this paper, we present an example of an economics model of a hybrid discrete-continuous system that can be reduced to a hybrid differential-difference one. We discuss approaches to study qualitative control theory problems for such a system based on the analysis of its states space. Several game problems of controllability are formulated.

Введение. Рассмотрим задачу описания инвестиций капитала, когда доступны два способа его инвестирования, при первом из которых прирост инвестируемого капитала пропорционален его величине и времени инвестирования, а во втором инвестирование происходит в форме депозита из расчета p процентов годовых с месячной капитализацией полученного дохода.

Построим математическую модель задачи. Пусть $x_1(t)$, $x_2[k]$ – величины капиталов, инвестируемых t по первому способу инвестирования и в начале k -го месяца по второму способу инвестирования. Тогда по условию задачи: $x_1(t + \Delta t) - x_1(t) = a_{11} \Delta t x_1(t)$, где a_{11} – коэффициент пропорциональности; аналогично $x_2[k + 1] = \left(1 + \frac{p}{1200}\right) x_2[k]$, откуда, переходя к пределу при $\Delta t \rightarrow 0$, получаем $\dot{x}_1(t) = a_{11} x_1(t)$.

Допуская, что в начале месяца после получения дохода возможно перераспределение вкладываемых капиталов между способами инвестирования с весовыми коэффициентами a_{12} , a_{21} ,

приходим к математической модели рассматриваемых инвестиций в виде следующей гибридной дискретно-непрерывной (ГДН) системы:

$$\dot{x}_1(t) = a_{11} x_1(t) + a_{12} x_2[k], t \in [k, k + 1);$$

$$x_2[k + 1] = a_{21} x_1(k) + a_{22} x_2[k], k = 0, 1, 2, \dots,$$

где $a_{22} = 1 + \frac{p}{1200}$, запись $x_2[k]$ означает функцию x_2 целочисленной переменной k .

В результате приходим к математической модели в виде динамической ГДН-системы:

$$\dot{x}_1(t) = A_{11} x_1(t) + A_{12} x_2(kh) + B_1 u(t); \quad (1)$$

$$x_2(kh + h) = A_{21} x_1(kh) + A_{22} x_2(kh) + B_2 u(kh), \quad (2)$$

$t \in [kh, kh + h)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, с непрерывными и дискретными переменными и начальными условиями

$$x_1(0) = x_{10}, x_2[0] = x_{20}. \quad (3)$$

Здесь $x_1(t) \in \mathbb{R}^n$, $x_2(kh) \in \mathbb{R}^n$, $u(t) \in \mathbb{R}^r$; A_{11} , A_{12} , A_{21} , A_{22} , B – постоянные матрицы соот-

¹ Работа выполнена в рамках сотрудничества с Белостокским техническим университетом (S/WI/2/2011).

ветствующих размеров; $0 < h$ – шаг квантования; $u = u(\cdot)$ – внешние (обычно кусочно-непрерывные) воздействия,

$$t \in [kh, kh + h), k = 0, 1, 2, \dots$$

При изучении реальных физических процессов зачастую наряду с динамическими встречаются также и алгебраические зависимости. Такие процессы описываются дифференциально-алгебраическими системами [1–3] (одни уравнения которых являются дифференциальными, другие – алгебраическими):

$$\dot{x}_1(t) = A_{11}x_1(t) + A_{12}x_2(t) + B_1u(t); \quad (4)$$

$$x_2(t+h) = A_{21}x_1(t) + A_{22}x_2(t) + B_2u(t); \quad (5)$$

$$t \in [kh, kh + h), k = 0, 1, 2, \dots$$

Их также относят к классу гибридных систем – гибридных дифференциально-разностных (ГДР) систем [4–6]. Следует, однако, признать, что термин «гибридные системы» перегружен. В настоящее время, особенно в англоязычной литературе, термин «гибридные» используется в основном в связи с дискретно-непрерывными системами или системами, содержащими логические переменные [7].

Гибридность, с нашей точки зрения, означает, вообще говоря, неоднородность в природе рассматриваемого процесса или метода его изучения. Термин «гибридные системы» относят к системам, описывающим процессы или объекты с существенно различающимися характеристиками, например, содержащие в основной динамике непрерывные и дискретные переменные (сигналы), детерминированные и случайные величины или воздействия и т. д., что, в конечном счете, и определяет характер (природу) гибридных систем.

Дальнейшая информация относительно гибридных систем может быть найдена в работах [1–12].

Начальные условия для системы (4), (5) зададим в виде

$$x_1(0) = x_1(+0) = x_{10}; \quad x_2(\tau) = \varphi(\tau), \quad \tau \in [0, h). \quad (6)$$

Важнейшим понятием в общей теории систем [13, 14] является понятие состояния системы, и метод пространства состояний относится к основным методам исследования качественных характеристик изучаемых систем.

В данной работе метод пространства состояний рассматривается для линейных стационарных ГДН- и ГДР-систем.

1. Гибридные дискретно-непрерывные системы. Рассмотрим объект управления, описываемый ГДН-системой (1), (2), где внешнее воздействие обычно имеет смысл управления (разрешается выбирать).

Очевидно, в качестве начального состояния этого объекта (система (1), (2)) можно взять пару

$$(x_{10}, x_{20}) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2}. \quad (7)$$

Понятие состояния в теории систем детально изучалось Р. Калманом, причем в одних работах он требует минимальности информации, необходимой для однозначного вычисления движения объекта в будущем, в других работах о минимальности информации не говорится, однако содержательные результаты получены для минимальных состояний.

Нетрудно видеть, что состояние (7) не является минимальным для ГДН-системы (1), (2). Минимальным начальным состоянием для этой системы будет, например, пара

$$\left(x_{10}, \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \end{bmatrix} x_{20} \right) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_1+n_2}. \quad (8)$$

Сложнее обстоит дело с понятием текущего состояния ГДН-системы в момент времени $t > 0$. Если $t = kh$, где $k = 1, 2, \dots$, то в качестве минимального состояния можно рассматривать

$$\text{пару } \left(x_1(t), \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \end{bmatrix} x_2(t) \right) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_1+n_2}, \text{ и тогда}$$

для таких моментов времени, учитывая, что на основании формулы Коши решение $x_1(kh + h)$, $k = 0, 1, \dots$ система (1), (2) представляется в виде

$$\begin{aligned} x_1(kh + h) &= e^{A_{11}(kh+h-kh)} x_1(kh) + \\ &+ \int_{kh}^{kh+h} e^{A_{11}(kh+h-\tau)} A_{12} x_2(kh) d\tau = \\ &= e^{A_{11}h} x_1(kh) + \int_0^h e^{A_{11}(h-\tau)} d\tau A_{12} x_2(kh), \end{aligned}$$

ГДН-система (1), (2) эквивалентна дискретной системе вида

$$z[k+1] = \sum_h z[k] + \begin{bmatrix} \int_{kh}^{kh+h} e^{A_{11}(kh+h-\tau)} B_1 u(\tau) d\tau \\ B_2 u(kh) \end{bmatrix}, \quad (9)$$

где

$$z(k) = \begin{bmatrix} x_1(kh) \\ x_2(kh) \end{bmatrix}, \quad \sum_h = \begin{bmatrix} e^{A_{11}h} & \int_0^h e^{A_{11}(h-\tau)} d\tau A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

$k = 0, 1, \dots$. Она превращается в чисто дискретную систему при дискретном управлении $u(t) = 0$, $t \neq kh$, $k = 0, 1, \dots$. Такие системы хорошо изучены.

В общем случае системы (1), (2) при $t \neq kh$, $k = 0, 1, \dots$ ее состояние не определено и, чтобы говорить о состояниях системы в такие

моменты времени, нужно доопределить в эти моменты времени дискретную составляющую $x_2(\cdot)$ решения системы (1), (2). Это можно сделать, например, сводя ГДН-систему (1), (2) к ГДР-системе (4), (5).

2. Сведение ГДН-системы к ГДР-системе в случае кусочно-постоянных управлений. Рассмотрим систему (1), (2) при воздействии широко используемых в приложениях управлений вида

$$u(t) = u(kh), t \in [kh, (k+1)h), k = 0, 1, \dots \quad (11)$$

Полагая, что

$$\tilde{x}(t) = \begin{bmatrix} x_1(kh) \\ x_2(kh) \end{bmatrix}, t \in [kh, (k+1)h), k = 0, 1, \dots, \quad (12)$$

систему (1), (2) запишем в виде

$$\dot{x}_1(t) = A_{11}x_1(t) + \tilde{A}_{12}\tilde{x}_2(t) + B_1u(t); \quad (13)$$

$$\tilde{x}_2(t+h) = \tilde{A}_{21}x_1(t) + \tilde{A}_{22}\tilde{x}_2(t) + \tilde{B}_2u(t), \quad (14)$$

$$t \in [kh, kh+h), k = 0, 1, 2, \dots$$

с начальными условиями

$$x_1(0) = x_{10}, \tilde{x}_2(\tau) = \tilde{\varphi}(\tau) = \begin{bmatrix} x_{10} \\ x_{20} \end{bmatrix}, \tau \in [0, h), \quad (15)$$

где $\tilde{A}_{12} = [0 \ A_{12}]$, $\tilde{A}_{21} = 0$, $\tilde{A}_{22} = \sum_h$ (матрица \sum_h определена в (10)). Система (13), (14) является частным случаем ГДР-системы (4), (5).

Отметим, что начальные условия в (15) в отличие от (3) определяются заданием не только начальных точек $x_1(0)$, $x_2(0)$, но и начальной вектор-функции $\tilde{\varphi}(\cdot)$.

3. Гибридные дифференциально-разностные системы. Рассмотрим систему (4), (5) с начальными условиями (6).

В качестве начального состояния ГДР-системы (4), (5) можно рассматривать пару

$$(x_{10}, \varphi(\cdot)) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \hat{C}([0, h], \mathbb{R}^{n_2}), \quad (16)$$

состоящую из точки x_{10} в \mathbb{R}^{n_1} и функции $\varphi(\cdot)$ из множества $\hat{C}([0, h], \mathbb{R}^{n_2})$ кусочно-непрерывных на промежутке $[0, h]$ вектор-функций со значениями в \mathbb{R}^{n_2} . Аналогично под состоянием системы в текущий момент t можно понимать пару $(x_1(t), x_{2t})$, где x_{2t} – вектор-функция на промежутке $[0, h]$ со значениями $x_{2t}(\tau) = x_2(t+\tau)$, $\tau \in [0, h]$ (здесь $x_1(t)$, $x_2(t)$, $t \geq 0$ – решение системы (4), (5) с начальными условиями (6). Рассматривая теперь множество $\mathbb{R}^{n_1} \times \hat{C}([0, h], \mathbb{R}^{n_2})$ как множество состояний ГДР-системы (4), (5)

и связывая с самой системой сильно непрерывную полугруппу линейных преобразований, определенную на $\mathbb{R}^{n_1} \times \hat{C}([0, h], \mathbb{R}^{n_2})$, можно распространить на ГДР-системы известный подход Красовского – Хейла – Шиманова к исследованию систем с последействием как специальных бесконечномерных систем [15].

Однако, как и в случае ГДН-систем, введенное состояние не является минимальным, и в качестве минимального состояния можно рассмотреть пару $(x_1(t), x_{2t}^m) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \hat{C}([0, h], \mathbb{R}^{n_2})$, где $x_{2t}^m(\tau) = A_{12}x_2(t+\tau)$, $\tau \in [0, h]$.

Используя понятия минимального состояния, основные вопросы качественной теории управления и наблюдения для ГДР-систем можно исследовать по аналогии с общей теорией систем Калмана, в частности рассматривать вопросы управляемости и наблюдаемости таких систем, управляемости и наблюдаемости их минимальных состояний, что приводит к игровым задачам управляемости как задачам программного преследования однотипных объектов и двойственным задачам наблюдаемости. Некоторые такие задачи рассмотрены в [16, 17], где получены параметрические критерии их разрешимости.

4. Игровые задачи управляемости для ГДР-систем. Пусть символы $x_i(t) = x_i(t, t_0, \varphi_0, \varphi(\cdot), u)$, $i = 1, 2$, $t \geq 0$, означают решение системы (4), (5), соответствующее начальному состоянию $(\varphi_0, \varphi(\cdot))$ в начальный момент времени t_0 и управлению $u = u(\cdot)$. Введем обозначение:

$$x(t, t_0, \varphi_0, \varphi(\cdot), u) = \begin{bmatrix} x_1(t, t_0, \varphi_0, \varphi(\cdot), u) \\ x_2(t, t_0, \varphi_0, \varphi(\cdot), u) \end{bmatrix}, t \geq 0.$$

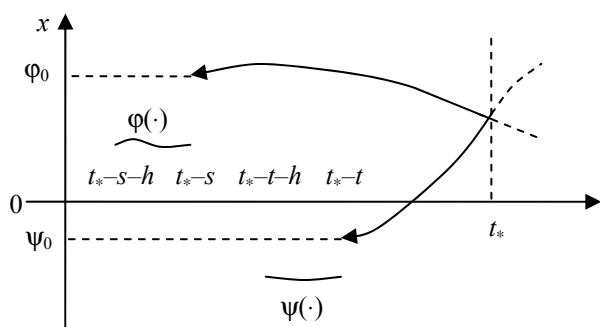
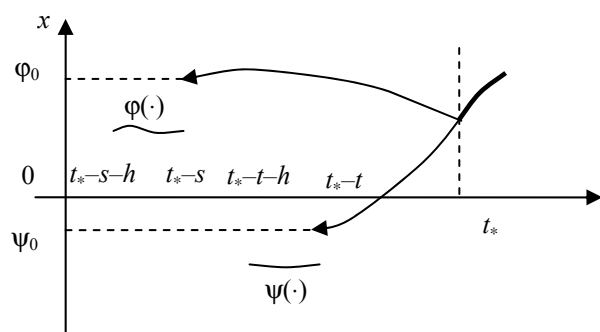
Определение. При заданном моменте времени t_* и $s \geq 0$, $t \geq 0$, система (4), (5) называется t_* -относительно (s, t) -управляемой, если для любых начальных состояний $(\varphi_0, \varphi(\cdot))$, $(\psi_0, \psi(\cdot))$ и любого допустимого (кусочно-непрерывного) управления $v = v(\cdot)$ найдется допустимое управление $u = u(\cdot)$, такое, что соответствующее решение системы обладает свойством (см. рис. 1)

$$x(t_*, t_* - s, \varphi_0, \varphi(\cdot), u) = x(t_*, t_* - t, \psi_0, \psi(\cdot), v). \quad (17)$$

Аналогично формулируется задача t_* -полной (s, t) -управляемости, когда в (17) требуется совпадение траекторий не только в момент t_* (как в (17)), но и во все последующие моменты времени, т. е.

$$\begin{aligned} &x(t_* + \tau, t_* - s, \varphi_0, \varphi(\cdot), u) = \\ &= x(t_* + \tau, t_* - t, \psi_0, \psi(\cdot), v), \end{aligned}$$

$\tau \geq 0$, при совпадающих управлениях $u(t_* + \tau) = v(t_* + \tau)$, $\tau \geq 0$ (см. рис. 2).

Рис. 1. t_* -относительная (s, t) -управляемостьРис. 2. t_* -полная (s, t) -управляемость

Момент t_* в определении опускается, если его разрешается выбирать (управляемость за нефиксированное время).

Заключение. В работе рассмотрен метод пространства состояний для линейных стационарных ГДН-систем путем их сведения к ГДР-системам, что позволяет ввести понятия состояния для произвольного текущего момента времени. Следует, однако, отметить, что при этом пространство состояний становится бесконечномерным и, таким образом, теряется конечномерная специфика ГДН-систем. Поэтому представляет интерес разработка метода пространства состояний для ГДН-систем с учетом их конечномерной природы.

Литература

1. Dai L. Singular control systems // Lecture notes in control and information sciences: 118. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1989. 319 p.
2. Kunkel P., Mehrmann W. L. Differential-algebraic equations: analysis and numerical solutions. Zürich, Switzerland: European Mathematical Society. 2006. 377 p.
3. März R. Solvability of linear differential algebraic equations with properly stated leading terms // Results in Mathematics. 2004. № 45. P. 88–95.

4. Кириллова Ф. М., Стрельцов С. В. Необходимые условия оптимальности управлений в гибридных системах // Управляемые системы: сб. трудов. – Новосибирск: Изд-во Ин-та математики СО АН СССР, 1975. Вып. 14. С. 24–33.

5. Ахундов А. А. Управляемость линейных гибридных систем // Управляемые системы: сб. ст. – Новосибирск: Изд-во Ин-та математики СО АН СССР, 1975. Вып. 14. С. 4–10.

6. De la Sen M. A note about total stability of a class of hybrid systems // Informatica. 2006. Vol. 17, No. 4. P. 565–576.

7. Van der Schaft A., Schumacher H. An introduction to hybrid dynamical systems. Berlin: Springer, 2000. 324 p.

8. Куржанский А. Б. Отчет о 16-м международном конгрессе ИФАК (IFAC) – международной федерации по автоматическому управлению // Автоматика и телемеханика. 2006. № 1. С. 183–189.

9. Hybrid Systems / J. J. Gertler [et al.] // Prepr. 13th World Congr. IFAC, 1996. Vol. I. P. 275–311, 473–476.

10. Baker C. T. H., Paul C. A., Tian H. Differential-algebraic equations with after-effect // J. Comput. and Appl. Math. 2002. Vol. 140. P. 63–80.

11. Марченко В. М., Поддубная О. Н. Представление решений и относительная управляемость линейных дифференциально-алгебраических систем со многими запаздываниями // Доклады РАН, 2005. Т. 404, № 4. С. 465–469.

12. Марченко В. М., Луазо Ж.-Ж. Об устойчивости гибридных дифференциально-разностных систем // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45, № 5. С. 728–740.

13. Калман Р., Фалб П., Арбиб М. Очерки по математической теории систем. М.: Мир, 1971.

14. Месарович М., Такахара Я. Общая теория систем: математические основы. М.: Мир, 1978.

15. Хейл Дж. Теория функционально-дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1984. 426 с.

16. Марченко В. М., Борковская И. М. Устойчивость и стабилизация линейных гибридных дискретно-непрерывных стационарных систем // Труды БГТУ. 2012. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 7–10.

17. Марченко В. М., Пыжкова О. Н. Относительная достижимость линейных стационарных систем, управляемых дискретным регулятором // Труды БГТУ. 2012. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 11–13.

Поступила 15.03.2014

УДК 532.517

А. М. Волк, кандидат технических наук, доцент (БГТУ)

ГИДРОДИНАМИКА ЖИДКОЙ ПЛЕНКИ НА ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Выполнен анализ исследований гидродинамики пленочных движений в сепарационных, фильтровальных, тепло- и массообменных, газожидкостных аппаратах и реакторах. Проведено теоретическое исследование пленочного движения жидкой фазы на внутренней и внешней поверхностях цилиндра под воздействием массовых сил поля тяжести и закрученного газового потока. Впервые получены дифференциальные уравнения движения, а также точные решения для составляющих скорости при условии прилипания пленки на поверхности проницаемого цилиндра и равенстве касательных напряжений на границе раздела фаз, определена толщина пленки. Найдены гидродинамические характеристики пленочного течения и аналитические условия для возможных режимов движения.

The studies of the hydrodynamics of film movements in the separation, filtration, heat and mass transfer, gas-liquid reactors and apparatuses are analyzed. The theoretical study of film movement in the liquid phase on the inner and outer surfaces of the cylinder under the influence of the gravitational field of mass forces and swirling gas flow is hold. For the first time, the differential equations of motion is obtained, the exact solutions for the velocity components subject to adherence of the film on the surface of a permeable cylinder and equality of shear stresses at the interface are found, the film thickness is determined. There are found hydrodynamic characteristics of film flow and analytical conditions for the possible modes of motion.

Введение. Исследование свободного пленочного течения, а также движения под воздействием газового потока по плоской поверхности, наружной и внутренней стенкам цилиндра имеет большое техническое значение и выполнено в работах [1, 2]. Режим течения определяется числом Рейнольдса для пленки

$$\text{Re}_\delta = \frac{4\bar{U}\delta\rho}{\mu} = \frac{4q}{\nu}. \quad (1)$$

Воздействия газового потока на пленку жидкости передаются посредством сил трения, возникающих на границе взаимодействия фаз.

При наличии пленочного течения на внутренней поверхности трубы волновая поверхность рассматривается как нерегулярная шероховатость стенок канала. Обобщением экспериментальных данных в этом случае для касательных напряжений сил трения на границе раздела фаз получено соотношение [2–4]

$$\tau_z = \frac{0,0791}{\text{Re}^{0,25}} \rho_f \bar{W}_z^2 \left(1 + \frac{300\delta}{D} \right). \quad (2)$$

Установившееся пленочное течение характеризуется равновесием сил тяжести и возникающих сил трения.

Анализ способов взаимодействия газожидкостных потоков в процессах разделения фаз показывает, что перспективным является способ с использованием закрученных потоков, который позволяет значительно повысить эффективность при разделении фаз в теплообменных процессах.

Математическое моделирование исследуемых процессов позволяет определить оптимальные режимы, соотношение между геометрическими параметрами цилиндрических элементов конструкции и нагрузками по фазам.

Основная часть. Рассмотрим стационарное осесимметрично ламинарное движение пленки вязкой жидкости по внутренней стенке вертикального цилиндра под воздействием закрученного потока газа (рисунок). Ось z цилиндрической системы координат направим вниз по оси цилиндра.

Запишем уравнение неразрывности [5, 6]

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rU_r) + \frac{\partial U_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial U_\phi}{\partial \phi} = 0. \quad (3)$$

В силу осесимметричности $\frac{\partial U_\phi}{\partial \phi} = 0$. При-

нимая $U_r = 0$, из уравнения (3) получим

$\frac{\partial U_z}{\partial z} = 0$. При этих условиях решение уравне-

ний Навье – Стокса будет автомодельным, т. е. скорость пленки будет только функцией радиуса $U = U(r)$. Уравнение Навье – Стокса для осевой составляющей скорости принимает вид

$$\mu \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dU_z}{dr} \right) \right) + \rho g - \frac{\partial P}{\partial z} = 0. \quad (4)$$

Считаем, что выполняется условие прилипания на стенке цилиндра и заданы касательные напряжения на границе раздела фаз газ – жидкость. Тогда граничными условиями будут

$$U_z|_{r=R} = 0, \quad \mu \frac{dU_z}{dr} \Big|_{r=R-\delta} = -\tau_z. \quad (5)$$

Перепад давления по длине элемента считаем постоянным. Принимаем $\psi = \frac{\partial P}{\partial z} = \text{const}$, интегрируем уравнение (4) и находим

$$U_z = c_1 \ln r - \frac{\rho g - \psi}{4\mu} r^2 + c_2.$$

Из условия прилипания (5) находим c_2 и, выполнив переход к безразмерным переменным $\tilde{r} = r/R$, $\tilde{\delta} = \delta/R$, получаем

$$U_z = c_1 \ln \tilde{r} + \frac{\rho g - \psi}{4\mu} R^2 (1 - \tilde{r}^2).$$

Из граничного условия (5)

$$c_1 = \frac{\tau_z R (1 - \tilde{\delta})}{\mu} + \frac{\rho g - \psi}{2\mu} R^2 (1 - \tilde{\delta}).$$

Условия равновесия сил $\pi(R-\delta)^2 \Delta P = 2\pi(R-\delta)l\tau_z$, действующих на газовый поток [2], дают возможность заменить перепад давления касательными напряжениями сил трения на границе раздела фаз:

$$\frac{\Delta P}{l} = \psi = -\frac{2\tau_z}{R(1-\tilde{\delta})}; \quad c_1 = \frac{\rho g R^2}{2\mu} (1 - \tilde{\delta})^2.$$

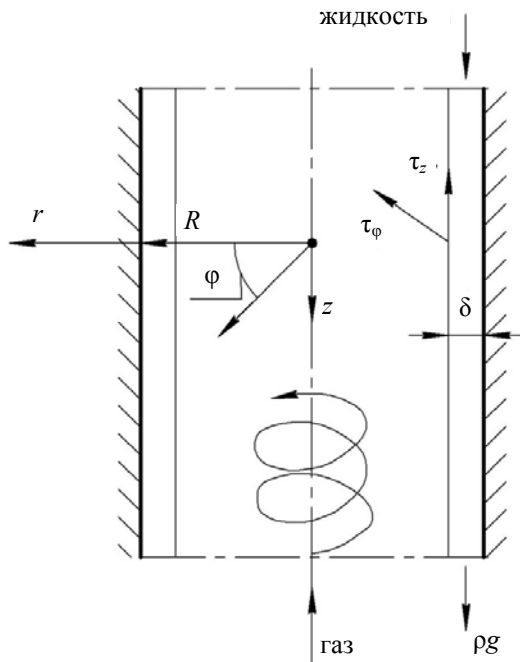


Схема пленочного течения на цилиндрической поверхности

При этом осевая скорость в пленке жидкости будет

$$U_z = \frac{\tau_z R}{2\mu(1-\tilde{\delta})} (1 - \tilde{r}^2) + \frac{\rho g R^2}{4\mu} \left[2(1-\tilde{\delta})^2 \ln \tilde{r} + 1 - \tilde{r}^2 \right].$$

Найдем объемный расход жидкой фазы по площади поперечного сечения пленки, отнесенный к единице периметра цилиндра:

$$q = \frac{\iint U_z r dr d\phi}{2\pi R} = \frac{1}{R} \int_{R-\delta}^R U_z r dr = R \int_{1-\tilde{\delta}}^1 U_z \tilde{r} d\tilde{r}.$$

Выполнив интегрирование, получим

$$q = \frac{\tau_z R^2}{8\mu} \left[\frac{1}{1-\tilde{\delta}} + (1-\tilde{\delta})^3 + 2(1-\tilde{\delta}) \right] + \frac{\rho g R^3}{4\mu} \left[\frac{1}{4} + \frac{3}{4}(1-\tilde{\delta})^4 - (1-\tilde{\delta})^2 - (1-\tilde{\delta})^4 \ln(1-\tilde{\delta}) \right].$$

Данное уравнение однозначно определяет среднюю толщину пленки δ при заданном расходе жидкой фазы и известных касательных напряжениях на границе раздела фаз. Гравитационное течение имеет место при $\tau_z = 0$.

Разложив функции в степенной ряд, найдем

$$q = \frac{\tau_z \delta^2 (1 - \tilde{\delta} + \tilde{\delta}/4)}{2\mu(1-\tilde{\delta})} + \frac{\rho g \delta^3}{3\mu} \left[1 - \tilde{\delta} + \frac{3}{20} \tilde{\delta}^2 + \frac{\tilde{\delta}^3}{5} + \sum_{k=4}^{\infty} \frac{24(k-2)!}{(k+2)!} \tilde{\delta}^k \right].$$

Для анализа пленочного течения найдем скорость пленки на границе раздела фаз и градиент скорости:

$$U_z|_{\tilde{r}=1-\tilde{\delta}} = \frac{\tau_z \delta}{\mu} \frac{1 - \delta^2/2}{1 - \tilde{\delta}} + \frac{\rho g \delta^2}{\mu} \left[\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\delta}}{3!} - \frac{\tilde{\delta}^2}{4!} - \sum_{k=3}^{+\infty} \frac{(k-1)!}{(k+2)!} \tilde{\delta}^k \right];$$

$$\frac{dU_z}{dr} = \frac{dU_z}{R d\tilde{r}} = -\frac{\tau_z \tilde{r}}{\mu(1-\tilde{\delta})} + \frac{\rho g R}{2\mu} \left[\frac{(1-\tilde{\delta})^2}{\tilde{r}} - \tilde{r} \right].$$

Осевая составляющая тензора касательных напряжений на стенке

$$\tau|_{r=R} = \mu \frac{dU_z}{R d\tilde{r}} \Big|_{\tilde{r}=1} = -\frac{\tau_z}{(1-\tilde{\delta})} - \rho g \delta \left(1 - \frac{\tilde{\delta}^2}{2} \right).$$

Аналогично получается автомодельное решение для закрученного пленочного течения. Считаем, что касательная составляющая ско-

рости зависит лишь от радиуса $U_\varphi = U_\varphi(r)$. В этом случае имеем уравнение

$$\mu \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r U_\varphi) \right) = 0 \quad (6)$$

и получаем решение

$$U_\varphi = c_3 \tilde{r} + \frac{c_4}{\tilde{r}}. \quad (7)$$

Используем граничные условия

$$U_\varphi|_{\tilde{r}=1} = 0, \quad \tilde{r} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\frac{U_\varphi}{\tilde{r}} \right) \Big|_{\tilde{r}=1-\tilde{\delta}} = -\frac{R \tau_\varphi}{\mu};$$

находим произвольные постоянные и получаем касательную составляющую скорости

$$U_\varphi = \frac{R \tau_\varphi (1-\tilde{\delta})}{2\mu} \left(\frac{1}{\tilde{r}} - \tilde{r} \right). \quad (8)$$

Определяем среднее значение касательной составляющей скорости

$$\begin{aligned} \bar{U}_\varphi &= \frac{1}{\tilde{\delta}} \int_{1-\tilde{\delta}}^1 U_\varphi d\tilde{r} = \\ &= \frac{1}{\tilde{\delta}} \frac{R \tau_\varphi}{2\mu} \left[\frac{(1-\tilde{\delta})^4}{2} - \frac{(1-\tilde{\delta})^2}{2} - (1-\tilde{\delta}) \ln(1-\tilde{\delta}) \right] = \\ &= \frac{\tau_\varphi \tilde{\delta}}{2\mu} \left[1 - \frac{10}{3!} \tilde{\delta} + \frac{14}{4!} \tilde{\delta}^2 + \sum_{k=3}^{\infty} \frac{2(k-1)!}{(k+2)!} \tilde{\delta}^k \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

Касательная составляющая при этом будет

$$\tau_\varphi = \tau_z \operatorname{tg}(k\beta). \quad (10)$$

Полученные зависимости позволяют получить расчетные режимы течения пленки, которые зависят от величины и направления составляющей τ_z тензора касательных напряжений сил трения на границе раздела фаз, удельного расхода q жидкой фазы, радиуса цилиндра R .

Заключение. Впервые разработана математическая модель для определения гидродинамических характеристик пленочного течения на цилиндрической поверхности под воздействием закрученного газового потока жидкой фазы. Данная модель позволяет учитывать гидродинамику пленки при исследовании процессов сепарации и тепломассобмена.

Обозначения. c_1, c_2, c_3, c_4 – постоянные коэффициенты; g – ускорение свободного падения, м/с²; l – длина цилиндрического элемента, м; P – давление, Па; ΔP – перепад давления, Па/м; q – удельный объемный расход жидкой фазы, м³/(м·с); r – расстояние в радиальном направлении в цилиндрической системе координат, м; R – радиус цилиндрического элемента, м; $\tilde{r} = r/R$ – безразмерная радиальная координата; Re – число Рейнольдса; U_z, U_φ, U_r – осевая, тангенциальная и радиальная составляющие скорости жидкости соответственно, м/с; β – угол, град; z – осевая координата цилиндрической системы координат, м; δ – толщина пленки жидкости, м; $\tilde{\delta} = \delta/R$ – безразмерная толщина пленки жидкости; $\pi = 3,14159\dots$; ψ – перепад давления, Па/м; ν – коэффициент кинематической вязкости, м²/с; ρ – плотность жидкости, кг/м³; τ – касательные напряжения, Н/м²; φ – угол в цилиндрической системе координат.

Литература

1. Гельперин Н. И. Основные процессы и аппараты химической технологии: в 2 кн. М.: Химия, 1981. 812 с. 2 кн.
2. Соколов В. И. Газожидкостные реакторы. Л.: Машиностроение, 1976. 216 с.
3. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1969. 742 с.
4. Уоллис Г. Б. Одномерные двухфазные течения. М.: Мир, 1972. 440 с.
5. Слезкин Н. А. Динамика вязкой несжимаемой жидкости. М.: Гостехиздат, 1955. 516 с.
6. Лойтянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1987. 840 с.

Поступила 14.03.2014

УДК 519.624

И. Ф. Соловьева, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)

**ВЛИЯНИЕ ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ НА РЕШЕНИЕ
НЕЛИНЕЙНЫХ ГРАНИЧНЫХ ЗАДАЧ С МАЛЫМ ПАРАМЕТРОМ
ПРИ СТАРШЕЙ ПРОИЗВОДНОЙ**

Работа посвящена изучению нелинейных граничных задач с малым параметром при старшей производной и возникающими при этом пограничными слоями. Для решения таких задач предлагаются модификации методов пристрелки. Если пограничный слой находится на левом конце заданного отрезка, то применяется метод обратной пристрелки, если на правом, то метод прямой множественной пристрелки. В случае когда пограничный слой имеет место на обоих концах отрезка, предлагается метод множественной двусторонней пристрелки. Выполнено сравнение этих методов и показано преимущество последнего из них для решения граничных задач с пограничным слоем. Приведен пример решения такой задачи с занесением результатов решения в таблицу основных значений.

Work is devoted to the study of nonlinear boundary value problems with a small parameter at the highest derivative and emerging with the boundary layers. For these tasks, the proposed modification methods adjustment. If the boundary layer is on the left end of the specified interval, the method of zeroing in reverse, if on the right, then based on direct multiple adjustment. In the case when the boundary layer occurs at both ends of the segment, we propose a method of multiple two-way adjustment. A comparison of these methods and show the advantage of the latter method for solving boundary value problems with a boundary layer. An example of solving the boundary value problem with the boundary layer, the results of which are given solutions in the form of a table of basic values.

Малый множитель при старшей производной породил большую теорию...

Математический фольклор

Введение. Большой раздел теории дифференциальных уравнений (д. у.) с малым множителем при старшей производной приобрел достаточно широкую популярность у теоретиков и, естественно, имеет огромное значение для прикладников. Одни ученые называют эти задачи уравнениями с малым параметром при старшей производной, другие используют термин «сингулярное возмущение». В прикладной математике и ее приложениях эти задачи фигурируют как задачи с пограничным слоем, с краевым эффектом и т. д.

Любая математическая модель, описывающая какой-нибудь реальный процесс в терминах д. у., обязательно включает в себя различные параметры. Как правило, значения этих параметров известны лишь приближенно, т.е. с какой-то точностью. Поэтому вопрос о характере поведения решений д. у. такого вида при малом изменении величины входящего в уравнение параметра представляет принципиальный интерес.

Математическая теория д. у. с малым параметром при старшей производной существует достаточно давно. Впервые на прикладную актуальность изучения сингулярно возмущенных задач обратил внимание Л. Прандтль в связи с развитой им в 1904 г. теорией пограничного слоя в гидродинамике. Сингулярно возмущенные задачи неоднократно возникали потом в механике, физике, технике и т. д.

В настоящее время малому множителю при старшей производной посвящено огромное количество работ наших и зарубежных авторов. В их поле зрения входит изучение начальных и граничных задач, свойств, поведений представлений и оценок различных типов решений, многообразных приложений, а также различных модификаций проблемы и ее обобщения.

Получение решения граничной задачи при наличии пограничного слоя осложняется и требует специальных методов.

В качестве таких методов предлагается рассматривать методы пристрелки.

Основная часть. Рассмотрим систему нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений (о. д. у.) первого порядка с малым параметром при старшей производной, приведенную к нормализованному виду:

$$y' = f(t, y, \varepsilon), \quad a \leq t \leq b, \quad \varepsilon > 0, \quad (1)$$

где $y: [a, b] \rightarrow R^n$, $f: [a, b] \times R^n \times R \rightarrow R^n$.

Предположим, что зависимость f от ε такая, что в соответствующих задачах возникают пограничные или внутренние переходные слои. Эта особая роль малого параметра ε обычным образом транслируется через решение граничной задачи.

Присоединим к уравнению вида (1) двухточечное граничное условие наиболее общего вида:

$$g(y(a), y(b)) = 0, \quad (2)$$

где $g: R^n \times R^n \rightarrow R$. В условие (2) может также входить параметр ε . Будем также предполагать, что отображения f, g и отрезок $[a, b]$ такие, что задачи (1), (2) имеют единственное решение и обладают необходимой гладкостью.

Рассмотрим модификации метода множественной двусторонней пристрелки, учитывающие влияние пограничного слоя [1].

1. Пусть пограничный слой находится на правом конце отрезка $[a, b]$. В этом случае организовываем пристрелку таким образом, чтобы влияние пограничного слоя наиболее существенно проявлялось на конечном этапе вычислений. Это осуществляется в виде прямой множественной пристрелки. Выберем точки пристрелки $a = t_0 < t_1 < \dots < t_n = b$ и рассмотрим пристрелочные задачи Коши:

$$\begin{cases} u' = f(t, u), & t \in J_j^{(+)} = \{t_j \leq t \leq t_{j+1}\}, \\ u(t, y_j) \Big|_{t=t_j} = y_j, & y_j \in R^n, j = \overline{0, n-1}, \end{cases} \quad (3)$$

где y_0, y_1, \dots, y_{n-1} – параметры пристрелки, определенные как решение замыкающей системы вида

$$\begin{cases} u(t_{j+1}, y_j) - y_{j+1} = 0, & j = \overline{1, n-1}, \\ g(y_0, y_n) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Конструктивная сторона замыкающей системы уравнений характеризуется матрицей Якоби:

$$\frac{\partial H(z)}{\partial z} = \begin{bmatrix} U_0^{(1)} & -I & 0 \dots & 0 \\ 0 & U_1^{(2)} & -I \dots & 0 \\ \dots & \dots & U_{n-1}^{(n)} & -I \\ G_0 & 0 & 0 & G_n \end{bmatrix},$$

где приняты следующие обозначения:

$$U_j^{(j+1)} = \frac{\partial u(t_{j+1}, y_j)}{\partial y_j}; \quad G_0 = \frac{\partial g(y_0, y_n)}{\partial y_0}; \quad G_n = \frac{\partial g(y_0, y_n)}{\partial y_n}.$$

2. Пусть пограничный слой находится на левом конце отрезка $[a, b]$. В этом случае пристрелку выгодно организовать в форме обратной множественной пристрелки:

$$\begin{cases} v' = f(t, v), & t \in J_j^{(-)} = \{t_j \geq t \geq t_{j-1}\}, \\ v(t, y_j) \Big|_{t=t_j} = y_j, & y_j \in R^n, j = g, g-1, \dots, 1, \end{cases} \quad (5)$$

причем $b = t^{(g)} > t^{(g-1)} > \dots > t^{(1)} > t^{(0)} = a$,

$$\begin{cases} v(t_{j-1}, y_j) - y_{j-1} = 0, & j = g, g-1, \dots, 1, \\ g(y_0, y_g) = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Замыкающая система в операторной форме примет вид

$$G(z) = 0,$$

где

$$G: R^{(s)} \rightarrow R^{(s)}, s = (g+1)n, z = (y_g^T, y_{g-1}^T, \dots, y_0^T)^T.$$

Матрица Якоби будет вычисляться аналогично:

$$\frac{\partial G(z)}{\partial z} = \begin{bmatrix} V_g^{(g-1)} & -I & 0 \dots & 0 \\ 0 & V_{g-1}^{(g-2)} & -I \dots & 0 \\ \dots & \dots & V_1^{(0)} & -I \\ G_0 & 0 & 0 & G_g \end{bmatrix},$$

где

$$V_j^{(j-1)} = \frac{\partial v(t_{j-1}, y_j)}{\partial y_j}; \quad G_0 = \frac{\partial g(y_0, y_g)}{\partial y_0}; \quad G_n = \frac{\partial g(y_0, y_g)}{\partial y_g}.$$

3. Пусть пограничный слой расположен на обоих концах отрезка. В этом случае удобно применять метод множественной двусторонней пристрелки, предусматривающий развитие вычислительного процесса в обоих направлениях.

Имеют место самые сложные случаи, когда решение характеризуется внутренними переходными слоями, осцилляциями, резкими перепадами, в частности наблюдаются и разрывы первого рода. В таких случаях нужно гибко использовать свойства решений, полученных в ходе экспериментов.

Практическая реализация метода множественной двусторонней пристрелки зависит от его возможностей на следующих основных этапах: выбор точек пристрелки и точек сшива решений; выбор параметров пристрелки и длин положительных и отрицательных подынтервалов; регулировка свойств замыкающей системы уравнений; организация итерационных процессов и сведение исходной граничной задачи к совокупности задач Коши [1].

Метод множественной двусторонней пристрелки состоит в следующем.

1. Выбираем точки пристрелки и организовываем вычислительный процесс таким образом, чтобы он развивался в прямом и обратном направлениях.

2. Составляем пристрелочные задачи Коши для прямого и обратного направления:

$$\begin{cases} u' = f(t, u), & t \in J_{2j-1}^{(+)} = \{t_{2j-1} \leq t \leq t_{2j}\}, \\ u(t, y_{2j-1})|_{t=t_{2j-1}} = y_{2j-1}, & y_{2j-1} \in R^n; \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} v' = f(t, v), & t \in J_{2j-1}^{(-)} = \{t_{2j-1} \geq t \geq t_{2j-2}\}, \\ v(t, y_{2j-1})|_{t=t_{2j-1}} = y_{2j-1}, & y_{2j-1} \in R^n, j = \overline{1, m}, \end{cases} \quad (8)$$

где t_{2j-1} – точки пристрелки; t_{2j} – точки сшива решений; y_{2j-1} – параметры пристрелки.

3. Для полученных пристрелочных задач Коши вида (7), (8) составляем замыкающую систему уравнений:

$$\begin{cases} u(t_{2j}, y_{2j-1}) - v(t_{2j}, y_{2j+1}) = 0, & j = \overline{1, m}, \\ g(v(t_0, y_1), u(t_{2m}, y_{2m-1})) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

4. В операторной форме замыкающая система (9) выглядит следующим образом:

$$H(z) = 0, \quad (10)$$

где $H: R^N \rightarrow R^N$, $N = m n$, $z = (y_1^T, y_2^T, \dots, y_{2m-1}^T)^T$.

Свойства замыкающих систем уравнений (9), (10) зависят от правой части f , исходного уравнения, формы граничных условий, области интегрирования $[a, b]$, точек $t \in [0, 1]$ и траекторий пристрелки $u(t, y_{2j-1})$, $v(t, y_{2j-1})$. Эти свойства наиболее полно характеризуются матрицами Якоби для соответствующих отображений H . z – искомое решение замыкающей системы уравнений (9).

5. Теперь искомое решение $y(t)$ исходной граничной задачи представляем формулой

$$y(t) = \begin{cases} v(t, y_{2j-1}^*), & t \in J_{2j-1}^{(-)}, \\ u(t, y_{2j-1}^*), & t \in J_{2j-1}^{(+)}, \quad j = \overline{1, m}. \end{cases} \quad (11)$$

Матрица Якоби в случае множественной двусторонней пристрелки будет иметь вид

$$\frac{\partial H(z)}{\partial z} = \begin{bmatrix} U_1^{(2)} & -V_3^{(2)} & 0 \dots & 0 \\ 0 & U_3^{(4)} & -V_5^{(4)} \dots & 0 \\ \dots & \dots & U_{2m-1}^{(2m-2)} & -V_{2m-1}^{(2m-2)} \\ G_1 & 0 & 0 & G_{2m-1} \end{bmatrix}$$

Блоки матрицы Якоби описываются достаточно полно:

$$\begin{cases} U'_{2j-1}(t) = \Phi_{2j-1}(u)U_{2j-1}(t), \\ U_{2j-1}(t_{2j-1}) = I, \quad t \in J_{2j-1}^{(+)}, \end{cases} \quad (12)$$

где

$$\Phi_{2j-1}(u) = \frac{\partial f(t, u(t, y_{2j-1}))}{\partial u}; \quad U_{2j-1}(t) = \frac{\partial u(t, y_{2j-1})}{\partial y_{2j-1}}.$$

Аналогичным образом получаем матрицы-блоки для пристрелочных задач Коши, решаемых в обратном направлении:

$$\begin{cases} V'_{2j-1}(t) = \Phi_{2j-1}(v)V_{2j-1}(t), \\ V_{2j-1}(t_{2j-1}) = I, \quad t \in J_{2j-1}^{(-)}. \end{cases}$$

Для решения замыкающей системы уравнений используется модифицированный метод Ньютона, основанный на аппроксимации матрицы Якоби.

В самых сложных случаях нужно гибко использовать свойства решений, полученных в ходе экспериментов [1].

В качестве примера рассмотрим известную задачу, лежащую в основе физической модели, описывающей процесс ограничения столба плазмы:

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = kshky_1, \quad 0 \leq t \leq 1 \end{cases}$$

с граничными условиями: $y_1(0) = 0$, $y_1(1) = 1$.

Задача была решена методом множественной двусторонней пристрелки с помощью системы Mathcad-14 [2] для $k=5$ и $k=6$. Были получены следующие результаты:

Точки пристрелки	$k=5$	$k=6$
$t=0$	$y_1 = 1,55E-08$	$y_1 = 1,55E-07$
$t=0,5$	$y_1 = 0,025438$	$y_1 = 0,029992$
$t=1$	$y_1 = 1,000000$	$y_1 = 1,000000$

Заключение. Предложенная методика позволяет решать широкие классы граничных задач с пограничным слоем.

Литература

1. Соловьева И. Ф. Об особенностях решения задачи Троеша // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. Вып. X. 2009. С. 312–314.
2. Шушкевич Г. Ч., Шушкевич С. В. Система Mathcad-14: в 2 ч. Минск: Изд-во Гревцова, 2010. Ч. 1. 287 с.

Поступила 15.03.2014

УДК 514.76

Н. П. Можей, кандидат физико-математических наук,
доцент, докторант (КГУ, Россия)

КОГОМОЛОГИИ ТРЕХМЕРНЫХ ОДНОРОДНЫХ ПРОСТРАНСТВ

Публикация посвящена изучению трехмерных однородных многообразий и описанию их когомологий. Локальная классификация однородных пространств эквивалентна описанию эффективных пар алгебр Ли. Приведены инвариантные невырожденные симметрические билинейные формы на таких однородных пространствах. Также изучена секционная кривизна римановых (псевдоримановых) трехмерных однородных пространств. Рассмотрен случай нетривиальной стационарной подгруппы, поскольку остальные однородные пространства в этой размерности – трехмерные группы Ли. В работе использован алгебраический подход для описания многообразий, методы теории групп и алгебр Ли, однородных пространств.

In this paper we study three-dimensional homogeneous manifolds. Also we describe cohomology this manifolds. The local classification of homogeneous spaces is equivalent to the description of effective pairs of Lie algebras. We described all invariant symmetric nondegenerate bilinear forms on those homogeneous spaces. Also we have found curvature Riemannian (pseudo-Riemannian) three-dimensional homogeneous spaces. We restricted ourselves to the case of a non-trivial stationary subgroup, all other homogeneous spaces in this dimension are three-dimensional Lie groups. We used the algebraic approach for description of manifolds, methods of the theory of Lie groups and Lie algebras and homogeneous spaces.

Введение. Теорема А. Картана сводит алгебру когомологий однородного пространства к алгебре когомологий алгебры Картана, конструируемой целиком в терминах алгебр Ли (соответствующих группам Ли, правда, эти группы предполагаются компактными). За определение алгебры когомологий многообразия принимается ее конструкция согласно теореме де Рама. Алгебра когомологий любого гладкого многообразия M совпадает с алгеброй когомологий внешних форм на M [1]. Однородные римановы пространства изучались с топологической точки зрения. В частности, ряд работ посвящен вычислению кольца когомологии этих пространств, основанном на применении теоремы Картана и спектральных последовательностях. Вычисления для неприводимых компактных симметрических пространств проведены еще Борелем в 50-х годах. Ряд утверждений теории Ходжа дает информацию о строении кольца когомологий риманова пространства, обладающего нетривиальными параллельными дифференциальными формами и, тем самым, имеющего нестандартную группу голономии. Примерами таких пространств являются кэлеровы многообразия и симметрические пространства. В работе [2] рассматриваются приложения аппарата когомологий алгебр Ли к изучению когомологии главных расслоений и однородных пространств. Для когомологии разрешимых алгебр Ли известны лишь немногие скольконбудь общие утверждения.

Основная часть. Пусть M – дифференцируемое многообразие, на котором транзитивно

действует группа $\bar{G}_x (M, \bar{G})$ – однородное пространство, $G = \bar{G}_x$ – стабилизатор произвольной точки $x \in M$. Проблема классификации однородных пространств (M, \bar{G}) равносильна классификации (с точностью до эквивалентности) пар групп Ли (\bar{G}, G) , где $G \subset \bar{G}$, так как многообразию M может быть отождествлено с многообразием левых смежных классов \bar{G}/G [3]. Изучая однородные пространства важно рассматривать не саму группу \bar{G} , а ее образ в $Diff(M)$, другими словами, достаточно рассматривать только эффективные действия группы \bar{G} на многообразии M . Положим $\bar{\mathfrak{g}}$ – алгебра Ли группы Ли \bar{G} , а \mathfrak{g} – подалгебра, соответствующая подгруппе G . Пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ алгебр Ли называется *эффективной*, если подалгебра \mathfrak{g} не содержит отличных от нуля идеалов $\bar{\mathfrak{g}}$. В дальнейшем будем предполагать, что G – связная подгруппа, что всегда можно сделать, ограничиваясь локальной точкой зрения. *Изотропное действие* группы G на $T_x M$ – это фактор-действие присоединенного действия G на $\bar{\mathfrak{g}}$: $s \cdot (x + \mathfrak{g}) = (Ad_s)(x) + \mathfrak{g}$, для всех $s \in G$, $x \in \bar{\mathfrak{g}}$. При этом алгебра Ли \mathfrak{g} действует на касательном пространстве $T_x M = \bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$: $x \cdot (y + \mathfrak{g}) = [x, y] + \mathfrak{g}$ для всех $x \in \mathfrak{g}$, $y \in \bar{\mathfrak{g}}$. Пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ называется *изотропно-точной*, если точно изотропное представление подалгебры \mathfrak{g} . С геометрической точки зрения это означает, что естественное действие стабилизатора \bar{G}_x произвольной точки $x \in M$ на $T_x M$ имеет нулевое ядро. *Псевдориманово однородное пространство* задается тройкой $(\bar{G}, M, \mathfrak{g})$, где \bar{G} – связная группа Ли, M – связное гладкое многообразие с транзитивным действием \bar{G} , а \mathfrak{g} – ин-

вариантная псевдориманова метрика на M . Инвариантные псевдоримановы метрики \mathfrak{g} на M находятся во взаимно-однозначном соответствии с инвариантными симметрическими невырожденными билинейными формами B на \mathfrak{g} -модуле $\bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$ [4]. Билинейная форма B также является инвариантной билинейной формой на \mathfrak{g} -модуле $\bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$:

$$B(x.v_1, v_2) + B(v_1, x.v_2) = 0 \quad (1)$$

для всех $x \in \mathfrak{g}, v_1, v_2 \in \bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$. Каждое псевдориманово однородное пространство (G, M, \mathfrak{g}) , $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} \leq 4$ описывается тройкой $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, B)$, где $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ – эффективная пара алгебр Ли, а B – инвариантная симметричная невырожденная билинейная форма на \mathfrak{g} -модуле $\bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$. Действительно, из [5] следует, что существует единственное (с точностью до эквивалентности) эффективное однородное пространство (G, M) , такое, что M односвязно и стационарная подгруппа G связна. Это однородное пространство допускает единственную инвариантную псевдориманову метрику \mathfrak{g} , соответствующую билинейной форме B , т. е. существует единственное (с точностью до эквивалентности) псевдориманово однородное пространство (G, M, \mathfrak{g}) , соответствующее $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, B)$, такое, что M односвязно и G связна. Будем называть тройку $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, B)$ локально псевдоримановым однородным пространством. Поскольку каждая инвариантная псевдориманова метрика определяет инвариантную аффинную связность, \mathfrak{g} -модуль $\bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$ точен. Обозначим $\mathfrak{m} = \bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$. Для нахождения всех изотропно-точных пар нужно классифицировать (с точностью до изоморфизма) все точные трехмерные \mathfrak{g} -модули U (это эквивалентно классификации всех подалгебр в $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$ с точностью до сопряженности), а далее классифицировать (с точностью до эквивалентности) такие пары $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$, где \mathfrak{g} -модули $\bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$ и U эквивалентны. Все такие пары $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} = 3$ найдены в [6], дальнейшая нумерация пар соответствует приведенной там. Ограничимся случаем с ненулевым стабилизатором, так как все остальные псевдоримановы однородные пространства – только трехмерные группы Ли с инвариантной метрикой. Билинейная форма B является инвариантной билинейной формой на \mathfrak{g} -модуле $\bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$. Проверим выполнение условия (1) для всех пар $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} = 3$ и выберем из них допускающие риманову метрику. Далее опишем все такие формы с точностью до индуцированного действия $\text{Aut}(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$. Получим следующий результат:

Теорема 1. Пусть $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, B)$ – локально однородное пространство, допускающее римано-

ву метрику, такое, что $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} = 3$ и $\mathfrak{g} \neq \{0\}$. Оно эквивалентно одной и только одной из следующих троек:

	Таблица умножения				B		
1.3.1	e_1	u_1	u_2	u_3	ε_1	0	0
	e_1	0	$-u_2$	u_1	0	ε_1	0
	u_1	u_2	0	0	0	0	ε_2
	u_2	$-u_1$	0	0			
	u_3	0	0	0			
1.3.2	e_1	u_1	u_2	u_3	ε	0	0
	e_1	0	$-u_2$	u_1	0	ε	0
	u_1	u_2	0	0	0	0	a
	u_2	$-u_1$	0	0			
	u_3	0	$-u_1$	$-u_2$			
1.3.5	e_1	u_1	u_2	u_3	a	0	0
	e_1	0	$-u_2$	u_1	0	a	0
	u_1	u_2	0	e_1	0	0	± 1
	u_2	$-u_1$	$-e_1$	0			
	u_3	0	0	0			
1.3.6	e_1	u_1	u_2	u_3	a	0	0
	e_1	0	$-u_2$	u_1	0	a	0
	u_1	u_2	0	$-e_1$	0	0	± 1
	u_2	$-u_1$	e_1	0			
	u_3	0	0	0			
1.3.7	e_1	u_1	u_2	u_3	ε	0	0
	e_1	0	$-u_2$	u_1	0	ε	0
	u_1	u_2	0	u_3	0	0	a
	u_2	$-u_1$	$-u_3$	0			
	u_3	0	0	0			
1.3.3	e_1	u_1	u_2	u_3			
	e_1	0	$-u_2$	u_1			
	u_1	u_2	0	$e_1 + u_3$			
	u_2	$-u_1$	$-e_1 - u_3$	0			
	u_3	0	0	0			
1.3.4	e_1	u_1	u_2	u_3			
	e_1	0	$-u_2$	u_1			
	u_1	u_2	0	$-e_1 + u_3$			
	u_2	$-u_1$	$e_1 - u_3$	0			
	u_3	0	0	0			
	$B =$	a	0	0			
		0	a	0			
		0	0	b			
3.5.1	e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3	
	e_1	0	e_3	$-e_2$	$-u_3$	0	u_1
	e_2	$-e_3$	0	e_1	$-u_2$	u_1	0
	e_3	e_2	$-e_1$	0	0	$-u_3$	u_2
	u_1	u_3	u_2	0	0	0	0
	u_2	0	$-u_1$	u_3	0	0	0
	u_3	$-u_1$	0	$-u_2$	0	0	0
	$B =$	± 1	0	0			
		0	± 1	0			
		0	0	± 1			

3.5.2		e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3
	e_1	0	e_3	$-e_2$	$-u_3$	0	u_1
	e_2	$-e_3$	0	e_1	$-u_2$	u_1	0
	e_3	e_2	$-e_1$	0	0	$-u_3$	u_2
	u_1	u_3	u_2	0	0	e_2	e_1
	u_2	0	$-u_1$	u_3	$-e_2$	0	e_3
	u_3	$-u_1$	0	$-u_2$	$-e_1$	$-e_3$	0
3.5.3		e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3
	e_1	0	e_3	$-e_2$	$-u_3$	0	u_1
	e_2	$-e_3$	0	e_1	$-u_2$	u_1	0
	e_3	e_2	$-e_1$	0	0	$-u_3$	u_2
	u_1	u_3	u_2	0	0	$-e_2$	$-e_1$
	u_2	0	$-u_1$	u_3	e_2	0	$-e_3$
	u_3	$-u_1$	0	$-u_2$	e_1	e_3	0
	$B =$	a	0	0			
		0	a	0			
		0	0	a			

Здесь e_1, e_2, e_3 – базис \mathfrak{g} , u_1, u_2, u_3 – базис, дополнительный к \mathfrak{g} в $\bar{\mathfrak{g}}$, $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon = \pm 1, ab \neq 0$.

Замечание. Кроме римановой метрики псевдориманову метрику сигнатуры (2, 1) допускают следующие однородные пространства из приведенных в теореме 2: 1.3.1 при $\varepsilon_1\varepsilon_2 < 0$, 1.3.2, 1.3.5, 1.3.6, 1.3.7 при $\varepsilon a < 0$, 1.3.3, 1.3.4 при $ab < 0$.

Из пар, приведенных в теореме 1, симметрическое однородное пространство задают 1.3.1, 1.3.5, 1.3.6, 3.5.1–3.5.3.

Из трехмерных римановых однородных пространств следующие 7 соответствуют классификации Терстона:

– если стабилизаторы точек пространства трехмерны ($\mathfrak{g} = \mathfrak{so}(3)$), то тройка 3.5.1 задает евклидово пространство E^3 , 3.5.2 – сферу S^3 , а 3.5.3 – гиперболическое пространство H^3 ;

– если стабилизаторы одномерны ($\mathfrak{g} = \mathfrak{so}(2)$), то M – \bar{G} -инвариантное расслоение над одной из двумерных геометрий. На M есть \bar{G} -инвариантная метрика, определяющая связность. При нулевой кривизне связности тройка 1.3.5 задает $S^2 \times E^1$, 1.3.6 – $H^2 \times E^1$, а при ненулевой кривизне тройка 1.3.3 задает $SL(2, R)$, 1.3.7 – нильгеометрию.

– 1.3.1 является подалгеброй в 3.5.1 в базисе (e_2, u_1, u_2, u_3) , 1.3.2 – подалгеброй в 3.5.2 в базисе $(-e_1, e_2 + u_1, e_3 - u_3, u_2)$, а 1.3.4 – подалгеброй в

$$3.5.3 \text{ в базисе } \left(-e_1, \frac{e_2 - u_3}{2}, \frac{e_3 - u_1}{2}, \frac{-e_1 + u_2}{2} \right).$$

Проверим выполнение условия (1) для всех пар $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} = 3$ и выберем из них допускающие псевдориманову метрику. Далее опишем все такие формы с точностью до индуцированного действия $\text{Aut}(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$. Получим следующий результат:

Теорема 2. Пусть $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, B)$ – локально однородное пространство, допускающее только псевдориманову метрику, такое, что $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} = 3$ и $\mathfrak{g} \neq \{0\}$, e_1, e_2, e_3 – базис \mathfrak{g} , u_1, u_2, u_3 – базис, дополнительный к \mathfrak{g} в $\bar{\mathfrak{g}}$. Данное пространство эквивалентно одной и только одной из следующих троек:

3.4.1		e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3
	e_1	0	e_2	$-e_3$	u_1	0	$-u_3$
	e_2	$-e_2$	0	e_1	0	u_1	u_2
	e_3	e_3	$-e_1$	0	u_2	u_3	0
	u_1	$-u_1$	0	$-u_2$	0	0	0
	u_2	0	$-u_1$	$-u_3$	0	0	0
	u_3	u_3	$-u_2$	0	0	0	0
2.21.1		e_1	e_2	u_1	u_2	u_3	
	e_1	0	e_2	u_1	0	$-u_3$	
	e_2	$-e_2$	0	0	u_1	u_2	
	u_1	$-u_1$	0	0	0	0	
	u_2	0	$-u_1$	0	0	0	
	u_3	u_3	$-u_2$	0	0	0	
1.8.1		e_1	u_1	u_2	u_3		
	e_1	0	0	u_1	u_2		
	u_1	0	0	0	0		
	u_2	$-u_1$	0	0	0		
	u_3	$-u_2$	0	0	0		
1.8.3		e_1	u_1	u_2	u_3		
	e_1	0	0	u_1	u_2		
	u_1	0	0	0	u_1		
	u_2	$-u_1$	0	0	$u_2 + \lambda e_1$		
	u_3	$-u_2$	$-u_1$	$-u_2 - \lambda e_1$	0		
1.8.4,		e_1	u_1	u_2	u_3		
1.8.5		e_1	0	0	u_1	u_2	
	u_1	0	0	0	0		
	u_2	$-u_1$	0	0	$\pm e_1$		
	u_3	$-u_2$	0	$\mp e_1$	0		
	$B =$	0	0	1			
		0	-1	0			
		1	0	0			
3.4.2		e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3
	e_1	0	e_2	$-e_3$	u_1	0	$-u_3$
	e_2	$-e_2$	0	e_1	0	u_1	u_2
	e_3	e_3	$-e_1$	0	u_2	u_3	0
	u_1	$-u_1$	0	$-u_2$	0	e_2	$-e_1$
	u_2	0	$-u_1$	$-u_3$	$-e_2$	0	$-e_3$
	u_3	u_3	$-u_2$	0	e_1	e_3	0
3.4.3		e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3
	e_1	0	e_2	$-e_3$	u_1	0	$-u_3$
	e_2	$-e_2$	0	e_1	0	u_1	u_2
	e_3	e_3	$-e_1$	0	u_2	u_3	0
	u_1	$-u_1$	0	$-u_2$	0	$-e_2$	e_1
	u_2	0	$-u_1$	$-u_3$	e_2	0	e_3
	u_3	u_3	$-u_2$	0	$-e_1$	$-e_3$	0

$$2.21.4 \quad \begin{array}{c|cccc} & e_1 & e_2 & u_1 & u_2 & u_3 \\ \hline e_1 & 0 & e_2 & u_1 & 0 & -u_3 \\ e_2 & -e_2 & 0 & 0 & u_1 & u_2 \\ u_1 & -u_1 & 0 & 0 & u_1 & u_2 \\ u_2 & 0 & -u_1 & -u_1 & 0 & u_3 \\ u_3 & u_3 & -u_2 & -u_2 & -u_3 & 0 \\ \hline B = & 0 & 0 & a \\ & 0 & -a & 0 \\ & a & 0 & 0 \end{array}$$

$$1.8.2 \quad \begin{array}{c|cccc} & e_1 & u_1 & u_2 & u_3 \\ \hline e_1 & 0 & 0 & u_1 & u_2 \\ u_1 & 0 & 0 & u_1 & u_2 \\ u_2 & -u_1 & -u_1 & 0 & u_3 \\ u_3 & -u_2 & -u_2 & -u_3 & 0 \\ \hline B = & 0 & 0 & a \\ & 0 & -a & 0 \\ & a & 0 & \varepsilon \end{array}$$

$$1.1.1 \quad \begin{array}{c|cccc} & e_1 & u_1 & u_2 & u_3 \\ \hline e_1 & 0 & u_1 & -u_2 & 0 \\ u_1 & -u_1 & 0 & 0 & 0 \\ u_2 & u_2 & 0 & 0 & 0 \\ u_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline B = & 0 & 1 & 0 \\ & 1 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & \pm 1 \end{array}$$

$$1.1.2 \quad \begin{array}{c|cccc} & e_1 & u_1 & u_2 & u_3 \\ \hline e_1 & 0 & u_1 & -u_2 & 0 \\ u_1 & -u_1 & 0 & 0 & 0 \\ u_2 & u_2 & 0 & 0 & u_2 \\ u_3 & 0 & 0 & -u_2 & 0 \end{array}$$

$$1.1.6 \quad \begin{array}{c|cccc} & e_1 & u_1 & u_2 & u_3 \\ \hline e_1 & 0 & u_1 & -u_2 & 0 \\ u_1 & -u_1 & 0 & u_3 & 0 \\ u_2 & u_2 & -u_3 & 0 & 0 \\ u_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline B = & 0 & 1 & 0 \\ & 1 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & a \end{array}$$

$$1.1.5 \quad \begin{array}{c|cccc} & e_1 & u_1 & u_2 & u_3 \\ \hline e_1 & 0 & u_1 & -u_2 & 0 \\ u_1 & -u_1 & 0 & e_1 & 0 \\ u_2 & u_2 & -e_1 & 0 & 0 \\ u_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline B = & 0 & a & 0 \\ & a & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & \pm 1 \end{array}$$

$$1.1.7 \quad \begin{array}{c|cccc} & e_1 & u_1 & u_2 & u_3 \\ \hline e_1 & 0 & u_1 & -u_2 & 0 \\ u_1 & -u_1 & 0 & e_1 + u_3 & 0 \\ u_2 & u_2 & -e_1 - u_3 & 0 & 0 \\ u_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline B = & 0 & a & 0 \\ & a & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & b \end{array}$$

Здесь $ab \neq 0$, $\varepsilon = \pm 1, 0$. Из пар, приведенных в теореме 3, симметрическое пространство задают 1.1.1, 1.1.5, 1.8.1, 1.8.4, 1.8.5, 2.21.1, 3.4.1–3.4.3.

Обозначим через $d(\alpha)$ внешнюю производную дифференциальной формы α , через C_1 – множество $(p-1)$ -форм на $\bar{\mathfrak{g}}$, C_2 – множество p -форм, C_3 – множество $(p+1)$ -форм и т. д., пусть C – множество $\{C_1, C_2, C_3, \dots\}$, пустое множество будем записывать $\{\}$. Пусть $A^p(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ – пространство внешних p -форм, p -форма α из $A^p(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ замкнутая, если $d(\alpha) = 0$, и точная, если $\alpha = d(\beta)$ для некоторой $(p-1)$ -формы β из $A^{(p-1)}(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$. Алгебра Ли когомологий $H^p(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ степени p – векторное пространство замкнутых p -форм из $A^p(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ по модулю точных p -форм из $A^p(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$. Обозначим через H_1 – множество p -форм на $\bar{\mathfrak{g}}$, образующих базис когомологий C_2 , H_2 – множество $(p+1)$ -форм на $\bar{\mathfrak{g}}$, образующих базис когомологий C_3 , и т. д., т. е. $H = \{H_1, H_2, H_3, \dots\}$ – множество всех замкнутых форм на $\bar{\mathfrak{g}}$, задающих базис когомологий на $\bar{\mathfrak{g}}$.

Теорема 3. Когомологии трехмерных однородных римановых (псевдоримановых) многообразий имеют следующий вид:

римановы:

3.5.1, 3.5.2, 3.5.3:

$$C = \{\{\}, \{\}, \{\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\}, \{\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}\};$$

1.3.1, 1.3.5, 1.3.6:

$$C = \{\{\}, \{\theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}\};$$

1.3.2:

$$C = \{\{\}, \{\theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\theta_3\}, \{\}, \{\}\};$$

1.3.3, 1.3.4, 1.3.7:

$$C = \{\{\}, \{\theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\}, \{\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}\};$$

псевдоримановы:

3.4.1, 3.4.2, 3.4.3, 2.21.1, 2.21.4:

$$C = \{\{\}, \{\}, \{\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\}, \{\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}\};$$

1.1.1, 1.1.5:

$$C = \{\{\}, \{\theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}\};$$

1.1.2:

$$C = \{\{\}, \{\theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\theta_3\}, \{\}, \{\}\};$$

1.1.6, 1.1.7:

$$C = \{\{\}, \{\theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\}, \{\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}\};$$

1.8.1, 1.8.3, 1.8.4, 1.8.5:

$$C = \{\{\}, \{\theta_3\}, \{-\theta_2 \wedge \theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\theta_3\}, \{-\theta_2 \wedge \theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}\};$$

1.8.2:

$$C = \{\{\}, \{\theta_3\}, \{-\theta_2 \wedge \theta_3\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}, \{\}\};$$

$$H = \{\{\}, \{\}, \{-\theta_1 \wedge \theta_2 \wedge \theta_3\}\}.$$

Наиболее важной и интересной задачей римановой геометрии в целом является задача о нахождении связей между геометрическими и топологическими характеристиками римановых многообразий и их локальной характеристикой – кривизной. Секционная кривизна римановых однородных пространств вычисляется по формуле

$$K(x, E) = \frac{B(R(Y, Z)Y, Z)}{B(Y, Y)B(Z, Z) - B(Y, Z)^2},$$

где $x \in M$, E – невырожденное плоское сечение в M_x , $\{Y, Z\}$ – базис в E .

Для псевдоримановых однородных пространств понятие секционной кривизны может быть введено уже не для всех двумерных направлений, так как определитель Грама (стоящий в знаменателе определения секционной кривизны), обращается в нуль для изотропных двумерных направлений (т. е. таких, на которых индуцируется вырожденная метрика, если в этом случае обращается в нуль и числитель, то понятие секционной кривизны можно сохранить с помощью продолжения по непрерывности). Выпишем секционные кривизны римановых (псевдоримановых) однородных пространств.

Теорема 4. Секционные кривизны римановых однородных пространств:

Номер	I	II	III
3.5.1	0	0	0
3.5.2	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$
3.5.3	$-\frac{1}{a}$	$-\frac{1}{a}$	$-\frac{1}{a}$
1.3.1	0	0	0
1.3.2	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$
1.3.3	$\frac{3/4b+a}{a^2}$	$-\frac{b}{4a^2}$	$-\frac{b}{4a^2}$

1.3.4	$\frac{3/4b-a}{a^2}$	$-\frac{b}{4a^2}$	$-\frac{b}{4a^2}$
1.3.5	$\frac{1}{a}$	0	0
1.3.6	$-\frac{1}{a}$	0	0
1.3.7	$\frac{3}{4}a$	$-\frac{a}{4}$	$-\frac{a}{4}$

Здесь

$$I = \frac{B(R(u_1, u_2)u_1, u_2)}{B(u_1, u_1)B(u_2, u_2) - B(u_1, u_2)^2};$$

$$II = \frac{B(R(u_1, u_3)u_1, u_3)}{B(u_1, u_1)B(u_3, u_3) - B(u_1, u_3)^2};$$

$$III = \frac{B(R(u_2, u_3)u_2, u_3)}{B(u_2, u_2)B(u_3, u_3) - B(u_2, u_3)^2}.$$

Секционные кривизны псевдоримановых однородных пространств:

Номер	I	II	III
3.4.1	0	0	0
3.4.2	$-\frac{1}{a}$	$-\frac{1}{a}$	$-\frac{1}{a}$
3.4.3	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$
2.21.1	0	0	0
2.21.4	$-\frac{1}{4a}$	$-\frac{1}{4a}$	$-\frac{1}{4a}$
1.8.1	0	0	0
1.8.2	$-\frac{1}{4a}$	$-\frac{1}{4a}$	$-\frac{5}{4a}$
1.8.3	0	0	$a/0 = \infty$
1.8.4	0	0	$1/0 = \infty$
1.8.5	0	0	$-1/0 = \infty$
1.1.1	0	0	0
1.1.2	$\frac{1}{4a}$	$\frac{1}{4a}$	$\frac{1}{4a}$
1.1.5	$\frac{1}{a}$	0	0
1.1.6	$-\frac{3}{4}a$	$\frac{1}{4}a$	$\frac{1}{4}a$
1.1.7	$\frac{3/4b-a}{-a^2}$	$-\frac{b}{4a^2}$	$-\frac{b}{4a^2}$

Заключение. Описаны когомологии трехмерных однородных римановых (псевдоримановых) многообразий. Также найдена секционная кривизна римановых (псевдоримановых) однородных пространств. Полученные результаты могут быть использованы для решения различных геометрических задач, также открываются широкие возможности для приложения результатов исследования псевдоримановых многообразий в физике и механике. Предложенная методика может быть использована для других размерностей.

Литература

1. Рашевский П. К. О вещественных когомологиях однородных пространств // Успехи математических наук. 1969. Т. 24. Вып. 3 (147).

2. Greub W., Halperin S., Vanstone R. Connections, curvature and cohomology. N. Y.; L., 1975. Vol. 3: Cohomology of principal bundles and homogeneous spaces.

3. Онищик А. Л. Топология транзитивных групп Ли преобразований. М.: Физ.-мат. лит., 1995.

4. Kobayashi S., Nomizu K. Foundations of Differential Geometry. N. Y.; L. Vol. I, 1963. Vol. II, 1969.

5. Mostow G. D. The extensibility of local Lie groups of transformations and groups on surfaces // Ann. Math. 1950. Vol. 52, No. 3. P. 606–636.

6. Komrakov B., Tchourioumov A., Mozhey N. Three-dimensional isotropically-faithful homogeneous spaces. Oslo: Preprints Univ., 1993. Vol. 1–3, No. 35–37.

Поступила 27.02.2014

УДК 517.977

А. А. Якименко, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)

ПРЕДЕЛЬНОЕ ЗАПАЗДЫВАНИЕ В ОДНОМ УРАВНЕНИИ НЕЙТРАЛЬНОГО ТИПА

Рассматривается задача нахождения предельного запаздывания в одном скалярном уравнении нейтрального типа. Исследуется вопрос об устойчивости такого уравнения в зависимости от его параметров, в том числе и от запаздывания. Найдено предельное значение запаздывания, при котором теряется свойство устойчивости. Полученные результаты могут быть применены при исследовании устойчивости систем нейтрального типа.

The problem of finding the limiting delay in one scalar equation of neutral type is studying. Investigate the question of the stability of this equation depending on its parameters, including on the delay. Found limit delay for which is lost stability property. The results can be applied in the study of the stability of systems of neutral type.

Введение. Изучение вопросов устойчивости уравнений с запаздывающим аргументом нейтрального типа сопряжено со значительными сложностями, которые обусловлены тем, что пространство состояний таких систем, как правило, бесконечномерно. Кроме того, уравнение нейтрального типа может быть неустойчивым, даже когда действительные части всех корней характеристического уравнения отрицательны [1]. Проблема устойчивости уравнений с запаздывающим аргументом и нейтрального типа исследовалась многими авторами (см., например [1–11]). Однако на данный момент некоторые вопросы до сих пор остаются открытыми. В настоящей работе приведены условия устойчивости одного уравнения с запаздывающим аргументом нейтрального типа в зависимости от величины запаздывания.

Основная часть. Рассмотрим уравнение с запаздывающим аргументом нейтрального типа следующего вида:

$$\dot{x}(t) + a_1 x(t) + a_2 x(t-h) + a_3 \dot{x}(t-h) = 0, \quad (1)$$

где $h > 0$ – постоянное запаздывание.

В работе [11] с помощью метода D-разбиений [9] показано, что область устойчивости U_0 уравнения (1) в пространстве параметров (a_1, a_2, a_3, h) этого уравнения ограничена линиями

$$a_2 = -a_1; \quad |a_3| \leq 1; \\ L: \begin{cases} a_1 = -\frac{y}{\sin yh} (a_3 + \cos yh), \\ a_2 = \frac{y}{\sin yh} (1 + a_3 \cos yh), \end{cases} \quad y \in \left(0, \frac{\pi}{h}\right). \quad (2)$$

Разобьем область U_0 прямой $a_2 = a_1$ на две части U_0^1 и U_0^2 (область U_0^2 содержит луч $a_2 = 0, a_1 > 0$).

Соотношения (2) определяют некоторую непрерывную функцию $a_2 = a_2(a_1)$. В самом деле,

$$\frac{da_1}{dy} = \frac{yh - \sin yh \cos yh + a_3 (yh \cos yh - \sin yh)}{\sin^2 yh},$$

$$y \in \left(0, \frac{\pi}{h}\right).$$

Выражение в числителе линейно относительно a_3 . При $a_3 = -1$ имеем:

$$yh - \sin yh \cos yh - (yh \cos yh - \sin yh) = \\ = (yh + \sin yh)(1 - \cos yh) > 0, \quad y \in \left(0, \frac{\pi}{h}\right), \quad h > 0.$$

При $a_3 = 1$

$$yh - \sin yh \cos yh + (yh \cos yh - \sin yh) = \\ = (yh - \sin yh)(1 + \cos yh) > 0, \quad y \in \left(0, \frac{\pi}{h}\right), \quad h > 0.$$

Следовательно, при $|a_3| \leq 1$ $y \in \left(0, \frac{\pi}{h}\right)$,

$\frac{da_1}{dy} > 0$, что равносильно

$$yh - \sin yh \cos yh + a_3 \times \\ \times (yh \cos yh - \sin yh) > 0, \quad y \in \left(0, \frac{\pi}{h}\right), \quad |a_3| \leq 1, \quad (3)$$

т. е. a_1 есть возрастающая функция параметра y . Непрерывность будет следовать из непрерывности функций, входящих в (2).

При $y \rightarrow 0$ точка (a_1, a_2) линии L стремится к точке $\left(-\frac{1+a_3}{h}, \frac{1+a_3}{h}\right)$. Линия L имеет наклонную асимптоту $a_2 = a_1$. Угловым коэффициентом касательной в каждой точке линии по модулю меньше единицы. В самом деле, учитывая (3), имеем

$$\frac{da_2}{da_1} - 1 = \\ = \frac{\sin yh - yh \cos yh + a_3 (\sin yh \cos yh - yh)}{yh - \sin yh \cos yh + a_3 (yh \cos yh - \sin yh)} - 1 =$$

$$= -\frac{(1+a_3)(yh - \sin yh)(1 + \cos yh)}{yh - \sin yh \cos yh + a_3(yh \cos yh - \sin yh)} < 0;$$

$$1 + \frac{da_2}{da_1} =$$

$$= 1 + \frac{\sin yh - yh \cos yh + a_3(\sin yh \cos yh - yh)}{yh - \sin yh \cos yh + a_3(yh \cos yh - \sin yh)} =$$

$$= \frac{(a_3 - 1)(yh + \sin yh)(\cos yh - 1)}{yh - \sin yh \cos yh + a_3(yh \cos yh - \sin yh)} > 0,$$

отсюда

$$-1 < \frac{da_2}{da_1} < 1, \quad y \in \left(0, \frac{\pi}{h}\right), \quad h > 0, \quad |a_3| < 1.$$

Пусть теперь в пространстве параметров уравнения (1) имеется точка (a_1, a_2, a_3, h) , $|a_3| < 1, h > 0$. Определим, при каких условиях корни этого квазиполинома имеют отрицательные действительные части.

В области U_0^2 и на ее границе $a_2 = a_1, a_1 > 0$, корни имеют отрицательные действительные части для любых $h > 0, |a_3| < 1$. Рассмотрим область $\bar{U} = \{(a_1, a_2, a_3) | a_2 > |a_1|, |a_3| < 1\}$. Очевидно, $U_0^1 \subset \bar{U}$.

Лемма. Для любой точки $(a_1, a_2, a_3) \in \bar{U}$ найдется такое запаздывание $h^* > 0$, что точка $(a_1, a_2) \in L$ при данных a_3 и $h = h^*$.

Доказательство. Так как в области \bar{U} $a_2 > 0$, разделим первое равенство в (2) на второе. Получим:

$$\frac{a_1}{a_2} = -\frac{a_3 + \cos yh}{1 + a_3 \cos yh},$$

откуда

$$\cos yh = -\frac{a_1 + a_2 a_3}{a_2 + a_1 a_3}. \quad (4)$$

Покажем, что уравнение (4) разрешимо относительно yh . В самом деле, из соотношения $a_2 > |a_1|$ следует, что $a_2 + a_1 a_3 > 0$. Тогда

$$\left| \frac{a_1 + a_2 a_3}{a_2 + a_1 a_3} \right| = \frac{|a_1 + a_2 a_3|}{a_2 + a_1 a_3}.$$

Неравенство $\frac{|a_1 + a_2 a_3|}{a_2 + a_1 a_3} < 1$ эквивалентно системе неравенств

$$\begin{cases} a_1 + a_2 a_3 < a_2 + a_1 a_3, \\ a_1 + a_2 a_3 > -a_2 - a_1 a_3, \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} (a_1 - a_2)(1 - a_3) < 0, \\ (a_1 + a_2)(1 + a_3) > 0, \end{cases}$$

которая, очевидно, истинна во всей области \bar{U} .

Таким образом, уравнение (4) разрешимо и имеет корень

$$y^* h^* = \arccos \left(-\frac{a_1 + a_2 a_3}{a_2 + a_1 a_3} \right). \quad (5)$$

Подставим найденный корень во второе соотношение в (2):

$$a_2 = \frac{y^*}{\sin y^* h^*} (1 + a_3 \cos y^* h^*) \stackrel{(4)}{=} = \frac{y^*}{\sin y^* h^*} \left(1 - a_3 \frac{a_1 + a_2 a_3}{a_2 + a_1 a_3} \right) = \frac{y^*}{\sin y^* h^*} \frac{a_2 (1 - a_3^2)}{a_2 + a_1 a_3}.$$

Сократив на $a_2 > 0$, имеем

$$y^* = \sin y^* h^* \frac{a_2 + a_1 a_3}{1 - a_3^2}. \quad (6)$$

Найдем с учетом (4) $\sin y^* h^*$.

$$\sin y^* h^* = \sqrt{1 - \left(\frac{a_1 + a_2 a_3}{a_2 + a_1 a_3} \right)^2} = \frac{\sqrt{(a_2^2 - a_1^2)(1 - a_3^2)}}{a_2 + a_1 a_3}.$$

Принимая во внимание (5), получим

$$y^* = \sqrt{\frac{a_2^2 - a_1^2}{1 - a_3^2}}. \quad (7)$$

Из (5) с учетом (7) имеем

$$h^* = \sqrt{\frac{1 - a_3^2}{a_2^2 - a_1^2}} \arccos \left(-\frac{a_1 + a_2 a_3}{a_2 + a_1 a_3} \right). \quad (8)$$

Таким образом, мы показали, что точка (a_1, a_2, a_3, h^*) , $|a_3| < 1$ при h^* , вычисляемом по формуле (8), принадлежит линии L , что завершает доказательство леммы.

Если $|a_3| = 1$, то область устойчивости U_0^1 вырождается в область U_0^2 .

Теорема. Точка (a_1, a_2, a_3, h) , $|a_3| < 1, h > 0$, в пространстве коэффициентов квазиполинома (1) принадлежит области U_0 в том и только в том случае, когда выполнено одно из условий:

- i) $a_1 > |a_2|, |a_3| \leq 1$;
- ii) $a_2 > |a_1|, |a_3| < 1, h < h^*$,

где h^* вычислено по формуле (8).

Доказательство. При выполнении условия i) попадание в область U_0 следует из определения этой области.

Пусть $a_2 > |a_1|, |a_3| < 1$. Из леммы следует, что соответствующая точка (a_1, a_2) при $h = h^*$ принадлежит линии L . Соответствующее этой точке характеристическое уравнение имеет вид

$$\lambda + a_1 + a_2 e^{-\lambda h^*} + a_3 \lambda e^{-\lambda h^*} = 0. \quad (9)$$

Сделаем замену переменной $\lambda = \frac{h^*}{h} \bar{\lambda}$. Тогда уравнение (9) переписывается в виде

$$\frac{h^*}{h} \bar{\lambda} + a_1 + a_2 e^{-\bar{\lambda} h} + a_3 \frac{h^*}{h} \bar{\lambda} e^{-\bar{\lambda} h} = 0$$

или

$$\bar{\lambda} + \frac{h}{h^*} a_1 + \frac{h}{h^*} a_2 e^{-\bar{\lambda} h} + a_3 \bar{\lambda} e^{-\bar{\lambda} h} = 0. \quad (10)$$

Отсюда с учетом вида U_0^1 вытекает, что если уравнение асимптотически устойчиво при $h = h_1$, то оно остается асимптотически устойчивым и при $0 < h < h_1$. Тогда, сравнивая (9) и (10), убеждаемся, что точка $\left(\frac{h}{h^*} a_1, \frac{h}{h^*} a_2\right)$, оставаясь в области $U_0^1 (h^*, h > 0)$ и двигаясь вдоль прямых $a_2 = -a_1$, если $a_1 < 0$, $a_2 = a_1$, если $a_1 \geq 0$, будет ниже линии L в случае $h < h^*$ и выше линии L в случае $h > h^*$. Это вытекает из того, что как было показано выше, угловые коэффициенты касательных в каждой точке линии L по модулю меньше единицы. Таким образом, если $h < h^*$, точка (a_1, a_2, a_3, h) попадает в область U_0 , а если $h > h^*$, то нет. Теорема полностью доказана.

Литература

1. Громова П. С. О неустойчивости решений линейных дифференциально-разностных уравнений первого порядка // Труды сем. по теор. диф.

уравн. с откл. арг. / Ун-т дружбы народов. Москва, 1972. Т. VIII. С. 27–36.

2. Gu K., Kharitonov V., Chen J. Stability of Time-Delay Systems. Birkhauser, 2002. 353 p.

3. Задачи управления конечномерными системами / И. К. Асмыкович [и др.] // Автоматика и телемеханика. 1986. № 11. С. 5–29.

4. Niculescu S.-I. Further remarks on delay-dependent stability of linear neutral systems // Proc. of MTNS 2000. Perpignan, France. 2000.

5. Азбелев Н. В., Симонов П. М. Устойчивость решений с обыкновенными производными. Пермь, 2001. 348 с.

6. Теория уравнений нейтрального типа / Р. Р. Ахмеров [и др.] // Математический анализ. М.: ВИНТИ, 1982. Т. 19. С. 55–126.

7. Беллман Р., Кук К. Л. Дифференциально-разностные уравнения. М.: Мир, 1967. 548 с.

8. Колмановский В. Б. Устойчивость и периодические режимы регулируемых систем с последействием. М.: Наука, 1981. 488 с.

9. Неймарк Ю. И. D-разбиение пространства квазиполиномов (К устойчивости линеаризованных распределенных систем) // ПММ. 1949. Вып. 4. С. 349–380.

10. Хейл Дж. Теория функционально-дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1984. 421 с.

11. Марченко В. М., Якименко А. А. К вопросу о распределении корней квазиполиномов // Доклады Акад. наук Беларуси. 1996. Т. 40, № 3. С. 36–41.

Поступила 09.03.2014

МЕХАНИКА

УДК 531.19

Г. С. Бокун, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);
В. С. Вихренко, доктор физико-математических наук, профессор (БГТУ);
Т. Шалкус, доктор философии (Вильнюсский университет, Литва)

ОЦЕНКА ЧАСТОТНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ В МЕЖЗЕРЕННЫХ И ВНУТРИЗЕРЕННЫХ ОБЛАСТЯХ ТОКОПРОВОДЯЩЕЙ КЕРАМИКИ

Модель решеточного флюида используется для описания процессов переноса в керамических твердых телах, характеризующихся пространственной неоднородностью, обусловленной их зернистым строением. Получены соотношения, позволяющие изучать равновесное распределение концентрации частиц в области межзеренных границ. Сформулированы кинетические уравнения, описывающие диффузионные потоки при наличии неоднородности распределения концентрации. Используя преобразование Лапласа по времени, получена частотная зависимость электросопротивления в межзеренных и внутризеренных областях керамики.

The lattice fluid model is used to describe the transport processes in ceramic solids characterized by spatial heterogeneity caused by their granular structure. The relations that allow studying the equilibrium distribution of the particle concentration in the grain boundaries region are deduced. The kinetic equations describing the diffusion fluxes in the presence of an inhomogeneous distribution of the concentration are formulated. Using the Laplace transform in time, the frequency dependence of the electrical resistivity is obtained in inter- and intragranular areas of ceramics.

Введение. Изучению импедансных характеристик токопроводящих керамик уделяется пристальное внимание [1, 2], поскольку они позволяют исследовать динамические особенности неоднородных систем. Ниже на основании решеточной модели используем подход [3], позволяющий в аналитической форме найти частотную зависимость отклика системы на малое периодическое возмущение различной частоты. Для этого используем представления идеального раствора. Рассмотрим в приближении идеального раствора влияние межзеренной границы на электрохимические характеристики твердого электролита.

Расчет равновесного неоднородного распределения концентрации. Для моделирования объемных свойств запишем выражение для химического потенциала в объеме электролита в виде

$$\mu_B = RT \ln \frac{\rho_{1B}}{\rho_{0B}}, \quad (1)$$

где ρ_{1B} , ρ_{0B} – концентрация частиц и вакансий ($\rho_{0B} = 1 - \rho_{1B}$) в объеме зерна.

Соответственно химический потенциал для межзеренной области представим в форме

$$\mu_\sigma = kT \ln \frac{\rho_{1\sigma}}{\rho_{0\sigma}} + \varepsilon, \quad (2)$$

где σ в нижнем индексе приписывает соответствующую величину межзеренному слою; ε харак-

теризует изменение энергетического состояния узлов решетки в области межзеренной границы. Из условия равновесия $\mu_B = \mu_\sigma$ находим соотношение

$$\frac{\rho_{1\sigma}}{\rho_{0\sigma}} = \frac{\rho_{1B}}{\rho_{0B}} e^{-\beta\varepsilon}, \quad (3)$$

которое определяет разность концентраций в упомянутых фазах из-за различия их энергетических характеристик, передаваемых параметром ε .

Отметим, что соотношения (1), (2) записаны для невзаимодействующих частиц. Вследствие межчастичного взаимодействия, и в особенности электростатического, в межфазной области образуется переходный слой, с неизбежностью порождающий перераспределение заряда, приводящее к образованию двойного электрического слоя. При этом в приграничной области в выражениях (1) и (2) появятся соответствующие вклады, так что вместо (1) и (2) следует записать

$$\mu_{\rho_{Bs}} = kT \ln \frac{\rho_{1Bs}}{\rho_{0Bs}} + \alpha_1 (\rho_{1\sigma s} - \rho_{1\sigma}); \quad (4)$$

$$\mu_{\rho_{\sigma s}} = kT \ln \frac{\rho_{1\sigma s}}{\rho_{0\sigma s}} + \alpha_1 (\rho_{1Bs} - \rho_{1B}) + \varepsilon, \quad (5)$$

где символ s в нижних индексах означает, что соответствующая величина относится к переходной области между объемом зерна и межзеренной границей; α_1 – параметр, зависящий от

характеристик решетки. Например, для однородной пластины $\alpha_1 \Delta\rho = qEh$, $\Delta\rho = \rho_{1B_s} - \rho_{1B}$, где $E = \sigma / 2\epsilon\epsilon_0$ – напряженность поля; σ – поверхностная плотность заряда; ϵ , ϵ_0 – величины относительной и абсолютной электрических постоянных. Поэтому находим $\sigma = \Delta\rho q / h^2$ (h – параметр решетки, q – эффективный заряд). С учетом записанных соотношений получим

$$\alpha_1 \Delta\rho = \frac{\Delta\rho q^2}{2\epsilon h}, \quad (6)$$

откуда следует

$$\alpha_1 = \frac{q^2}{2\epsilon\epsilon_0 h}. \quad (7)$$

Приравнявая химические потенциалы (1) и (2), получим уравнения, позволяющие определить изменения плотности, обусловленные образованием конденсаторного слоя на межзеренной границе. Принимая, что переходный слой симметричен относительно поверхностей Гиббса, из условия электронейтральности устанавливаем

$$\rho_{1\sigma_s} - \rho_{1\sigma} = -(\rho_{1B_s} - \rho_{1B}) = \Delta\rho. \quad (8)$$

Вычислим изменение концентрации с учетом выражения (8). Из двух уравнений (1) и (2) будем рассматривать только одно, и используем его в условии термодинамического равновесия

$$\mu_B = \mu_{SB} = \mu_{S\sigma} = \mu_\sigma. \quad (9)$$

В рассматриваемом приближении (не учитывая зависимость химического потенциала от искривления профиля концентрации) $\Delta\rho$ находится только при учете нелинейных членов. В приближении же среднего поля μ содержит вторую разность, за счет которой и возникает переходный слой, и результат будет аналогичным.

Таким образом, для нахождения $\Delta\rho$, определяющего двойной электрический слой на границе, используем разложение

$$\ln \frac{\rho_{1B_s}}{\rho_{0B_s}} = \ln \left(\frac{\rho_{1B}}{\rho_{0B}} \frac{1 - \Delta x}{1 + \Delta x} \right); \quad (10)$$

$$\Delta x = \frac{\Delta\rho}{\rho_{1B}\rho_{0B}}.$$

Подставив (10) в (9), с учетом (4), (5) получим

$$kT(\Delta x - 2\Delta x^3) + \alpha_1 \Delta x = 0, \quad (11)$$

откуда

$$\Delta x = \sqrt{\frac{kT + \alpha_1}{2kT}}. \quad (12)$$

Из-за внесенных приближений $\Delta\rho$ оказался зависящим от характеристик одной фазы.

Тем не менее, полученный результат показывает, что на границе фаз порождается двойной электрический слой, приводящий к скачку плотности $\Delta\rho_1 = \rho_{1\sigma} - \rho_{1B}$ и порождающий соответствующую равновесную разность потенциалов, выражаемую соотношением

$$\Delta u_{B\sigma} = q^{-1} \alpha_1 \rho_{1B} \rho_{0B} \sqrt{\frac{1 + \beta \alpha_1}{2}}, \quad (13)$$

где $\beta = 1/kT$ – обратная температура.

Отметим, что внешний потенциал, противоположный по знаку (13), будет нейтрализовать двойной электрический слой и, в известном смысле, совпадать с потенциалом нулевого заряда теории Фрумкина. И наоборот, под действием внешнего потенциала создается неоднородность распределения плотности в равновесном состоянии.

Соответственно при неравновесных условиях в рамках данной модели выражение для неравновесных потоков числа частиц из объемной фазы в межзеренную пропорциональны вариациям химического потенциала, и с учетом уравнений (4) и (5) могут быть представлены формулами

$$I_{B\sigma} = D_{B\sigma} (\delta\rho_B - \delta\rho_0) + \alpha (\delta\rho_B - \delta\rho_\sigma) + \chi \delta\phi_{B\sigma}; \quad (14)$$

$$I_{\sigma B} = D_{B\sigma} (\delta\rho_\sigma - \delta\rho_B) - \alpha (\delta\rho_\sigma - \delta\rho_B) + \chi \delta\phi_{B\sigma}. \quad (15)$$

$$D_{b\sigma} = \beta w_0 F_{00} \exp(\beta \mu_{eq}) \frac{\partial \delta \mu_{eq}}{\partial \rho}; \quad (16)$$

$$\alpha = \beta w_0 F_{00} \exp(\beta \mu_{eq}) \alpha_1,$$

где χ и $\delta\phi$ – коэффициент электропроводности и внешняя разность потенциалов на соответствующем участке.

Уравнения (14)–(16) записаны при условии, что имеет место сокращение равновесных слагаемых при учете линейных вкладов. Но уравнение для $\Delta\rho$ имеет вид (12), т. е. содержит нелинейные вклады. При названном обстоятельстве в соотношениях (14) и (15) возникнут несбалансированные слагаемые $A(\delta\rho_B - \delta\rho_\sigma)$ и $B\delta\phi_{B\sigma}$, где коэффициенты A и B будут содержать равновесные электрические поля.

Очевидно, что теория электрохимического импеданса тесно связана с теорией переходного слоя. В силу соотношения (12) реальные экспериментальные зависимости ввиду коэффициентов A и B будут зависеть от внешней разности потенциалов и величины электрического тока. Это позволит получать более полную информацию об электрохимических характеристиках веществ.

Уравнения переноса. Рассмотрим упрощенную схему расчетов, приняв, что при неравновесных процессах имеет место сохранение заряда в окрестности границы раздела зерна и межзеренной прослойки, т. е. $\delta\rho_{B_s} = -\delta\rho_{gs}$. Кроме того, естественно считать, что вариации

плотности $\delta\rho_B$ и $\delta\rho_\sigma$ в объеме не приводят к появлению существенного взаимодействия. Поэтому здесь учтем только существенную часть внутреннего электрического поля, возникающего между плоскостями двойного слоя.

Запишем выражение для вариации потока из объемной фазы в приграничную:

$$\delta I_{BBs} = D(\delta\rho_B - \delta\rho_{Bs}) + \chi\delta\varphi_{Bs}, \quad (17)$$

где D – коэффициент диффузии; χ – коэффициент электропроводности. Величиной этого потока обусловлено изменение концентрации $\delta\rho_B$, а именно

$$\frac{d\delta\rho_B}{dt} = -\delta I_{BBs}. \quad (18)$$

Соответственно ток, протекающий из области с концентрацией ρ_{Bs} в приграничную область с концентрацией $\rho_{\sigma s}$, определится формулой

$$\delta I_{Bs\sigma s} = D(\delta\rho_{Bs} - \delta\rho_{\sigma s}) + \alpha(\delta\rho_{Bs} - \delta\rho_{\sigma s}) + \chi\delta\varphi_{ss}. \quad (19)$$

С учетом электронейтральности

$$\delta I_{Bs\sigma s} = 2(D\delta\rho_{\sigma s} + \alpha\delta\rho_{\sigma s} + \chi\delta\varphi_{ss}). \quad (20)$$

Соответственно

$$\frac{d\delta\rho_{Bs}}{dt} = \delta I_{BBs} - \delta I_{Bs\sigma s}. \quad (21)$$

Запишем уравнение для тока из области с концентрацией $\rho_{\sigma s}$ в область с концентрацией ρ_σ :

$$\delta I_{\sigma s\sigma} = D(\delta\rho_{\sigma s\sigma} - \delta\rho_\sigma) + \chi\delta\varphi_{s\sigma}. \quad (22)$$

Тогда

$$\frac{d}{dt}\delta\rho_{\sigma s\sigma} = \delta I_{\sigma s\sigma}. \quad (23)$$

Для сокращения обозначений примем $\delta\rho_B = \delta\rho_1$, $\delta\rho_{Bs} = \delta\rho_2$, $\delta\rho_{\sigma s} = \delta\rho_3$, $\delta\rho_\sigma = \delta\rho_4$. Выделяя соответственно в среде четыре характерные области, запишем условия баланса:

$$\frac{d\delta\rho_1}{dt} = -\delta I_1; \quad (24)$$

$$\frac{d\delta\rho_2}{dt} = -\delta I_1 - \delta I_2; \quad (25)$$

$$\frac{d\delta\rho_3}{dt} = \delta I_2 - \delta I_3; \quad (26)$$

$$\frac{d}{dt}\delta\rho_4 = \delta I_3 \quad (27)$$

при условии сохранения общего числа частиц

$$\frac{d}{dt}(\delta\rho_1 + \delta\rho_2 + \delta\rho_3 + \delta\rho_4) = 0. \quad (28)$$

Входящие в (17)–(23) вариации токов представим через вариации концентраций и перепа-

дов напряжений, учитывая, что падение напряжения на каждом участке пропорционально падению внешнего напряжения с коэффициентом пропорциональности k_j ($j=1, 2, 3$), зависящим от равновесных характеристик выбранной области. С учетом отмеченного запишем

$$\delta I_1 = D(\delta\rho_1 - \delta\rho_2) + \chi k_1 \delta\varphi + \alpha\chi(\delta\rho_2 + \delta\rho_3); \quad (29)$$

$$\delta I_2 = D(\delta\rho_2 - \delta\rho_3) + \chi k_2 \delta\varphi + \alpha\chi(\delta\rho_2 - \delta\rho_3); \quad (30)$$

$$\delta I_3 = D(\delta\rho_3 - \delta\rho_4) + \chi k_3 \delta\varphi + \alpha\chi(\delta\rho_2 + \delta\rho_3). \quad (31)$$

Уравнения (29)–(31) записаны с учетом несбалансированности зарядов на пластинах двойного слоя. Тогда вне конденсатора возникает электрическое поле, напряженность которого противоположна по разные стороны конденсатора. С этой напряженностью и связано появление новых слагаемых в (29)–(31). Рассмотрим решение системы (29)–(31) в упрощенном варианте, как и ранее приняв, что $\delta\rho_2 + \delta\rho_3 = 0$. Тогда из (28) следует, что $\delta I_1 = \delta I_3$ и $\delta\rho_1 + \delta\rho_4 = 0$. С учетом установленных соотношений уравнения (29) и (31) принимают вид

$$\delta I_1 = D(\delta\rho_1 - \delta\rho_2) + \chi k_1 S\varphi; \quad (32)$$

$$\delta I_3 = -D(\delta\rho_2 - \delta\rho_1) + \chi k_3 S\varphi. \quad (33)$$

Расчет импеданса. Используя последние, получим после выполнения интегрального преобразования Лапласа по времени

$$\omega\delta\rho_1 = -D(\delta\rho_1 - \delta\rho_2) - \chi k_1 \delta\varphi; \quad (34)$$

$$\omega\delta\rho_2 = -2D\delta\rho_2 - \chi k_2 \delta\varphi - 2\alpha\chi\delta\rho_2 + D(\delta\rho_1 - \delta\rho_2) + k_1\chi\delta\varphi \quad (35)$$

или

$$\delta\rho_1(\omega + D) - \delta\rho_2 D = -k_1\chi\delta\varphi; \quad (36)$$

$$\delta\rho_1(-D) + \delta\rho_2(\omega + 3D + 2\alpha\chi) = \chi(k_1 - k_2)\delta\varphi. \quad (37)$$

Вводя обозначение для приведенного коэффициента диффузии $D' = 3D + 2\alpha\chi$, при $k_1 = k_2$ получим

$$\delta\rho_2 = \frac{D}{\omega + D'}\delta\rho_1; \quad (38)$$

$$\delta\rho_1 \left[(\omega + D) - \frac{D^2}{(\omega + D')} \right] = -k_1\chi\delta\varphi; \quad (39)$$

$$\delta\rho_1 = \frac{k_1\chi(\omega + D')\delta\varphi}{((\omega + D)(\omega + D') - D^2)}. \quad (40)$$

Подставляя (38) и (39) в (32), находим

$$\delta I_1 = D\delta\rho_1 \left(1 - \frac{D}{\omega + D'} \right) + \chi k_1 \delta; \quad (41)$$

$$\delta I_1 = \left[\frac{D(\omega + D') - D^2}{(\omega + D)(\omega + D') - D^2} + 1 \right] \chi k_1 \delta \varphi. \quad (42)$$

Выражение в квадратных скобках в (42) определяет зависимость импеданса от части внешнего возмущения для переноса заряда через переходный слой, образующийся между межзеренной прослойкой и одним из зерен. Аналогичным соотношением будет описываться сопротивление, образующееся с другой стороны контакта прослойки и зерна. Двойной слой, образующийся на этой границе, будет инверсным по отношению к рассмотренному, что соответствует электроэффектам противоположного характера. Т. е., если в первом случае, например, движущийся поток зарядов будет сопровождаться зарядкой конденсаторного слоя, то во втором – разрядкой. Предлагаемое описание позволяет объяснить возникновение двух релаксаторов в области межзеренной границы и рассмотреть в последующем корреляционное взаимодействие этих релаксаторов в зависимости от размеров межзеренной прослойки и величины параметра ϵ , имеющего смысл глубины электроловушки.

Рассмотрим расчет импедансных характеристик процесса переноса заряда в объеме электролита, где в качестве движущих факторов выступает диффузия и электромиграция. Выражения для величин неравновесных токов могут быть записаны в виде

$$I_1 = D(\rho_2 - \rho_1) + \chi \varphi_{12}; \quad (43)$$

$$I_2 = D(\rho_3 - \rho_2) + \chi \varphi_{23}, \quad (44)$$

где φ_{12} , φ_{23} – падение внешнего напряжения на участках. Считая для упрощения расчетов, что сечение 2 находится посередине между сечениями 1 и 3, получим $\varphi_{12} = \varphi_{23} = 0,5\varphi_\epsilon$.

Уравнения (43) и (44) замыкаем соотношениями баланса

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = -I_1; \quad (45)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} = I_1 - I_2; \quad (46)$$

$$\frac{\partial \rho_3}{\partial t} = I_2. \quad (47)$$

$$\rho_1 + \rho_2 + \rho_3 = \text{const}. \quad (48)$$

Из (45)–(47) следует замкнутая система уравнений для вариаций плотности и токов, обусловленная вариацией внешнего напряжения $\varphi \rightarrow \varphi + \delta\varphi$, где φ – внешнее напряжение, которому соответствуют равновесные значения плотностей ρ_1 , ρ_2 , ρ_3 , при условии равенства нулю всех потоков. Запишем систему уравнений для переменных $\delta\rho_1$, $\delta\rho_2$, $\delta\rho_3$, $\delta\varphi$, варьируя (45)–(47) и выполнив интегральное преобразование по времени:

$$\omega \delta\rho_1 = -\delta I_1 = D(\delta\rho_1 - \delta\rho_2) - \chi \delta\varphi; \quad (49)$$

$$\omega \delta\rho_2 = D(\delta\rho_2 - \delta\rho_1) + D(2\delta\rho_2 + \delta\rho_1) - \chi \delta\varphi; \quad (50)$$

$$\delta I_1 = D(\delta\rho_2 - \delta\rho_1) + \chi \delta\varphi; \quad (51)$$

$$\delta I_2 = D(\delta\rho_3 - \delta\rho_2) + \chi \delta\varphi; \quad (52)$$

$$\delta\rho_3 + \delta\rho_1 + \delta\rho_2 = 0. \quad (53)$$

Отсюда находим

$$\delta\rho_1(\omega - D) + D\delta\rho_2 = -\chi \delta\varphi; \quad (54)$$

$$0 + \delta\rho_2(-3D + \omega) = 0. \quad (55)$$

Решение уравнений (54)–(55) дает

$$\delta\rho_1 = -\frac{\chi \delta\varphi}{\omega - D}; \quad (56)$$

$$\delta I_1 = \delta I_2. \quad (57)$$

На основании (56) находим выражение, связывающее между собой вариацию напряжения и вызываемый этим напряжением ток. Для этого подставим (56) в (43) и получим

$$\delta I_1 = \delta\varphi \left(\chi + \frac{D\chi}{\omega - D} \right). \quad (58)$$

Соотношение (58) показывает, что сопротивление состоит из реактивной и активной составляющих.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ, грант № X13ЛИТ-002 и Научного совета Литвы, грант № ТАР LB 04/2013.

Литература

1. Salkus T., Kazakevicius E., Kezionis A. Determination of the non Arrhenius behavior of the bulk conductivity of fast ionic conductor LLTO at high temperature // *Solid State Ionics*. 2011. Vol. 188. P. 69–72.
2. Kezionis A., Kazakevicius E., Salkus T. Broadband high frequency impedance spectrometer with working temperatures up to 1200 K // *Solid State Ionics*. 2011. Vol. 188. P. 110–113.
3. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds // *Solid State Ionics*. 2011. Vol. 188. P. 15–20.

Поступила 01.04.2014

УДК 531.19

Р. Н. Ласовский, кандидат физико-математических наук, старший преподаватель (БГТУ);
В. С. Вихренко, доктор физико-математических наук, профессор (БГТУ)

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ЛАБИЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В ОБЛАСТИ МЕЖЗЕРЕННЫХ ГРАНИЦ В ТВЕРДЫХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ

В рамках теории решеточных систем получена система уравнений для распределения концентрации лабильных частиц в области межзеренных границ электропроводящих керамик. Исследованы профили плотности заряда, получаемые при ступенчатом и экспоненциальном распределении кристаллического потенциала. Отмечено появление двух конденсаторных слоев, а также идентичность их амплитуд в обоих случаях. Показано, что при ступенчатом распределении кристаллического потенциала ширина конденсаторных слоев не зависит от вида ступеньки.

The system of equations describing the distribution of particle concentration in the area of inter-grain boundaries of conductive ceramics in the framework of the lattice systems theory is obtained. The charge density profiles obtained by stepwise and exponential distributions of the crystal potential are investigated. The appearance of two capacitor layers as well as the identity of their amplitudes in both cases is noted. It is shown with stepwise distribution of the crystalline potential width capacitor layers independent of the step form.

Введение. В области энергетики, связанной с вопросами создания химических источников тока, в настоящее время наблюдается значительный прогресс. Такая тенденция обусловлена возрастающей потребностью как в портативных источниках электрической энергии различного назначения, так и в системах сохранения и распределения электрической энергии, в частности для электромобильной техники и систем аварийной безопасности. Отмечается наиболее динамичное развитие рынка батарей для нужд микроэлектроники, вычислительной техники и средств связи [1].

Особое внимание потребителей к химическим источникам тока вызывает повышенные требования к их характеристикам. В частности, батареи должны иметь высокую плотность электрической энергии и большой срок ее хранения [1]. В этой связи представляют интерес твердотельные химические источники тока, использующие твердые ионные проводники.

В данной работе для вывода феноменологических уравнений, моделирующих перенос заряда в твердоэлектrolитной керамике, используются методы решеточных теорий [2, 3].

Уравнения эволюции решеточной системы.

Для учета базовых особенностей будем исходить из того, что ионные системы, подлежащие описанию, характеризуются наличием зарядов двух разных сортов [4]. Один из них – это высокоподвижные заряды (вакансии или ионы), обуславливающие процессы электропроводимости среды; вторые – малоподвижные заряды противоположного знака, создающие поляризирующий фон и соответствующую поляризацию среды, т. е. объемный заряд. Для построения описания, соответствующего поставленной цели, рассматривается двухкомпонентная система, состоящая из частиц сортов a и b , перемещающихся по узлам

соответствующих подрешеток, каждая из которых содержит N узлов (рис. 1).

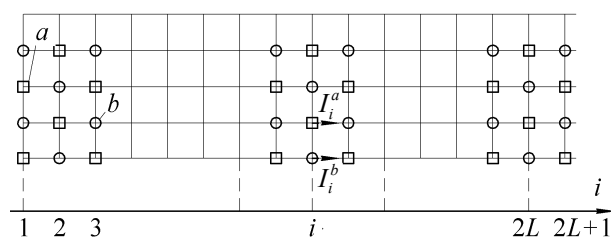


Рис. 1. Схема распределения частиц по узлам решетки

Для учета влияния границ зерен в рамках рассматриваемой модели естественным представляется моделирование границы через искажение характеристик подрешеток a и b , по которым перемещаются частицы обоих сортов. При этом исходное выражение для функции распределения модифицируем, добавляя кристаллический одночастичный потенциал в области межфазной границы.

В нашем случае изменение средней плотности и поля (из-за бесконечной плоской границы) будет иметь место только вдоль целочисленной оси i , показанной на рис. 1. Соответственно в дальнейшем ρ_i^a и ρ_i^b – значения средней заселенности i -х узлов подрешеток a и b , $i = 1, 2, \dots, L + 1$. Для описания в рамках решеточной теории межзеренной границы вводим массивы одноузельных кристаллических потенциалов ϵ_i^a и ϵ_i^b .

По заданному распределению средней плотности ρ_i^a и ρ_i^b определяем величины средних электрических потенциалов на каждом из узлов обеих подрешеток. Для этого воспользуемся разностным аналогом уравнения Пуассона. В строном соответствии с этим уравнением при условии однородности в направлении, перпендику-

лярном оси i , каждому ρ_i^α ($\alpha = a, b$) можно поставить в соответствие заряд плоской поверхности с поверхностной плотностью

$$\sigma_i^\alpha = \frac{q\rho_i^\alpha}{h^2}, \quad (1)$$

где q – заряд частицы; h – параметр решетки.

Поверхностная плотность заряда σ_i^α порождает однородное электрическое поле с напряженностью

$$E = \frac{1}{2\varepsilon\varepsilon_0} \sigma_i^\alpha \quad (2)$$

в обоих направлениях от рассматриваемой поверхности.

Суммирование по слоям позволяет получить общую напряженность поля $E_{i\Sigma}$ на i -м слое, которая будет определяться формулой

$$E_{i\Sigma}^\alpha = \frac{q}{2h^2\varepsilon\varepsilon_0} \left(\sum_{k=1}^i \sigma_k^\alpha - \sum_{k=i+1}^{2L+1} \sigma_k^\alpha \right). \quad (3)$$

В кинетические уравнения, определяющие потоки, входят безразмерные электрические потенциалы. Потому преобразуем (3) к виду, содержащему эти потенциалы:

$$E_{i\Sigma}^\alpha h = \alpha_q \left(\sum_{k=1}^i \sigma_k^\alpha - \sum_{k=i+1}^{2L+1} \sigma_k^\alpha \right) = \theta_{i+1}^\alpha - \theta_i^\alpha = \Delta\theta_i^\alpha, \quad (4)$$

где

$$\alpha_q = \frac{q^2\beta}{2h\varepsilon\varepsilon_0}; \quad (5)$$

$\theta_i^\alpha = \beta q \varphi_i^\alpha$ – безразмерный потенциал на i -м узле α подрешетки.

Определенная по (4) и (5) разность потенциалов $\Delta\theta_i^\alpha$ позволяет найти значения потенциалов на узлах подрешеток:

$$\theta_i^\alpha = \sum_{k=1}^i \Delta\theta_k^\alpha. \quad (6)$$

Для нахождения распределения концентрации подвижного компонента в области межфазной границы используем систему кинетических уравнений, описывающих диффузионный процесс. Для решения поставленной задачи задается некоторое начальное распределение концентрации и решается система уравнений эволюции, которая ввиду ее диссипативного характера приводит через некоторое время к конечному равновесному распределению концентрации. Поскольку выход на равновесное распределение описывается экспоненциальной зависимостью от времени, то равновесное распределение устанавливается в течение времени порядка времени релаксации.

Полученный по (6) параметр θ_i^α входит в выражение для потока, вытекающего из узла $i+1$ в узел i через их общую границу:

$$I_i^{\alpha\alpha} = W_{\alpha\alpha}^0 F(0_i^\alpha, 0_{i+1}^\alpha) \left\{ \exp(-\theta_{i+1}^\alpha) \exp(\beta\mu_{i+1}^\alpha) - \exp(-\theta_i^\alpha) \exp(\beta\mu_i^\alpha) \right\}, \quad (7)$$

где $W_{\alpha\alpha}^0$ – частотный множитель; $F(0_i^\alpha, 0_{i+1}^\alpha)$ – вероятность того, что два соседних узла в слоях i и $i+1$ являются вакантными; μ_i^α – химический потенциал частиц сорта α в слое i .

Определив с помощью (7) поток I_i , находим изменение плотности за один шаг алгоритма:

$$\Delta\rho_i^\alpha = \Delta\tau(I_i^{\alpha\alpha} - I_{i-1}^{\alpha\alpha}), \quad (8)$$

где $\Delta\tau$ – шаг по времени, соответствующий одному циклу трансформации, приводящей к новым значениям плотности в узлах

$$\rho_i^\alpha(t + \Delta\tau) = \rho_i^\alpha(t) + \Delta\rho_i^\alpha. \quad (9)$$

Расчеты повторяются до установления состояния равновесия, дающего распределение плотности и заряда по объему материала.

Запишем формулы, по которым вычисляются функции $F(0_i^\alpha, 0_{i+1}^\alpha)$ и параметры $\exp(\beta\mu_i^\alpha)$, необходимые для вычисления потоков (7).

При заданных ρ_i^α согласно [5–7]

$$\exp(\beta\mu_i^\alpha) = \exp(-\beta\varepsilon_i^\alpha) \frac{\rho_{1i}^\alpha}{\rho_{0i}^\alpha} \left(\prod_{j \neq i} \eta_{ji}^{\beta\alpha} \right)^{-1}; \quad (10)$$

$$F(0_i^\alpha, 0_j^\alpha) = \frac{\rho_{0i}^\alpha \rho_{0j}^\alpha}{\chi_j^\alpha(0_i^\alpha) \chi_i^\alpha(0_j^\alpha)} = \frac{\rho_{0i}^\alpha \rho_{0j}^\alpha}{K_{ji}^{\alpha\alpha}}, \quad (11)$$

$$K_{ij}^{\alpha\alpha} = \rho_{0j}^\alpha + \frac{\rho_{1j}^\alpha}{\eta_{ij}^{\alpha\beta}}. \quad (12)$$

Значения $\eta_{ij}^{\alpha\beta}$ находим как положительный корень уравнения:

$$\begin{aligned} (\eta_{ij}^{\alpha\beta})^2 + \eta_{ij}^{\alpha\beta} \frac{\rho_{1j}^\alpha - \rho_{0i}^\beta - W^{\alpha\beta}(\rho_{1i}^\beta - \rho_{1j}^\alpha)}{\rho_{0j}^\alpha} - \\ - \frac{W^{\alpha\beta} \rho_{1j}^\alpha}{\rho_{0j}^\alpha} = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Результаты вычислений и их обсуждение.

Рассмотрим ситуацию, когда распределение кристаллического потенциала ε_i^α имеет ступенчатый вид (рис. 2), т. е. потенциал отличен от нуля в слоях $40 \leq i \leq 60$. При таком распределении потенциала равновесный профиль плотности заряда σ имеет вид, показанный на рис. 3.

Как и следовало ожидать, ступенчатое распределение кристаллического потенциала приводит к появлению двух конденсаторных слоев

на профиле плотности заряда. Следует отметить, что ширина этих слоев практически не зависит от ширины ступеньки и ее величины.

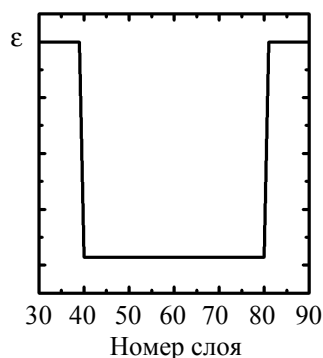


Рис. 2. Ступенчатое распределение кристаллического потенциала

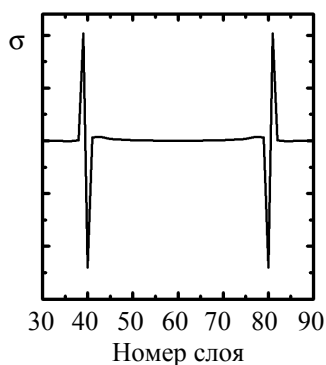


Рис. 3. Профиль плотности заряда при ступенчатом распределении кристаллического потенциала

На рис. 4 и 5 показано распределение кристаллического потенциала ε_i^α по экспоненциальным функциям Больцмана и соответствующий ему профиль плотности заряда.

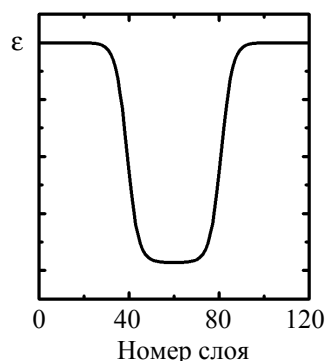


Рис. 4. Экспоненциальное распределение кристаллического потенциала

В этом случае ширина конденсаторных слоев практически идентична ширине переходной области в распределении кристаллического потенциала. Помимо того, амплитуды плотности заряда практически идентичны в обоих случаях.

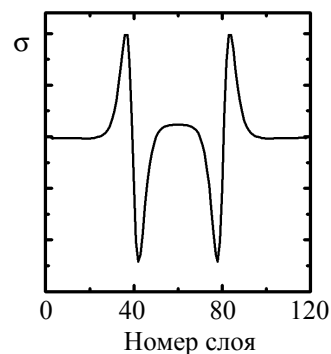


Рис. 5. Профиль плотности заряда при экспоненциальном распределении кристаллического потенциала

Заключение. В рамках теории решеточных систем получена система уравнений для описания электродиффузионных свойств проводящих керамик.

Исследованы профили плотности заряда, получаемые при ступенчатом и экспоненциальном распределении кристаллического потенциала. Отмечено появление двух конденсаторных слоев, а также идентичность их амплитуд в обоих случаях. Показано, что при ступенчатом распределении кристаллического потенциала ширина конденсаторных слоев не зависит от вида ступеньки.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ, грант № X13ЛИТ-002.

Литература

1. Lithium Batteries: Advanced Technologies and Applications / B. Scrosati [et al.] // New York: John Wiley & Sons, 2013. 392 p.
2. Вихренко В. С., Грода Я. Г., Бокун Г. С. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей: монография. Минск: БГТУ, 2008. 326 с.
3. Allnatt A. R., Lidiard A. B. Atomic transport in solids. Cambridge: Cambridge University Press, 1993. 572 p.
4. Бокун Г. С. Диффузионный импеданс твердого электролита в рамках решеточной модели // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 27–30.
5. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds // Solid State Ionics. 2011. Vol. 188. P. 15–20.
6. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Concentration kinetics of intercalation systems // Russian Journal of Electrochemistry. 2010. Vol. 46, No. 4. P. 389–400.
7. Bokun G. S., Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Nanostructurization caused by first order phase transitions in systems with hopping dynamics // Solid State Ionics. 2013. Vol. 251. P. 51–54.

Поступила 02.03.2014

УДК 531.19

Я. Г. Грода, кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой (БГТУ)**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В СЕДЛОВОЙ ТОЧКЕ НА ОБЪЕМНОЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ В РАМКАХ СУПЕРПОЗИЦИОННОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ**

Рассмотрен процесс диффузии решеточного флюида с дополнительным взаимодействием в седловой точке на объемноцентрированной кубической решетке. Предложена методика получения аналитического выражения для оценки кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида. Определен кинетический коэффициент диффузии решеточного флюида с притяжением (отталкиванием) ближайших соседей и равным ему взаимодействием в седловой точке. Результаты аналитических расчетов сопоставлены с данными компьютерного моделирования диффузионного процесса в исследуемой системе по методу Монте-Карло.

The diffusion process of the lattice fluid with additional interaction in the saddle point on a body-centered cubic lattice is considered. The technique of obtaining an analytic expression for the jump diffusion coefficient of the lattice fluid is proposed. The jump diffusion coefficient of the system with nearest neighbor attractive (repulsive) interaction and interaction in the saddle point of the same energy is calculated. The analytical results are compared with Monte Carlo simulation data.

Введение. Как было показано ранее, для решеточных флюидов на плоских квадратной [1] и треугольной [2] и простой кубической [3] решетках при исследовании процесса диффузии решеточного флюида может быть рассмотрена модель, в которой наряду с взаимодействием частиц, занимающих ближайшие соседние узлы, может быть учтено взаимодействие частиц, находящихся в так называемой седловой точке, которая совпадает с вершиной межузлового барьера, с их ближайшими соседями. Учет этого дополнительного взаимодействия вызывает изменение эффективного межузлового барьера и, очевидно, будет влиять на диффузионные свойства системы [4].

Для оценки коэффициентов диффузии решеточных флюидов на всех указанных выше решетках в работе [1] было предложено так называемое суперпозиционное приближение, суть которого состоит в непосредственном учете лишь парных (бинарных) корреляций в заполнении ближайших соседних узлов. Все корреляционные функции более высоких порядков определяются посредством произведения соответствующих парных.

В настоящей работе приводятся результаты применения указанного подхода к случаю диффузии решеточного флюида на объемноцентрированной кубической (ОЦК) решетке.

Модель. Модель представляет собой систему из n частиц, расположенных в узлах регулярной ОЦК-решетки, содержащей N узлов. Каждый узел может либо быть занят частицей, либо быть вакантным. Состояние узла i определяется числом заполнения $n_i = 1$ или $n_i = 0$ в зависимости от того, занят узел частицей или вакантен. Заполнение узла более чем одной частицей запрещено.

Находящаяся в узле O частица может взаимодействовать с энергией J с частицами, занимающими ближайшие соседние узлы, т. е. узлы

a, b, c, d, e, f, g и h (рис. 1). При ее последующем переходе в узел a при прохождении седловой точки Σ которая расположена в середине связи Oa она также взаимодействует с энергией J_Σ с узлами b, d, e, α, β и γ .

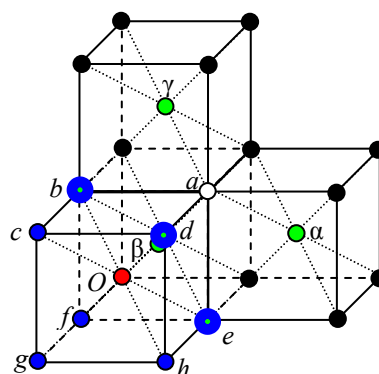


Рис. 1. Простая кубическая решетка: узлы a, b, c, d, e, f, g и h – ближайшие соседи узла O ; узлы b, d, e, α, β и γ – ближайшие соседи седловой точки

Таким образом, преодолеваемый частицей активационный барьер

$$E_a = E(\Sigma) - E(0), \quad (1)$$

где $E(\Sigma)$ – энергия частицы в седловой точке,

$$E(\Sigma) = E_0 + J_\Sigma(n_b + n_d + n_e + n_\alpha + n_\beta + n_\gamma),$$

здесь E_0 – исходная высота межузельного барьера; $E(0)$ – начальная энергия частицы, вычисляемая по формуле

$$E(0) = J(n_b + n_c + n_d + n_e + n_f + n_g + n_h).$$

Это позволяет представить активационный барьер в следующем виде:

$$E_a = E_0 - J(n_c + n_f + n_g + n_h) +$$

$$+J_{\Sigma}(n_{\alpha} + n_{\beta} + n_{\gamma}) - \Delta(n_b + n_d + n_e), \quad (2)$$

где $\Delta = J - J_{\Sigma}$.

Кинетический коэффициент диффузии решеточного флюида в суперпозиционном приближении. В дальнейшем, как и в случае решеточного флюида на простой кубической решетке [3], в работе будет рассматриваться система с $J = J_{\Sigma}$ и $\Delta = 0$. Для рассматриваемой модели в рамках общей теории диффузионных процессов в решеточных системах [5] и с учетом предложенного ранее суперпозиционного приближения [1] может быть предложено следующее выражение для оценки кинетического коэффициента диффузии

$$\begin{aligned} \frac{D_J}{D_0} = & (1 - cg)(1 + \sigma cg)^4 + \\ & + 3c\xi(1 - cg^2)(1 + \sigma cg)^3(1 + \sigma cg^2) + \\ & + 3c^2\xi^2(1 - cg^3)(1 + \sigma cg^2)^2(1 + \sigma cg)^2 + \\ & + c^3\xi^3(1 - cg^4)(1 + \sigma cg^2)^3(1 + \sigma cg), \quad (3) \end{aligned}$$

где

$$D_0 = \frac{za^2}{2d} \nu e^{-\beta E_0};$$

$$\sigma = \exp(\beta J) - 1; \quad \xi = \exp(-\beta J_{\Sigma}) - 1;$$

c – равновесное значение концентрации частиц; g – парная корреляционная функция двух ближайших соседних узлов; z – число ближайших соседей на решетке рассматриваемого типа; a – расстояние между узлами решетки (длина прыжка частицы); d – размерность пространства; ν – частота, имеющая порядок частоты колебаний частицы вблизи узла решетки и определяющая временную шкалу диффузионных процессов; $\beta = 1 / k_B T$ – обратная температура; k_B – постоянная Больцмана; T – температура.

Диаграммное приближение. Входящая в соотношение (3) парная корреляционная функция двух ближайших соседних узлов g может быть найдена, например, в рамках диаграммного приближения [6, 7], согласно которому

$$g = \frac{(1 - c)}{Y(Y - c)} \sigma - \frac{2mq\lambda d^m \sigma}{zc^2(2Y - 1)(\sigma - 1)}, \quad (4)$$

где

$$\lambda = \frac{(z - 2)\sqrt{W_c} - z}{4qmd^m};$$

$$Y = 0,5\left(1 + \sqrt{1 + 4c(1 - c)(W - 1)}\right);$$

$$d_c = \frac{\sqrt{W_c} - 1}{\sqrt{W_c} + 1}; \quad d = \frac{c(1 - c)(W - 1)}{Y^2};$$

$$W = \exp(-\beta J); \quad W_c = \exp(-\beta_c J);$$

m и q – число вершин в простейшей кольцевой диаграмме и ее вес соответственно. Коэффициент λ может быть определен из условия равенства критической температуры системы ее точному значению либо его наилучшей оценке. В рассматриваемом примере решеточного флюида на плоской квадратной решетке указанные параметры принимают следующие значения $m = 4$, $q = 9$, $z = 8$ и $|\beta_c J| = 0,630$, $\lambda = 2,571$.

Алгоритм моделирования. С целью верификации предложенных выражений для кинетического коэффициента диффузии может быть выполнено компьютерное моделирование диффузионных процессов по методу Монте-Карло с помощью алгоритма Метрополиса [8], модифицированного с целью учета взаимодействия в седловой точке.

В рамках этого алгоритма случайным образом выбирается узел i , занятый частицей. После этого также случайно определяется направление возможного прыжка частицы в один из ближайших узлов j . Если второй выбранный узел занят частицей, то переход частицы в него, очевидно, невозможен. Тем не менее попытка такого перехода учитывается. Если же он свободен, то переход частицы в него осуществляется с вероятностью

$$P_{a0} = P_0^{-1} \exp\{-\beta[J_{\Sigma} s_{\Sigma} - J_s]\}, \quad (5)$$

где P_0 – нормировочный коэффициент, равный $\exp(-3\beta J)$ для системы с притяжением ближайших соседей и $\exp(4\beta J)$ для системы с отталкиванием, его физический смысл состоит в том, чтобы наиболее энергетически выгодный переход частицы осуществлялся с вероятностью, равной 1; s_{Σ} – число ближайших соседей частицы, находящейся в седловой точке; s – число ближайших соседей частицы, находящейся в исходном узле O . Например, при перескоке частицы из узла O в узел a

$$\begin{aligned} s &= n_b + n_c + n_d + n_e + n_f + n_g + n_h; \\ s_{\Sigma} &= n_b + n_d + n_e + n_{\alpha} + n_{\beta} + n_{\gamma}. \end{aligned} \quad (6)$$

Если $P_r > P_{a0}$, где P_r – случайное число из диапазона $[0; 1]$, то переход частицы между узлами не осуществляется, в противном случае он считается произошедшим. Повторение данной процедуры n раз, где n – число частиц на решетке, формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

Для моделирования диффузионных процессов использовалась решетка с периодическими граничными условиями, содержащая $12^3 = 1728$ решеточных узлов. Процедура моделирования состояла из 50 000 МКШ. Дополнительно первые 10 000 МКШ отводились на эквиприлизацию системы и не учитывались в дальнейшем.

Последующее усреднение по 1000 траекторий позволяло изучить зависимость среднего квадрата смещения центра масс системы частиц и среднего квадрата смещения отдельной частицы от времени, измеренного в МКШ, и определить соответственно коэффициент кинетической диффузии D_J и коэффициент диффузии меченых атомов D_T .

Для снижения влияния размеров моделируемой системы на получаемые результаты использовались периодические граничные условия.

Результаты моделирования. На рис. 2 представлены зависимости от концентрации кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида с взаимодействием ближайших соседей и равным ему взаимодействием в седловой точке и проведено сопоставление результатов моделирования с данными, полученными на основании соотношения (3).

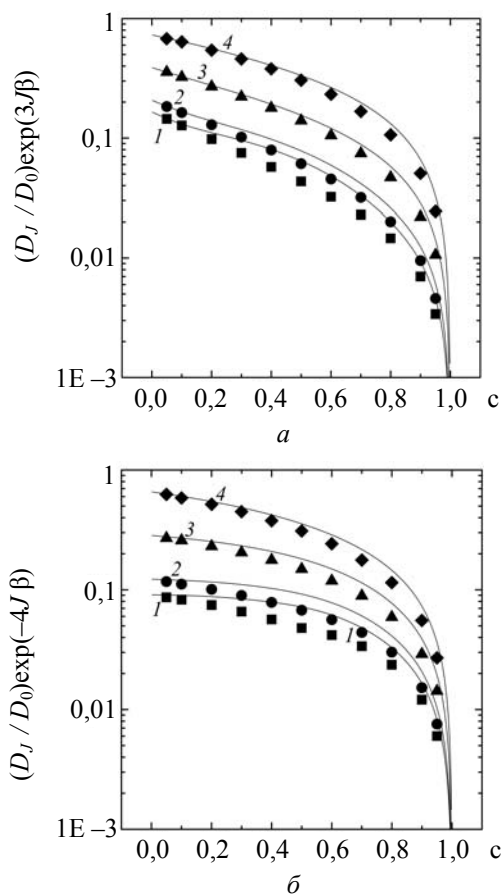


Рис. 2. Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида с притяжением (а) и отталкиванием (б) ближайших соседей и равным ему взаимодействием в седловой точке на ОЦК-решетке:
 1 – $T/T_c = 1,05$; 2 – $T/T_c = 1,20$;
 3 – $T/T_c = 2,00$; 4 – $T/T_c = 6,00$.

Точками представлены результаты МКМ, линиями – результаты использования соотношения (3)

Данное сопоставление ясно показывает, что в случае решеточного флюида на ОЦК-решетке развиваемый приближенный подход может с успехом использоваться для определения коэффициентов диффузии при не очень низких температурах ($T \geq 1,50T_c$).

Также можно отметить, что в области низких концентраций ($c \leq 0,20$) соответствие результатов аналитических расчетов и данных моделирования является весьма хорошим даже при низких температурах. Такое совпадение результатов может быть объяснено тем, что при низких концентрациях корреляции в заполнении решеточных узлов проявляются слабо ввиду малого количества примесных частиц.

Литература

1. Грода Я. Г. Коэффициент диффузии решеточного флюида с взаимодействием в седловой точке: суперпозиционное приближение // Труды БГТУ. 2011. № 6 (144): Физ.-мат. науки и информатика. С. 27–30.
2. Грода Я. Г. Диффузия решеточного флюида на плоской треугольной решетке с учетом взаимодействия в седловой точке // Труды БГТУ. 2012. № 6 (153): Физ.-мат. науки и информатика. С. 51–53.
3. Грода Я. Г. Коэффициент диффузии решеточного флюида с взаимодействием в седловой точке на простой кубической решетке: результаты моделирования и суперпозиционного приближения // Труды БГТУ. 2013. № 6 (162): Физ.-мат. науки и информатика. С. 27–30.
4. Collective surface diffusion on triangular and square interacting lattice gases / A. Danani [et al.] // Surf. Science. 1998. Vol. 409. P. 117–129.
5. The self-consistent diagram approximation for lattice systems: diffusion properties of interacting lattice gases / G. S. Bokun [et al.] // Physica A. 2000. Vol. 296, No. 1/2. P. 83–105.
6. Вихренко В. С., Грода Я. Г., Бокун Г. С. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей. Минск: БГТУ, 2008. 326 с.
7. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. The diagram approximation for lattice systems // Phys. Let. A. 2001. Vol. 286, No. 2/3. P. 127–133.
8. Uebing C., Gomer R. A. Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions // J. Chem. Phys. 1991. Vol. 95, No. 10. P. 7626–7652.

Поступила 20.03.2014

УДК 531.19

Г. С. Бокун, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ НЕРНСТА – ПЛАНКА – ПУАССОНА ДЛЯ ИОННОГО КРИСТАЛЛА

Рассмотрен процесс диффузии в системе, состоящей из двух твердых фаз с разной концентрацией носителей заряда. Для решения задачи использованы интегральное преобразование Лапласа по времени и пространственное преобразование Фурье. В итоге получено асимптотическое решение, позволяющее исследовать характер изменения со временем разности потенциалов двух фаз, образующейся из-за возникновения диффузионного переходного слоя. Показано, что по мере увеличения размера слоя и выравнивания концентраций в фазах исходной системы разность потенциалов стремится к постоянному предельному значению.

Diffusion in a system consisting of two solid phases with different concentration of charge carriers is considered. The integral Laplace transform in time and the spatial Fourier transform are used for solving the diffusion equations. As a result, we obtain an asymptotic solution for the change with time of the potential difference between the two phases formed due to the diffusive transition layer. It is shown that with the increase of size of the transition layer and the alignment of the concentration in the initial phases the potential difference tends to a constant limiting value.

Введение. Для описания процессов переноса в твердых и жидких средах используются уравнения диффузионного типа, дополненные уравнениями Нернста и Пуассона [1]. В замкнутой форме эта система уравнений известна как система Нернста – Планка – Пуассона. Планк получил приближенное выражение для разности потенциалов двух электролитов, возникающей после снятия разделявшей их перегородки. Поиск решения упомянутой системы уравнений является важной непреходящей задачей, так как позволяет устанавливать механизмы электропереноса в различных случаях, опираясь на метод электрохимического импеданса, что в итоге позволяет исследовать кинетические особенности электрохимических систем при различных термодинамических условиях в широком диапазоне характерных частот или масштабов времени.

В связи с тем, что решение указанных уравнений аналитическими методами затруднено, существенными становятся подходы, ориентированные на численные методы. Наряду с последними широкое распространение получили подходы, основанные на составлении электрических моделей, приближенно соответствующих исходным уравнениям, что позволяет исследовать электрохимические характеристики достаточно сложных систем [2–6].

Основная часть. Рассмотрим возможность решения определяющих уравнений для случая интеркаляционных систем [7, 8] при условии, что эти уравнения являются линейными. Для решения системы получающихся трех линейных уравнений в частных производных с заданными начальными и граничными условиями обычно используются стандартные подходы, отличающиеся чрезвычайной громоздкостью. Здесь ограничимся отысканием лишь асимпто-

тического решения поставленной задачи, чтобы найти аналитическое решение проблемы поведения разности потенциалов, возникающей при контакте двух растворов электролитов и изменяющейся по мере диффузионного размытия переходной области, образующейся при выравнивании концентраций носителей зарядов.

Запишем исходную систему уравнений:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\epsilon \epsilon_0} (\rho_1 - \rho_2); \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (q\varphi + \gamma_1 \rho_1); \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (-q\varphi + \gamma_2 \rho_2). \quad (3)$$

где ρ_i и γ_i ($i = 1, 2$) – концентрации и термодинамические факторы компонентов; q – заряд частиц; φ – электрический потенциал.

В уравнениях (2) и (3) с целью упрощения обозначений коэффициенты диффузии D_1 и D_2 включают в качестве множителей обратную температуру $\beta = 1/(k_B T)$ ($D = \beta D_{ct}$, где D_{ct} – химический коэффициент диффузии). Переходя аналогично [3] к безразмерным переменным, представим систему уравнений в виде

$$\gamma_1 \rho_1'' + \Theta'' = \frac{1}{D} \frac{\partial \rho_1}{\partial t}; \quad (4)$$

$$\gamma_2 \rho_2'' - \Theta'' = \frac{\partial \rho_2}{\partial t}; \quad (5)$$

$$\Theta'' = -(\rho_1 - \rho_2). \quad (6)$$

В уравнениях (4)–(6) и далее используются безразмерные величины

$$D = D_1 / D_2; \quad \Theta = q\beta\varphi;$$

$$k^2 = \beta q^2 \rho_{2\infty} / \varepsilon \varepsilon_0 h^3; \quad v = k^2 D_2 / \beta; \\ \gamma^* = \beta \gamma; \quad x^* = kx; \quad t^* = vt, \quad (7)$$

однако звездочки, обозначающие безразмерные переменные, для упрощения опускаем.

Введем дополнительные обозначения:

$$\rho_i = \rho_{i-\infty} + \Delta \rho_i U_i, \quad \Delta \rho_i = \rho_{i\infty} - \rho_{i-\infty}, \quad (8)$$

где ∞ и $-\infty$ обозначают значения концентраций на правом ($x \rightarrow \infty$) и левом ($x \rightarrow -\infty$) концах системы соответственно.

Согласно (8),

$$U_0(x) = U_1(x, 0) = U_2(x, 0) = \begin{cases} e^{-\varepsilon x}, & x > 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (9)$$

Фурье-образ этих функций [9]

$$U_0(k) = \frac{i}{(i\varepsilon - k)} \frac{1}{(2\pi)^{1/2}}. \quad (10)$$

В новых переменных исходная система уравнений (4)–(6) принимает вид

$$\Theta'' = -\Delta \rho (U_1 - U_2); \quad (11)$$

$$\gamma_1 U_1'' - U_1 + U_2 = \frac{1}{D} \frac{\partial U_1}{\partial t}; \quad (12)$$

$$\gamma_2 U_2'' - U_2 + U_1 = \frac{\partial U_2}{\partial t}. \quad (13)$$

Рассмотрим решение уравнений (4)–(6) в приближении Планка, когда полагают

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = \frac{\partial \rho_2}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

Тогда, вычитая из уравнения (4) уравнение (5), получим

$$D\gamma_1 \rho_1'' - \gamma_2 \rho_2'' + \Theta''(1 + D) = 0. \quad (14)$$

Из (14) следует, что

$$\Delta \Theta = \frac{(D_2 \gamma_2 - D_1 \gamma_1) \Delta \rho}{D_1 + D_2}. \quad (15)$$

Покажем, каким образом результат (15) получается как асимптотическое решение исходной системы уравнений (1)–(3) или (11)–(13). Для этого выполним в (11)–(13) преобразования Фурье по пространству и Лапласа по времени. В результате получим

$$-\gamma_1 k^2 U_1 - U_1 - U_2 = (s U_1 - U_0(k)) / D; \\ -\gamma_2 k^2 U_2 - U_2 + U_1 = s U_2 - U_0(k); \quad (16)$$

$$ik E_k = \Theta k^2 = \Delta \rho \Delta U; \quad \Delta U = U_2 - U_1, \quad (17)$$

где E_k – напряженность поля.

Вычислим из (16) и (17) U_1 и U_2 и, определив с помощью компьютерной алгебры $U_2 - U_1$, получим

$$\Delta U = \frac{k^2 (\gamma_2 - \gamma_1)}{s^2 + s B_1 + B_2}; \quad (18)$$

$$B_1 = 1 + D - k^2 \gamma_2 - D k^2 \gamma_1;$$

$$B_2 = D k^4 \gamma_1 \gamma_2 - D k^2 \gamma_1 - D k^2 \gamma_2.$$

С учетом (10) и (11) из (18) находим

$$E_k = -\frac{(\gamma_2 - D \gamma_1) \Delta \rho k}{(2\pi)^{1/2} (i\varepsilon - k)(s^2 + s B_1 + B_2)}. \quad (19)$$

Интересующая нас разность потенциалов определяется выражением

$$\Delta \Theta = \int \int_{-\infty}^{\infty} E_k e^{ikx} dk dx = \int_{-\infty}^{\infty} E(x) dx. \quad (20)$$

Для интегрирования в (20) отметим, что

$$\frac{k}{i\varepsilon - k} = -\frac{k(i\varepsilon + k)}{k^2 + \varepsilon^2} = \frac{\varepsilon^2 - ik\varepsilon}{k^2 + \varepsilon^2} - 1. \quad (21)$$

С учетом представления

$$\delta(k) = \frac{\varepsilon}{k^2 + \varepsilon^2}, \quad \varepsilon \rightarrow 0$$

соотношение (21) перепишем в виде

$$\frac{k}{i\varepsilon - k} = \delta(k) [\varepsilon - ik] - 1, \quad (22)$$

что позволяет представить (19) в форме

$$E_k = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} [1 - \delta(k) [\varepsilon - ik]] V(k); \quad (23)$$

где

$$V(k) = \frac{(\gamma_2 - D \gamma_1) \Delta \rho}{s^2 + s B_1 + B_2}. \quad (24)$$

Используя (23) и (24), найдем

$$E(x) = \int E_k e^{ikx} dk = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int V(k) e^{ikx} dk - \\ - \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int \delta(k) [\varepsilon - ik] V(k) e^{ikx} dk = \\ = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int V(k) e^{ikx} dk - \varepsilon V(0). \quad (25)$$

Интегрирование (25) в соответствии с (20) позволяет записать

$$\Delta \Theta = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \iint V(k) e^{ikx} dx dk = \\ = \int V(k) \delta(k) dk = V(0). \quad (26)$$

Используя $V(0)$ согласно (24), из соотношения (26) находим

$$\Delta\Theta = \frac{(\gamma_2 - D\gamma_1)\Delta\rho}{s[s + (1 + D)]}. \quad (27)$$

Образу (27) соответствует оригинал

$$\frac{1}{s(s-a)} \Rightarrow \frac{1}{a}(e^{at} - 1). \quad (28)$$

В нашем случае $a = -(1 + D)$; тогда при $t \rightarrow \infty$ согласно (27) получим

$$\Delta\Theta = \text{const} = \frac{(\gamma_2 - D\gamma_1)\Delta\rho}{1 + D}, \quad (29)$$

что полностью совпадает с соотношением Планка (15).

Заключение. Рассмотрен процесс диффузии в системе, состоящей из двух твердых фаз, с разной концентрацией носителей заряда через границу раздела между ними. В случае контакта твердых тел, в отличие от жидких растворов, диффузионный процесс описывается системой линейных уравнений, допускающей аналитическое решение. Для решения задачи использованы интегральное преобразование Лапласа по времени и пространственное преобразование Фурье. В результате получена система алгебраических уравнений, решенная методами компьютерной алгебры. Асимптотическое решение для разности потенциалов получено после одновременного интегрирования итоговых выражений по пространственным переменным в прямом и обратном пространствах. Для получения зависимости скачка потенциалов от времени выполнено обратное преобразование по переменным Лапласа. В итоге получено асимптотическое решение, позволяющее исследовать характер изменения со временем разности потенциалов в двух фазах, образующейся из-за возникновения диффузионного переходного слоя. Показано, что по мере увеличения размеров слоя и выравнивания концентраций в фазах исходной системы разность потенциалов стремится к постоянному предельному значению. Напряженность электрического поля при этом стремится к нулю, в то время как ширина переходной области неограниченно возрастает, устремляясь в пределе к бесконечности.

Величина скачка разности потенциалов на левой и правой границах системы совпадает с

результатом, полученным Планком при использовании приближения о локальной электронейтральности системы, о конечной ширине переходного слоя и предположения о линейном характере изменения плотности в нем. Полученный в данной работе результат является точным и свободен от отмеченных недостатков. Найденное асимптотическое решение позволяет установить характер изменения со временем величины скачка электрического потенциала с момента зарождения переходного слоя и до его диффузионного размытия.

Литература

1. Edmund J. F. Dickinson, Leon Freitag, Richard G. Compton. Dynamic Theory of Liquid Junction Potentials // *J. Phys. Chem. B.* 2010. Vol. 114. P. 187–197.
2. Computer simulations of electrodiffusion problems based on Nernst – Planck and Poisson equations / J. J. Jasielec [et al.] // *Computational Materials Science.* 2012. P. 75–90.
3. Salkus T., Kazakevicius E., Kezionis A. Determination of the non Arrhenius behavior of the bulk conductivity of fast ionic conductor LLTO at high temperature // *Solid State Ionics.* 2011. Vol. 188. P. 69–72.
4. Kezionis A., Kazakevicius E., Salkus T. Broadband high frequency impedance spectrometer with working temperatures up to 1200 K // *Solid State Ionics.* 2011. Vol. 188. P. 110–113.
5. Zhan-Guo Liu, Jia-Hu Ouyang, Yu Zhou, Xiao-Liang Xia. Electrical conductivity and thermal expansion of neodymium-ytterbium zirconate ceramics // *Journal of Power Sources.* 2010. P. 3261–3265.
6. Macdonald J. R. Impedance Spectroscopy Emphasizing Solid Materials and Systems. New York: Wiley, 1987. 346 p.
7. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Concentration kinetics of intercalation systems // *Russian Journal of Electrochemistry.* 2010. Vol. 46, No. 4. P. 389–400.
8. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds // *Solid State Ionics.* 2011. Vol. 188. P. 15–20.
9. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1977. 831 с.

Поступила 01.04.2014

УДК 531.19

Р. Н. Ласовский, кандидат физико-математических наук, старший преподаватель (БГТУ)**НАНОСТРУКТУРИЗАЦИЯ ИНТЕРКАЛЯЦИОННЫХ СИСТЕМ
ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ**

Получена замкнутая система дифференциально-разностных уравнений для описания эволюции поля концентрации решеточной системы при наличии внешнего поля. Исследована кинетика двух- и трехмерных решеточных систем с симметричным расположением «затравочных» областей. Показано, что вначале возникает ряд узких конденсированных центральных зон, поглощаемых с течением времени широкой конденсированной зоной, образующейся в направлении действия внешнего поля. Возникновение центральных полос и скорость их исчезновения зависят от величины внешнего поля.

A closed system of differential-difference evolution equations for the concentration field of the lattice system in the presence of an external field is obtained. The kinetics of two- and three-dimensional lattice systems with a symmetric arrangement of the "inoculating" areas is investigated. It is shown that initially there is a series of narrow condensed central bands that are absorbed over time by the wide condensed zone formed in the direction of the external field. The emergence of the central bands and their rate of extinction depend on the intensity of the external field.

Введение. Спонтанное формирование сложных структур, сопровождаемое фазовыми превращениями, является давней междисциплинарной темой исследований [1].

С интенсивным развитием нанотехнологий и их приложений в микроструктурах, размер которых определяется нанометровым масштабом, обнаруживаются новые свойства веществ. При этом свойства наноструктур определяются не только размером кластеров, но и способами их организации и самоорганизации в нанокластерную структуру. Кроме того, изменение структурно-фазового состояния поверхностных слоев, недостижимое при традиционных способах термомеханической и химико-термической обработки часто приводит к улучшению служебных характеристик промышленных материалов [2, 3]. В целом оказывается, что переход в наноструктурированное состояние определяет коренную перестройку материала не только в масштабном отношении, но и, прежде всего, в свойствах элементов, его образующих, и т. д.

Согласно положениям неравновесной термодинамики, любая система стремится к некоторому гомогенному или гетерогенному конечному равновесному состоянию. В случае же наноструктур возникает метастабильное равновесное состояние, соответствующее локальному минимуму термодинамического потенциала. Выяснение условий формирования наноструктурного состояния представляет особый интерес.

Фазовые переходы первого рода в термодинамически метастабильной фазе приводят к процессу нуклеации [4] и могут быть использованы для производства наноструктурированных материалов [5, 6].

Интеркаляционные соединения представляют собой примеры систем, в которых процессы нуклеации могут привести к наноструктур-

ным состояниям. Эти соединения часто рассматриваются как состоящие из довольно жесткой подложки и подсистемы лабильных частиц, которые движутся в потенциальном рельефе, созданном подложкой. Подвижные частицы проводят больше всего времени в минимумах потенциального рельефа (узлах решетки) и делают быстрые термически активированные прыжки между ближайшими узлами решетки, таким образом, мобильная подсистема может быть описана в рамках решеточной модели.

В данной работе с использованием основного кинетического уравнения сформулированы дифференциально-разностные уравнения эволюции поля концентрации. Для учета межчастичных корреляций используется квазихимическое приближение. Исследована кинетика распределения концентрации в однородной метастабильной двух- и трехмерной пространственно неоднородной решеточной системе при наличии внешнего поля.

Уравнения эволюции решеточной системы. Кинетика поля концентраций в решеточной системе изучалась с помощью уравнения баланса числа частиц

$$\frac{d\rho_i}{dt} = - \sum_{j=1}^z I_{ij}, \quad (1)$$

где средний поток числа частиц через границу ячеек i и j определяется выражением

$$I_{ij} = w_0 \left[(1+R)e^{\beta\mu_i} - (1-R)e^{\beta\mu_j} \right] F(0_i, 0_j), \quad (2)$$

где w_0 – интенсивность термоактивированных перескоков частиц при предельно низких решеточных концентрациях; $\beta = 1 / k_B T$ – обратная температура; k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура системы; μ_i – химический потенциал в i -м слое; R – коэффициент,

учитывающий внешнее поле; $F(0_i, 0_j)$ – бинарная корреляционная функция.

Для расчета корреляционных функций и химических потенциалов, т. е. замыкания выражения (1), применялось квазихимическое приближение для неравновесных состояний [5, 7–9].

В этом приближении бинарная функция распределения определяется выражением

$$F(0_i, 0_j) = \rho_{0i}\rho_{0j} / K_{ij}, \quad (3)$$

где ρ_{0i} – концентрация вакансий в i -м узле;

$$K_{ij} = \rho_{0j} + \rho_{1j} / \eta_{ij}; \quad (4)$$

ρ_{1i} – концентрация частиц в i -м узле (причем $\rho_{1i} = 1 - \rho_{0i}$); η_{ij} определяется как положительный корень уравнения:

$$\eta_{ij}^2 + \eta_{ij} \frac{\rho_{1j} - \rho_{0i} - W(\rho_{1i} - \rho_{1j})}{\rho_{0j}} - \frac{W\rho_{1j}}{\rho_{0j}} = 0, \quad (5)$$

где $W = \exp(-\beta J)$; J – энергия взаимодействия ближайших соседей.

Химический потенциал в произвольном узле i определяется выражением

$$\exp(\beta\mu_i) = \frac{\rho_{1i}}{\rho_{0i}} / \prod_{j \neq i} \eta_{ji}. \quad (6)$$

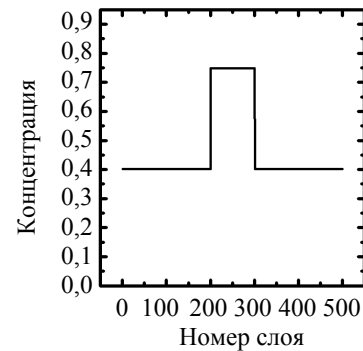
Результаты вычислений и их обсуждение.

На рис. 1 показана кинетика распределения концентрационного поля в двухмерной системе размером 500 ячеек, в которой начальное распределение имеет ступенчатую «затравку» в центре. Внешнее электромагнитное поле направлено слева направо. В системе использованы блокирующие граничные условия, т. е. отсутствует приток частиц справа и их отток слева. На рис. 2 показана кинетика распределения концентрационного поля в двухмерной системе размером 200×200 ячеек, в которой начальное распределение также имеет ступенчатую «затравку» в центре. Внешнее электромагнитное поле направлено слева направо. В данной системе использованы горизонтальные блокирующие граничные условия и вертикальные периодические граничные условия.

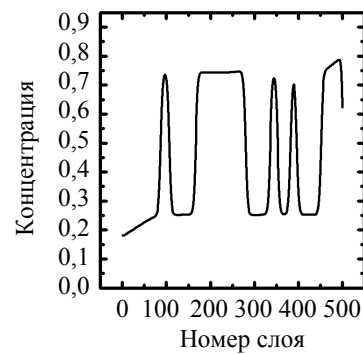
Как видно из рисунков, вблизи центральной затравочной области появляются узкие конденсированные зоны, а также конденсированная зона в правой части системы, обусловленная внешним полем. Со временем центральные конденсированные области исчезают.

Следует также отметить, что появление узких центральных полос и скорость их исчезновения зависят от величины внешнего поля. Так, при малых его значениях центральные узкие полосы не исчезают в течение некоторого времени, и в системе наблюдается описанная выше структуризация. При больших значениях поля

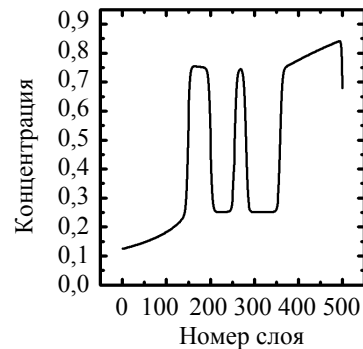
частицы интеркалянта быстро диффундируют вправо, и узкие полосы не появляются вообще.



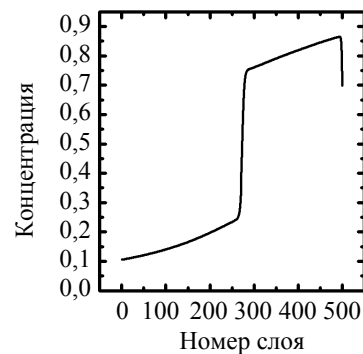
а



б



в



г

Рис. 1. Наноструктуризация двухмерной системы.

Время указано в шагах алгоритма Эйлера:

а – 0; б – $5 \cdot 10^5$; в – $2 \cdot 10^6$; г – $3,5 \cdot 10^6$

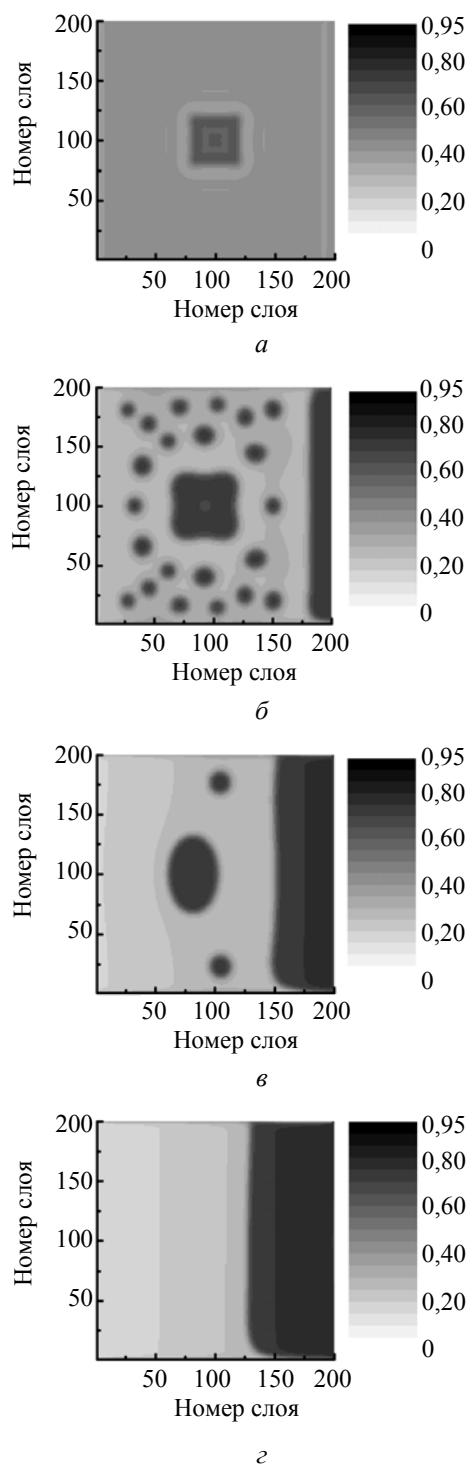


Рис. 2. Наноструктуризация трехмерной системы. Время указано в шагах алгоритма Эйлера: $a - 10^3$; $b - 10^5$; $v - 4 \cdot 10^5$; $z - 7 \cdot 10^5$

Заключение. Получена замкнутая система дифференциально-разностных уравнений для описания эволюции поля концентрации решеточной системы при наличии внешнего поля.

Исследована кинетика двух- и трехмерных решеточных систем с симметричным расположением «затравочных» областей. Показано, что вначале возникает ряд узких конденсированных центральных зон, поглощаемых с течением времени конденсированной зоной, образующейся в направлении действия внешнего поля. Возникновение центральных полос и скорость их исчезновения зависят от величины внешнего поля.

Литература

1. Роулинсон Дж. М., Уидом Б. Молекулярная теория капиллярности. М.: Мир, 1986. 376 с.
2. Колобова Ю. Р., Валиева Р. З. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов. Новосибирск: Наука, 2000. 231 с.
3. Maier J. Thermodynamics of Nanosystems with a Special View to Charge Carriers // Adv. Mater. 2009. Vol. 21. P. 2571–2585.
4. Gunton J. D. Homogeneous Nucleation // J. Stat. Phys. 1999. Vol. 95. P. 903–923.
5. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Concentration kinetics of intercalation systems // Russian Journal of Electrochemistry. 2010. Vol. 46, No. 4. P. 389–400.
6. Wang C. X., Yang G. W. Thermodynamics of metastable phase nucleation at the nanoscale // Mater. Sci. Eng. R. 2005. Vol. 49. P. 157–202.
7. Ласовский Р. Н., Бокун Г. С. Диаграммное приближение для неравновесных и неоднородных состояний решеточных систем // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2010. Вып. XVIII. С. 56–58.
8. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds // Solid State Ionics. 2011. Vol. 188. P. 15–20.
9. Bokun G. S., Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Nanostructurization caused by first order phase transitions in systems with hopping dynamics // Solid State Ionics. 2013. Vol. 251. P. 51–54.

Поступила 02.03.2014

ФИЗИКА

УДК 539.12

Д. В. Кленецкий, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)

**ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ЧАСТИЦ НА СКОРОСТЬ
ЗВУКА В АДРОННОМ РЕЗОНАНСНОМ ГАЗЕ**

В работе изучается влияние размера частиц на скорость звука в адронном резонансном газе, состоящем из адронных резонансов, имеющих массы $M < 2$ ГэВ. Вычислено давление, плотность энергии и энтропии в адронном резонансном газе с учетом исключенного объема (объема, занимаемого частицами). Исключенный объем учитывается при использовании процедуры, предложенной Ван-дер-Ваальсом и обобщенной на случай переменного числа частиц в системе. Используя термодинамические величины, вычисленные с учетом исключенного объема, мы определили скорость звука в газе и полученные результаты сравнили со скоростью звука в состоянии из точечных частиц газе. При высоких температурах учет размера частиц приводит к существенному увеличению скорости звука в газе.

We study the effect of the particle size on the speed of sound in the hadron resonance gas which consists of hadronic resonances with masses $M < 2$ GeV. We have calculated the pressure, the energy density and the entropy density in the hadron resonance gas taking into account the excluded volume (the volume occupied by the particles). The excluded volume is taken into account using the procedure proposed by Van der Waals, generalized to the case of a variable number of particles in the system. Using thermodynamic quantities calculated taking into account the excluded volume, we determined the speed of sound in the gas and the results compared with the velocity of sound in a gas which consists of point particles. At high temperatures accounting the particle size leads to a significant increase of the sound velocity in the gas.

Введение. Экспериментальное исследование ультрарелятивистских столкновений ядер на действующих ускорителях тяжелых ионов представляет собой уникальную возможность изучения свойств сильновзаимодействующей материи с высокой плотностью энергии. Цель экспериментов по столкновению тяжелых ионов при высоких энергиях заключается в том, чтобы создать адронную (сильновзаимодействующую) материю при высоких температурах. При низких температурах такая материя должна представлять собой идеальный газ π -мезонов, самых легких адронов. При увеличении температуры газ становится более плотным, и надо учитывать взаимодействие между частицами. Взаимодействия между адронами включают в себя две составляющих: силы притяжения и силы отталкивания. В статистических подходах силы притяжения моделируют, принимая во внимание резонансы (возбужденные состояния адронов). Среда взаимодействующих элементарных частиц может быть хорошо приближена невзаимодействующим газом, в котором наряду со стабильными частицами учитываются резонансы [1, 2]. Силы отталкивания возникают при учете исключенного объема (объема, занимаемого частицами) [3].

Цель данной работы заключается в исследовании влияния исключенного объема, который определяется геометрическим размером частиц, на скорость звука в адронном резонансном газе. Мы используем систему единиц, в которой $c = \hbar = k = 1$, где c – скорость света в вакууме; \hbar – постоянная Планка; k – постоянная Больцмана.

Основная часть. Скорость звука c_s в многокомпонентном адронном газе [4] определяется соотношением

$$c_s^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \right)_V = \frac{s(T)}{C_V(T)}, \quad (1)$$

где P – давление системы; ε – плотность энергии; $s(T)$ – плотность энтропии; $C_V(T)$ – теплоемкость при постоянном объеме,

$$s(T) = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V; \quad C_V(T) = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_V. \quad (2)$$

Согласно (1), скорость звука определяется уравнением состояния системы, которое представляет собой функциональную зависимость давления от плотности энергии $P(\varepsilon)$. Скорость звука играет важную роль в гидродинамической эволюции системы, а также рассматривается как

чувствительный индикатор критического поведения системы [5].

В работе [6] была вычислена скорость звука и исследована ее зависимость от температуры для многокомпонентного резонансного газа, состоящего из точечных частиц. Однако из эксперимента известно, что адроны являются протяженными частицами, их размеры известны из эксперимента. Чтобы учесть эту особенность, надо ввести в рассмотрение собственные объемы адронов, которые приводят к силам отталкивания между ними на малых расстояниях.

Для учета сил отталкивания между адронами пользуются процедурой, предложенной Ван-дер-Ваальсом, обобщенной на случай переменного числа частиц в системе. Вместо объема системы V вводят в рассмотрение объем, доступный для движения адронов. Давление системы P_v с учетом исключенного объема [3] определяется трансцендентным уравнением:

$$P_v = P \exp\left(-\frac{P_v v}{T}\right), \quad (3)$$

где P – давление в адронном резонансном газе, состоящем из точечных частиц; v – объем приходящийся на одну частицу.

Для газа, состоящего из смеси частиц массой m_1, \dots, m_n , обладающих вырожденностью состояний g_1, \dots, g_n ,

$$P = T \sum_{i=1}^n g_i \varphi(m_i, T), \quad (4)$$

где функции $\varphi(m_i, T)$ определяются соотношением

$$\varphi(m_i, T) = \frac{m_i^2 T}{2\pi^2} K_2\left(\frac{m_i}{T}\right); \quad (5)$$

$K_2(x)$ – модифицированная функция Бесселя второго порядка.

Используя (3), найдем плотность энергии ε_v и плотность энтропии s_v системы с учетом исключенного объема

$$\varepsilon_v = T \frac{dP_v}{dT} - P_v = \frac{\varepsilon \exp\left[-\frac{P_v v}{T}\right]}{1 + \frac{P_v v}{T}}; \quad (6)$$

$$s_v = \frac{\varepsilon_v + P_v}{T} = \frac{s \exp\left[-\frac{P_v v}{T}\right] + \frac{P_v^2 v}{T^2}}{1 + \frac{P_v v}{T}}, \quad (7)$$

где ε – плотность энергии; s – плотность энтропии адронного резонансного газа, состоящего из точечных частиц,

$$\varepsilon = T^2 \sum_{i=1}^n g_i \frac{d\varphi(m_i, T)}{dT}; \quad (8)$$

$$s = \sum_{i=1}^n g_i \varphi(m_i, T) + T \sum_{i=1}^n g_i \frac{d\varphi(m_i, T)}{dT}. \quad (9)$$

Производная от функции $\varphi(m_i, T)$ определяется по формуле

$$\frac{d\varphi(m_i, T)}{dT} = \frac{m_i^2}{2\pi^2} \left[3K_2\left(\frac{m_i}{T}\right) + \frac{m_i}{T} K_1\left(\frac{m_i}{T}\right) \right], \quad (10)$$

где $K_1(x)$ – модифицированная функция Бесселя первого порядка.

Из уравнений (2), (6) найдем теплоемкость адронного резонансного газа с учетом исключенного объема:

$$C_V^v = C_V \frac{\varepsilon_v}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_v^2 v}{T^2} \left[1 + \frac{\varepsilon_v P}{\varepsilon P_v} \right], \quad (11)$$

где C_V – теплоемкость газа, состоящего из точечных частиц,

$$C_V = 3s + \frac{1}{T^2} \sum_{i=1}^n g_i m_i^2 \varphi(m_i, T). \quad (12)$$

Подставляя (7), (11) и (9), (12) в (1), найдем соотношения для скорости звука в адронном резонансном газе с учетом исключенного объема c_{sv} и для газа, состоящего из точечных частиц c_s :

$$\frac{1}{c_{sv}^2} = \frac{1}{c_s^2} \frac{s}{s_v} \frac{\varepsilon_v}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_v^2 v}{T^2 s_v} \left[1 + \frac{\varepsilon_v P}{\varepsilon P_v} \right]; \quad (13)$$

$$\frac{1}{c_s^2} = 3 + \frac{1}{T^2 s} \sum_{i=1}^n g_i m_i^2 \varphi(m_i, T). \quad (14)$$

Спектр адронов представляет практически непрерывный набор состояний. Для его характеристики используют спектр масс $\rho(m)$, так что $\rho(m)dm$ определяет число состояний адронов в интервале $[m, m + dm]$. Мы используем параметризацию для спектра масс адронов $\rho(m)$, которая хорошо описывает спектр мезонов в интервале $0 < m < 2$ ГэВ [7]:

$$\rho(m) = 3\delta(m - m_\pi) + C m^3 \theta(m - m_1) \theta(M - m), \quad (15)$$

где первое слагаемое учитывает три зарядовых состояния π -мезона массой $m_\pi = 0,14$ ГэВ; $C = 90$ ГэВ⁻⁴; θ -функции во втором слагаемом учитывают, что оно отлично от нуля в интервале $m_1 < m < M$, здесь $m_1 = 0,5$ ГэВ, $M = 2$ ГэВ.

Заменяя в формулах (4), (8), (9), (14) g_i на $\rho(m)dm$ и переходя от суммирования к интегрированию по массе, мы вычислили давление P , плотность энергии ε , плотность энтропии s

и скорость звука c_s для адронного резонансного газа, состоящего из точечных частиц при различных значениях температуры $0 < T < T_c$ (где T_c – критическое значение температуры). Затем эти значения мы использовали при решении трансцендентного уравнения (3) для нахождения давления P_v , плотности энергии ε_v (6), плотности энтропии (7) и скорости звука c_{sv} по формуле (13). В качестве оценки для параметра v мы используем соотношение

$$v = 4 \frac{4\pi}{3} r^3, \quad (16)$$

где r – радиус адрона. Из эксперимента известно, что $r \approx (0,3-0,8)$ фм. Это соответствует исключенному объему $v \approx (0,5-8)$ фм³. Величину r мы рассматриваем как параметр модели.

На рис. 1 приведена зависимость плотности энтропии от температуры. При больших значениях температуры плотность энтропии, вычисленная с учетом исключенного объема, уменьшается по сравнению с плотностью энтропии, определенной при $r = 0$. Подобные зависимости наблюдаются для давления и плотности энергии адронного резонансного газа [3].

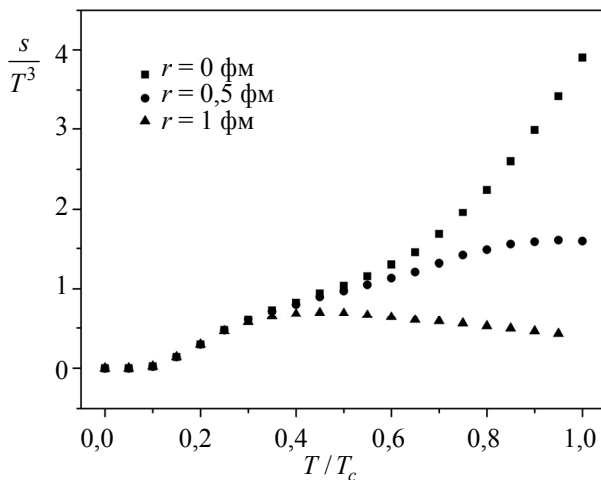


Рис. 1. Зависимость плотности энтропии от температуры при различных значениях параметра r

На рис. 2 показана зависимость c_{sv}^2 от температуры при различных значениях радиуса адронов.

Для газа, состоящего из точечных частиц ($r = 0$), скорость звука увеличивается с возрастанием температуры до $T \approx 0,4T_c$, а затем уменьшается, выходя на постоянное значение. При малых температурах нет различия в скорости звука, вычисленной с учетом исключенного объема и без него. При $T > 0,3T_c$ скорость звука, вычисленная с учетом размера частиц, увеличивается по сравнению со скоростью звука при $r = 0$. Различие между двумя вычислениями увеличивается с ростом температуры и зависит от радиуса адронов.

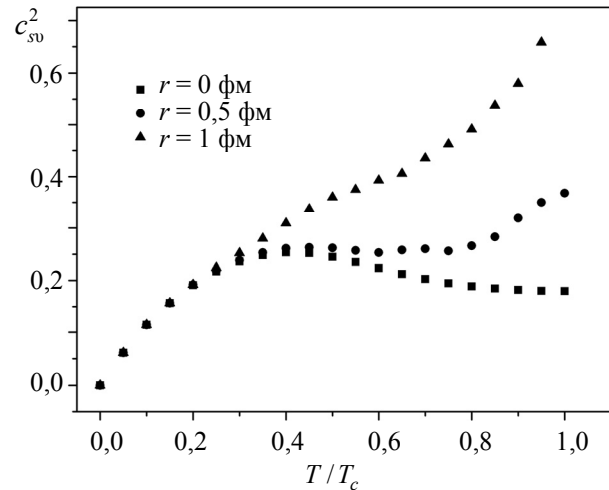


Рис. 2. Зависимость скорости звука от температуры при различных значениях параметра r

Заключение. Мы вычислили скорость звука в равновесном многокомпонентном адронном газе, принимая во внимание размеры частиц, и полученные результаты сравнили со скоростью звука в газе, состоящем из точечных частиц. Учет размера частиц необходим, чтобы правильно понимать основные качественные особенности сильных взаимодействий, например фазовый переход адронов в кварк-глюонную плазму. Кроме того, он может сильно модифицировать свойства адронного резонансного газа. При высоких температурах учет размера частиц приводит к существенному увеличению скорости звука в газе.

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. В 10 т. Т. V. Ч. 1: Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 583 с.
2. Hagedorn, R. Statistical thermodynamics of strong interactions at high-energies // Nuovo Cim. Suppl. 1965. Vol. 3. P. 147–186.
3. Клеицкий, Д. В. Влияние исключенного объема на уравнение состояния многокомпонентного адронного газа // Труды БГТУ. 2013. № 6 (162): Физ.-мат. науки и информатика. С. 48–50.
4. Gavaì R., Gupta S., Mukherjee S. A new method for computation of QCD thermodynamics: EOS, specific heat and speed of sound // Proceed. XXIII Int. Symp. on Lattice Field Theory, Ireland, 25–30 July 2005. Ireland, 2005. P. 173–177.
5. Huovinen P., Petreczky P. QCD equations of state and hadron resonance gas // Nucl. Phys. 2010. Vol. A837, No. 12. P. 26–53.
6. Клеицкий, Д. В. Скорость звука в равновесном адронном газе // Труды БГТУ. 2011. № 6 (144): Физ.-мат. науки и информатика. С. 50–53.
7. Burakovsky L., Horwitz L. P. On the thermodynamics of hot hadron matter // Nucl. Phys. 1997. Vol. A614, No. 3. P. 373–399.

Поступила 01.03.2014

УДК 531.19; 539.682

И. И. Наркевич, доктор физико-математических наук, профессор (БГТУ);
Е. В. Фарафонтова, кандидат физико-математических наук, ассистент (БГТУ);
В. Б. Клышко, студент (БГТУ)

ПОЛНАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДЛЯ РАСЧЕТА СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ СИСТЕМЫ С УЧЕТОМ НЕОДНОРОДНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ В МИКРОЯЧЕЙКАХ МЕТОДА УСЛОВНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

В рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода разработана методика расчета средней энергии взаимодействия выделенной молекулы среды со всеми остальными молекулами изучаемой молекулярной системы, которая предполагает выполнение аналитических расчетов для учета взаимодействия с молекулами на достаточно больших расстояниях и численных расчетов для ближайших соседей (первых и вторых). В результате составлена полная система интегральных и алгебраических уравнений, решение которой позволяет рассчитать свободную энергию молекулярной системы.

With the help of a two-level molecular-statistical approach, we have developed a methodology for calculating the average energy of interaction of the molecule of the environment with all other molecules of the molecular system. This procedure involves analytical calculations to account for the interaction with molecules at large distances and numerical calculations for the nearest neighbors (first and second). As a result, we have compiled a complete system of integral and algebraic equations. Its solution allows us to calculate the free energy of a molecular system.

Введение. Для расчета свободной энергии однородной молекулярной системы с помощью ранее полученного статистического выражения [1]

$$F = U - TS = \theta \frac{N}{n} (n \ln n + (1-n) \ln(1-n)) - N \frac{An}{2} + N \varepsilon_{\kappa} \quad (1)$$

нужно численным методом определить энерго-энтропийный параметр A , который в приближении бинарных корреляций имеет следующий вид [1]:

$$A = \frac{\theta}{n^2} \left[2n \ln Q - \sum_{i \neq j}^M (2n - n_{ij}^{aa}) \ln \left\langle e^{-\Phi_{ij}(\vec{q}_i)/\theta} \right\rangle_i^* \right] - \frac{\theta}{n^2} \left[\sum_{j \neq i}^M \sum_{\mu, \nu = a, \varepsilon} n_{ij}^{\mu\nu} \ln \left(\frac{n_{ij}^{\mu\nu}}{n_{\mu} n_{\nu}} \right) \right], \quad (2)$$

где $\theta = kT$ – приведенная температура; k – постоянная Больцмана; Q – величина, связанная с нормировочным множителем одночастичной функции распределения; M – число микроячеек, на которые разделен весь объем V системы из N молекул ($M = V/\omega$, ω – объем микроячеек); n_{μ} или n_{ν} – числа заполнения микроячеек частицами сорта μ или ν , т. е. концентрации молекул ($\mu, \nu = a, n_a = N/M = n$) и вакантных микроячеек ($\mu, \nu = \varepsilon, n_{\varepsilon} = (M - N)/M = 1 - n$); $n_{ij}^{\mu\nu}$ – двухъячеечные числа заполнения для пар микроячеек ($i, j = 1, 2, \dots, M$); $\Phi_{ij}(\vec{q}_i)$ – потенциал средних сил взаимодействия молекулы в микроячейке ω_i ($\vec{q}_i \subset \omega_i$) с молекулой, распределенной в микро-

ячейке ω_j ; угловыми скобками $\langle \dots \rangle_i^*$ обозначено статистическое усреднение по координатам молекулы в микроячейке ω_i , выполненное с помощью вспомогательной нормированной на единицу одночастичной функции $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_i)$.

Все величины, входящие в выражение (2), интегральным образом выражаются через потенциалы средних сил $\Phi_{ij}(\vec{q}_i)$ [2], которые находятся в результате численного решения системы интегральных уравнений вида:

$$\exp \left\{ -\frac{\Phi_m(\rho_i^m)}{\theta} \right\} = \frac{n_m^{aa}}{n} \int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{\Phi(r_{ij})}{\theta} \right\} \hat{F}_{11}^{*m}(\vec{q}_j) d\vec{q}_j + \frac{n_m^{a\varepsilon}}{n} \int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{\Phi_m(\rho_i^m)}{\theta} \right\} \hat{F}_{11}^{*m}(\vec{q}_i) d\vec{q}_i, \quad m = 1, 2. \quad (3)$$

При численном решении (3) и последующем расчете параметра A нужно рассчитывать среднюю энергию взаимодействия выделенной молекулы в микроячейке ω_i или ω_j с радиус-вектором \vec{q}_i или \vec{q}_j со всеми другими молекулами системы, статистически распределенными в остальных $M - 1$ микроячейках модифицированного (за счет вакантных микроячеек) метода условных распределений.

Основная часть. Потенциал межмолекулярного взаимодействия, например потенциал Леннарда-Джонса, достаточно короткодействующий, однако ранее проведенные расчеты [3] показывают, что для количественного описания

термодинамических свойств нужно учитывать взаимодействие с молекулами в микроячейках, центры которых принадлежат 10–16 координационным сферам гранцентрированной кубической решетки относительно центра микроячейки ω_i (или ω_j). Соответственно необходимо решать систему из 10–16 интегральных уравнений, содержащих трехмерные интегралы по объемам микроячеек, в которых достаточно неоднородно распределены молекулы, особенно в области кристаллического состояния с сильно локализованными унарной и бинарной функциями распределения. Поэтому необходимое количество компьютерного времени для численных расчетов оказывается достаточно большим, что затрудняет проведение теоретического изучения, например, фазовых переходов, когда приходится проводить расчеты свободной энергии в широкой области термодинамических параметров (температуры θ и объема V в случае однокомпонентных систем). Для сокращения объема численных расчетов была сделана попытка аналитического расчета энергии взаимодействия выделенной молекулы с молекулами, которые находятся на относительно больших расстояниях в микроячейках, принадлежащих третьей и всем остальным координационным сферам. Для этого внутри объема V системы выбирается сферическая область радиуса b с центром, совпадающим с центром выделенной микроячейки ω_i (или ω_j). Радиус b должен быть таким, чтобы центры микроячеек для двух первых координационных сфер ($m = 1, 2$) оказались внутри сферической полости. Взаимодействие молекулы в положении \vec{q}_i (или \vec{q}_j) с молекулами в микроячейках этих двух сфер учитываем в рамках метода коррелятивных функций с помощью двух потенциалов средних сил, а среднюю энергию взаимодействия с остальными молекулами рассчитываем приближенно с помощью принципа суперпозиции, предполагая, что молекулы за пределами сферической полости распределены равномерно по объему V^* , т. е. образуют сплошную однородную среду. Потенциал $\phi(x)$ поля этой среды рассчитан ранее и имеет следующий вид [1]:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \sum_{j=14}^M n_j \langle \Phi(\rho_j) \rangle = \frac{1}{V} \sum_{j=14}^M \omega \langle \Phi(\rho_j) \rangle = \\ &= \frac{4}{V} \int \left(\frac{1}{\rho^{12}} - \frac{1}{\rho^6} \right) dV^* = \frac{4}{V} (\phi_{12}^*(x) - \phi_6^*(x)), \quad (4) \end{aligned}$$

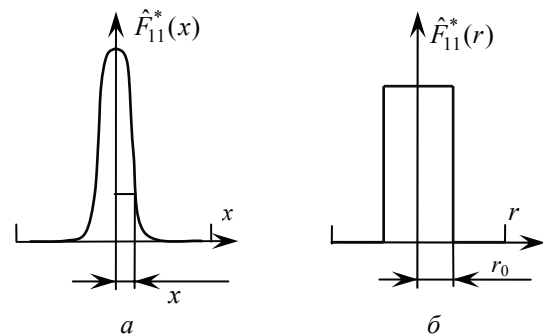
где

$$\phi_{12}^*(x) = \frac{\pi}{5} \left(\frac{2b(b^2 + x^2)(b^4 + 6b^2x^2 + x^4)}{(b-x)^8(b+x)^8} + \right.$$

$$\left. + \frac{(b-x)^9 + (b+x)^9}{9(b-x)^9(b+x)^9} \right);$$

$$\phi_6^*(x) = \pi b \left(\frac{1}{(b-x)^2(b+x)^2} + \frac{b^2 + 3x^2}{3(b+x)^3(b-x)^3} \right).$$

Попытка реализации этой методики показала, что результаты расчетов достаточно сильно зависят от значения радиуса b . В связи с этим возникла проблема оптимизации выбора величины радиуса b , которую в данной работе предполагается решать следующим образом. Для уменьшения вклада сплошной однородной среды в общую энергию выделенной молекулы в микроячейке ω_i (или ω_j) аналитически рассчитаем среднюю энергию взаимодействия молекулы в положении \vec{q}_i (или \vec{q}_j) с молекулами, распределенными в микроячейках с центрами, принадлежащими, например, третьей ($m = 3$) и четвертой ($m = 4$) координационным сферам. В результате радиус b автоматически увеличивается и, соответственно, уменьшается вклад окружающей однородной среды (в объеме V^* за пределами сферической полости радиуса b) в энергию выделенной молекулы. Тем самым будет создана промежуточная (буферная) область среды, вклад которой в энергию будем рассчитывать аналитически. Для этого учтем, что на расстояниях, соответствующих третьей и четвертой координационным сферам (относительно микроячейки ω_i), вспомогательная унарная функция $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_k)$ распределения молекулы в микроячейках ω_k , принадлежащих этим координационным сферам ($m = 3, 4$), фактически совпадает с унарной функцией распределения $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_k)$. Поэтому среднеквадратичные отклонения $r_{\text{кв}}$ для этих функций можно в численных расчетах приравнять ($r_{\text{кв}} = r_{\text{кв}}^*$). Будем считать, что унарная функция распределения \hat{F}_{11}^* , которая сильно локализована в кристаллическом состоянии, имеет сферическую симметрию (рисунок, а).



Унарная функция распределения:
а – с неоднородным распределением;
б – с однородным распределением

Далее предположим, что она имеет одинаковые значения внутри сферы радиуса r_0 , а за ее пределами значения \hat{F}_{11}^* равны нулю (рисунк, б). Вычислим среднеквадратичное отклонение для такой ступенчатой функции распределения. Из условия нормировки следует, что

$$\int_{\omega} \hat{F}_{11}^*(r) d\omega = 1; \quad d\omega = 4\pi r^2 dr.$$

Тогда внутри сферы радиуса r_0 функция $\hat{F}_{11}^*(r) = 1/(4/3\pi r_0^3) = \text{const}$, а среднеквадратичное отклонение рассчитывается аналитически:

$$r_{\text{кв}}^{*2} = \int_{\omega} \hat{F}_{11}^*(r) r^2 d\omega = \frac{3}{4\pi r_0^3} 4\pi \frac{r_0^5}{5} = \frac{3}{5} r_0^2 \Rightarrow r_{\text{кв}}^* = \sqrt{3/5} r_0. \quad (5)$$

Рассчитаем среднее значение потенциала Леннард-Джонса $\Phi(r)$, записанного в безразмерном виде (расстояние – в единицах σ ($r^* = r/\sigma$), а энергия – в единицах ε ($\Phi^* = \Phi/\varepsilon$), где σ и ε – линейный и энергетический параметры потенциала):

$$\Phi^*(r^*) = 4 \left(\frac{1}{r^{*12}} - \frac{1}{r^{*6}} \right). \quad (6)$$

Выполним в сферической системе координат (x, θ, φ) усреднение $\Phi^*(r^*)$ по объему шара радиуса r_0 внутри микроячейки объемом ω_j :

$$\bar{\varphi}(\rho) = \int_0^{r_0} \int_0^{\pi} \Phi^*(r^*) \hat{F}_{11}^*(x) 2\pi x^2 \sin \theta d\theta dx. \quad (7)$$

После вычисления интегралов получим

$$\bar{\varphi}(\rho) = 4 \left[\frac{1}{(\rho^2 - r_0^2)^6} + \frac{7,2r_0^2}{(\rho^2 - r_0^2)^7} + \frac{14,4r_0^4}{(\rho^2 - r_0^2)^8} + \frac{8,53r_0^6}{(\rho^2 - r_0^2)^9} - \frac{1}{(\rho^2 - r_0^2)^3} \right], \quad (8)$$

где ρ – расстояние от выделенной молекулы до центра какой-либо микроячейки.

Это выражение будем использовать для средних потенциалов $\bar{\varphi}_m(\rho)$ микроячеек, центры которых принадлежат третьей ($m = 3$, $\bar{\varphi}_3(\rho)$) и четвертой ($m = 4$, $\bar{\varphi}_4(\rho)$) координационным сферам. В результате средняя энергия выделенной молекулы в положении \bar{q}_i в микроячейке ω_i будет определяться по формуле

$$\varphi(\bar{q}_i) = \sum_{k=m-1}^{N_1} \varphi_1(\rho_k) + \sum_{k=m-2}^{N_2} \varphi_2(\rho_k) + \sum_{k=m-3}^{N_3} \bar{\varphi}_3(\rho_k) + \sum_{k=m-4}^{N_4} \bar{\varphi}_4(\rho_k) + \varphi(x). \quad (9)$$

Для решения полной системы уравнений (1)–(3) с учетом (4), (8), (9) предполагается использовать итерационный метод решения интегральных уравнений (3) в следующей последовательности. Вначале задается пробное значение среднеквадратичного отклонения $r_{\text{кв}}$ молекулы от центра ячейки и пробные зависимости для потенциалов средних сил $\varphi_1(\rho)$ и $\varphi_2(\rho)$, которые зависят только от расстояния до центров соответствующих микроячеек объемом ω_j , принадлежащих координационным сферам ($m = 1, 2$). Далее определяются радиусы r_0 (формула (5)) и $b = \sqrt{5}R - r_{\text{кв}}$ ($R_5 = \sqrt{5}R$ – радиус пятой координационной сферы, R – радиус первой координационной сферы, т.е. параметр гранецентрированной кубической решетки).

С помощью заданных величин рассчитываются интегралы в правых частях интегральных уравнений (3). В результате выполнения первой итерации ($i = 1$) находятся новые зависимости потенциалов средних сил для первых ($m = 1$) и вторых ($m = 2$) координационных сфер. С их помощью находятся новые значения среднеквадратичного отклонения $r_{\text{кв}}$, а также радиусов r_0 и b , которые используются при реализации второй итерации ($i = 2$). Этот процесс продолжается до тех пор, пока относительная погрешность двух последовательных решений интегральных уравнений для потенциалов $\varphi_1(\rho)$ и $\varphi_2(\rho)$ не станет равной или меньше заданной точности ε (используем $\varepsilon \sim 10^{-3}$).

После окончания итерационного процесса рассчитываются энергоэнтروпийный параметр A и свободная энергия F как функции термодинамических параметров θ, ν и концентрации вакансий c ($c = 1 - n$). Равновесное значение концентрации c (а значит и n) находится из условия минимума свободной энергии системы в равновесном состоянии.

Заключение. В результате составлена полная система интегральных и алгебраических уравнений, решение которой позволяет рассчитать свободную энергию молекулярной системы.

Литература

1. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В. Единая статистическая модель кристаллического, жидкого и газообразного состояний вещества // Известия НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. 2011. № 3. С. 71–79.
2. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Щекин А. К. Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов: материалы Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 17–18 мая 2012 г. / Белорус. гос. технол. ун-т. Минск, 2012. С. 320–326.
3. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. СПб., 1993. 242 л.

Поступила 03.03.2014

УДК 535.37+541.65+543.4

Д. В. Клеицкий, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);
Н. Н. Крук, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой (БГТУ)

АНАЛИЗ НЕПЛОСКОСТНЫХ ИСКАЖЕНИЙ МАКРОЦИКЛА СВОБОДНОГО ОСНОВАНИЯ КОРРОЛА

Выполнен анализ характера неплоскостных искажений двух NH-таутомеров свободного основания коррола. Найдены среднеквадратичные отклонения атомов тетрапиррольного макроцикла от средней плоскости макроцикла, которая определена как плоскость с минимальными среднеквадратичными отклонениями атомов C1, C4, C5, C6, C9, C16 и C19. Показано, что оба NH-таутомера характеризуются неплоскостными искажениями волнообразного типа, однако амплитуда отклонений для них существенно различается. Из-за наличия стерических препятствий в ядре тетрапиррольного макроцикла пиррольные и пирролениновые кольца наклонены относительно средней плоскости макроцикла, а для пиррольных атомов азота выражена тенденция к пирамидализации.

The analysis of the nonplanar distortions for two NH tautomers of the corrole free base has been carried out. The least-square deviations from the macrocycle mean plane for the tetrapyrrolic macrocycle atoms have been determined. The mean macrocycle plane is assigned as a plane with the smallest least-square deviations of C1, C4, C5, C6, C9, C16, and C19 atoms. Both NH tautomers have nonplanar distortions of the wave-type, but the magnitude of the deviations was found to be substantially different. Both pyrrolic and pyrrolic rings are tilted relatively to the mean macrocycle plane due to the steric hindrances in the tetrapyrrolic macrocycle core, and the tendency to the pyramidalization been revealed for the pyrrolic nitrogens.

Введение. Корролы представляют собой класс тетрапиррольных соединений с сокращенным макроциклом, в котором два пиррольных фрагмента соединены C_a-C_a связью, что обусловлено отсутствием одного из атомов углерода в *мезо*-положении. Отсутствие одного C_m атома углерода приводит к изменению контура π -сопряжения и характера альтернирования связей в макроцикле. Поэтому корролы отличаются от порфиринов наличием трех протонов в ядре тетрапиррольного макроцикла вместо двух и снижением молекулярной симметрии. Именно наличие трех протонов обуславливает существенные различия в механизме и скоростях NH-таутомеризации корролов. Пониженная симметрия корролов (не выше C_s) по сравнению с порфиринами (D_{2h}) подразумевает, что два таутомера различаются геометрией и электронной структурой. Это открывает возможности для регистрации NH-таутомерных форм для любого производного корролов, независимо от периферического замещения, даже в жидких растворах при комнатных температурах, в отличие от порфиринов, где NH-таутомеры симметрично замещенных производных структурно и спектрально неразличимы. Таким образом, любое изменение равновесия между двумя NH-таутомерами коррола может оказать влияние на форму спектра поглощения в основном состоянии, спектров люминесценции, а также на спектральные и фотофизические свойства, зависящие от физико-химических свойств раствора в целом.

Исследование корролов получило новый импульс в последнее десятилетие в силу развития эффективных методов синтеза *мезо*-триарил-корролов. Современные материалы, основанные на использовании особенностей фотофизических и физико-химических свойств корролов, интенсивно исследуются с целью использования при разработке новых оптических сенсоров и оптоэлектронных устройств.

Недавно были разработаны протоколы эффективного синтеза *мезо*-замещенных корролов NH-таутомеров трех семейств (AB_2 -, A_2B - и A_3 -корролы), в которых в качестве функционально-активного фрагмента А использованы различные арильные заместители. Литературные данные указывают на то, что в жидких растворах при комнатной температуре корролы действительно сосуществуют в виде двух NH-таутомеров, которые отличаются электронными спектрами поглощения [1–4], спектрами флуоресценции [2–3], основностью и кислотностью макроциклического ядра [1, 3–4]. Было показано, что соотношение двух NH-таутомеров изменяется при варьировании температуры и изотопном H–D-замещении макроциклических протонов [1–2]. Показано, что в возбужденном синглетном S_1 -состоянии имеет место NH-таутомеризация, что приводит к переключению канала излучательной дезактивации энергии электронного возбуждения при изменении температуры: при высоких температурах (>270 K) доминирует люминесценция длинноволнового T1, а при низких температурах (<100 K) – коротковолнового

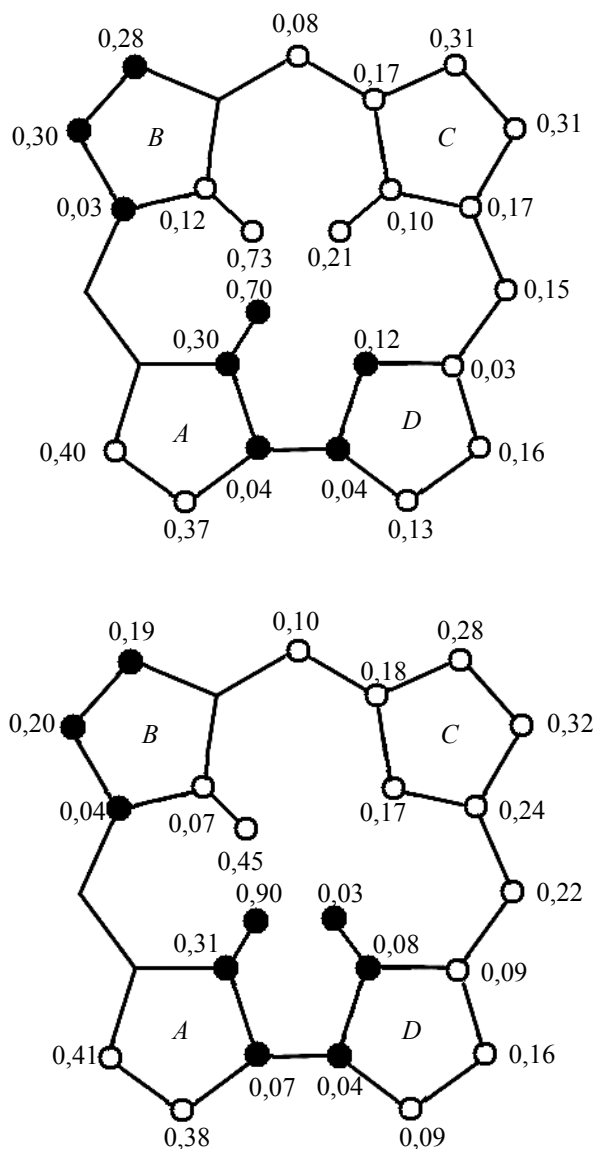
T_2 таутомера [2]. На основании четырехорбитальной модели Гоутермана и квантово-химических расчетов сделано однозначное отнесение электронных спектров поглощения к молекулярным структурам с определенным расположением протонов [4]. Фотофизические характеристики корролов могут быть адекватно описаны с учетом явления внутреннего тяжелого атома [5].

Цель данной работы заключается в выяснении особенностей молекулярной структуры двух NH-таутомеров коррола на основании анализа данных квантово-химических расчетов, опубликованных нами недавно в [4].

Основная часть. Как было отмечено ранее [4], результаты анализа неплоскостных искажений макроцикла коррола будут зависеть от выбора средней плоскости макроцикла. По нашему мнению, все предыдущие подходы к определению средней плоскости имеют существенные ограничения. С одной стороны, они не учитывают свойственную макроциклу коррола асимметрию, а с другой – они не учитывают явление NH-таутомеризации. Благодаря асимметрии выбор средней плоскости макроцикла у коррола затруднен, так как не все атомы эквивалентны по их значению для определения средней плоскости. Из всех предлагавшихся вариантов плоскость 11С, включающая три S_m атома и восемь S_a атомов, является наилучшим приближением, но она также не учитывает асимметрию макроцикла. Представляется логичным, что 7 атомов углерода C1, C4, C5, C6, C9, C16, C19 остаются в той же плоскости для двух NH-таутомеров, в то время как два S_a атома пиррольного кольца C (C11 и C14) и два соседних S_m атома метиновых мостиков (C10 и C15) существенно отклоняются от плоскости 7С, причем амплитуда данных отклонений различна для двух NH-таутомеров. Поскольку средняя плоскость макроцикла должна оставаться инвариантной при NH-таутомеризации, плоскость 7С, определяемая как плоскость с минимальными среднеквадратичными отклонениями атомов C1, C4, C5, C6, C9, C16 и C19, оказывается удобнее для использования, чем плоскость 11С. Это требование обусловлено тем, что равновесная молекулярная структура должна оставаться неизменной при быстрой NH-таутомеризации, чтобы анализ геометрических параметров выполнялся в одном и том же базисе.

Различия в ориентации непротонированного пиррольного кольца (т. е. пирроленинового кольца) у таутомеров T_1 (пиррол D) и T_2 (пиррол C) были предложены нами ранее для объяснения различной основности двух NH-таутомеров [4]. Хорошо известно, что формирование

неплоских конформеров у порфиринов, которое сопровождается экспонированием атомов азота пирролениновых колец в растворитель, приводит к заметному росту основности [6, 7].



Среднеквадратичные отклонения (в ангстремах) атомов тетрапиррольного макроцикла NH-таутомеров коррола:

T_1 – вверху; T_2 – внизу. Темные и светлые круги обозначают положение атомов соответственно под и над средней плоскостью макроцикла

Рассчитанные различия в геометрии NH-таутомеров (рисунок) согласуются с нашими экспериментальными результатами, показывающими, что более высокая основность должна быть приписана таутомеру с наибольшим углом наклона пирроленинового кольца. Как следует из данных, приведенных на рисунке, угол наклона непротонированного кольца относительно средней плоскости макроцикла существенно больший для таутомера T_1 : атом азота

пиррола D расположен на $0,12 \text{ \AA}$ ниже, а атомы C_b – на $0,13\text{--}0,16 \text{ \AA}$ выше средней плоскости макроцикла. Напротив, у таутомера $T2$ атом азота пиррола C и атомы C_b расположены на $0,17$ и $0,28\text{--}0,32 \text{ \AA}$ выше средней плоскости макроцикла. В результате угол наклона пиррола C оказывается почти в два раза меньше, поэтому таутомеру $T2$ должна быть приписана меньшая основность. Следует отметить, что совокупность отклонений пиррольных колец от средней плоскости макроцикла приводит к формированию волнообразной структуры молекулы свободного основания коррола.

Нами была обнаружена еще одна характерная черта молекулярной конформации NH-таутомеров коррола, которая заключается в существенном отклонении NH-протонов от плоскости пиррольных колец [4]. Эти отклонения обуславливают пирамидизацию пиррольных азотов, т. е. подразумевается, что гибридизация атомов азота пиррольных колец приобретает частичный sp^3 -характер. Грубая оценка состояния гибридизации $sp^{3/2}$ может быть сделана с помощью выражения $1 + \lambda^2 \cos \theta = 0$, где θ – усредненная величина угла одной C–N–C и двух H–N–C связей, принимая во внимание, что все три угла ($C_a\text{--}N\text{--}C'_a$, $C_a\text{--}N\text{--}H$ и $C'_a\text{--}N\text{--}H$), строго говоря, различны. Максимальная пирамидизация $\lambda^2 = 2,19$ обнаружена для пиррола B в таутомере $T1$. Следует отметить, что величина λ^2 для пирролов A и C в таутомере $T1$ почти не отличается от значения 2, т. е. они имеют практически плоское строение. У таутомера $T2$ величины пирамидизации λ^2 оказались меньше для всех пиррольных колец, но при этом все они заметно отличаются от величины $\lambda^2 = 2$. Согласно экспериментальным данным, именно таутомер $T2$ является наиболее кислотным [3]. Сопоставление этих фактов позволяет сделать вывод о том, что при депротонировании ядра тетрапиррольного макроцикла протон может отрываться от любого из трех пиррольных колец, что существенно повышает кислотность макроцикла в целом, хотя кислотность каждого из пиррольных колец в отдельности уступает таковой величине для пиррола B в таутомере $T1$. Более низкая кислотность таутомера $T1$ обусловлена тем, что суммарная вероятность дис-

социации протона для одного пиррола с сильно выраженной пирамидизацией и двух практически плоских пирролов оказывается ниже.

Заключение. Рассчитана средняя плоскость макроцикла коррола $7C$, определяемая как плоскость с минимальными среднеквадратичными отклонениями атомов $C1$, $C4$, $C5$, $C6$, $C9$, $C16$ и $C19$. Найдены величины среднеквадратичных отклонений атомов тетрапиррольного макроцикла двух NH-таутомеров относительно средней плоскости макроцикла. Показано, что молекулярная конформация существенно отличается для двух NH-таутомеров. Обсуждена взаимосвязь структурных параметров макроцикла NH-таутомеров коррола и их кислотно-основных свойств.

Литература

1. Corrole NH Tautomers: Spectral Features and Individual Protonation / Yu. B. Ivanova [et al.] // Journal of Physical Chemistry, A. 2012. Vol. 116, No. 44. P. 10683–10694.
2. Unraveling the Fluorescence Features of Individual Corrole NH Tautomers / M. M. Kruk [et al.] // Journal of Physical Chemistry, A. 2012. Vol. 116, No. 44. P. 10695–10703.
3. Solvent-Dependent Deprotonation of meso-Pyrimidinylcorroles: Absorption and Fluorescence Studies / M. M. Kruk [et al.] // Journal of Physical Chemistry, A. 2012. Vol. 116, No. 44. P. 10704–10711.
4. Molecular Structures and Absorption Spectra Assignment of Corrole NH tautomers / W. Beenzen [et al.] // Journal of Physical Chemistry, A. 2014. Vol. 118, No. 3. P. 862–871.
5. Luminescence of meso-pyrimidinylcorroles: relationship with substitution pattern and heavy atom effects / F. Nastasi [et al.] // Photochem. Photobiol. Sci. 2011. Vol. 10. P. 143–150.
6. Senge M. O. Exercises in Molecular Gymnastics – Bending, Stretching and Twisting Porphyrins // Chem. Commun. 2006. Vol. 2. P. 243–256.
7. Correlation of Photophysical Parameters with Macrocycle Distortion in Porphyrins with Graded Degree of Saddle Distortion / B. Röder [et al.] // Photochem. Photobiol. Sci. 2010. Vol. 9. P. 1152–1158.

Поступила 01.03.2014

УДК 535.34

Т. А. Корниенко, студентка (БГУ);**Ю. И. Миксюк**, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);**К. А. Саечников**, кандидат физико-математических наук, доцент (БГПУ)**РАСПРОСТРАНЕНИЕ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ
В ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ КРИСТАЛЛАХ ТИТАНАТА ВИСМУТА**

Экспериментально исследованы процессы самофокусировки гауссовых световых полей и образования экранирующих солитоноподобных структур в фоторефрактивном кристалле $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (ВТО) сечения $[111]$, $[11-2]$, $[1-10]$. Продемонстрирован основной сценарий преобразования поперечного профиля пучка и определена необходимая экспозиция для формирования устойчивой структуры пучка. Представлен пример и подобраны оптимальные параметры для некогерентного взаимодействия двух гауссовых световых пучков при ортогональной геометрии распространения в кубическом фоторефрактивном кристалле, помещенном во внешнее электрическое поле.

The self-focusing processes of Gaussian light fields and the formation processes of screening soliton-like structures have been researched in photorefractive crystals $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (ВТО) with section $[111]$, $[11-2]$, $[1-10]$ experimentally. The basic scenario of transformation transverse beam profile has been demonstrated and the necessary exposure for forming sustainable beam structure has been determined. The optimal settings for non-coherent interaction of two Gaussian light beams with orthogonal propagation geometry have been selected for cubic photorefractive crystals placed in external electric field.

Введение. Интерес, проявляемый в последнее время к пространственным фоторефрактивным солитонам, обусловлен весьма низкой мощностью, требуемой для их реализации (порядка несколько десятков нановатт), а также возможностью использования солитонов для формирования управляемых волноводных структур в фоторефрактивных кристаллах [1, 2]. При этом существует возможность динамического изменения созданного волновода путем варьирования таких параметров, как приложенное к кристаллу напряжение или интенсивность дополнительной фоновой засветки.

Фоторефрактивные кристаллы семейства силленитов (силикат и титанат висмута) характеризуются хорошей светочувствительностью и высокой подвижностью носителей заряда, что позволяет достичь малых времен нелинейного отклика при низких интенсивностях лазерного излучения. При этом используемые в работе кристаллы титаната висмута $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (ВТО) выгодно отличаются невысокой оптической активностью по сравнению с другими кристаллами семейства силленитов. Теоретический анализ показал, что для определенных сечений кристалла условия образования солитона в присутствии эффекта вращения плоскости поляризации облегчаются в сравнении со средой без оптической активности [3]. Интерес к исследованию распространения световых пучков в фоторефрактивных кристаллах вызван все более расширяющейся областью их применения и переходом к разнообразным структурам светового поля, включая пространственные солитоны и сингулярные пучки.

Целью настоящей работы является исследование особенностей преобразования пространственной структуры гауссовых световых полей в процессе их распространения в среде с фоторефрактивной нелинейностью.

Основная часть. Анализ распространения световых пучков в нелинейных средах связан с выяснением устойчивости их пространственной структуры. Особый интерес представляют условия, при которых происходит самофокусировка пучка и формирование солитонов. При выполнении эксперимента в первую очередь была отработана методика исследования преобразования световых пучков с характерными размерами на уровне нескольких десятков микрон при их распространении в электрооптическом кристалле в условиях появления фоторефрактивного механизма нелинейного взаимодействия.

Используемый кристалл имеет размеры $2,6 \times 6,5 \times 10,3$ мм, соответствующие кристаллографическим направлениям $[111]$, $[11-2]$ и $[1-10]$. Световой пучок распространялся вдоль направления $[1-10]$ с поляризацией, параллельной направлению $[111]$. Для получения достаточно заметного фоторефрактивного эффекта из-за малости значений электрооптических коэффициентов кристалл ВТО был включен в электрическую схему, в которой к нему прикладывалось напряжение 14 кВ/см. Для этого на кристалл были нанесены электроды перпендикулярно оси $[111]$, посредством которых в кристалле создавалось электрическое поле в направлении $[111]$.

При этом поляризация светового пучка совпадала с направлением электрического поля.

Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1. В качестве источника излучения использовали гелий-неоновый лазер 1, работающий в непрерывном режиме с длиной волны 633 нм. Интенсивность и поляризацию пучка регулировали с помощью системы светофильтров 2 и двух поляризаторов 3. Световой пучок фокусировался на переднюю грань кристалла собирающей линзой 4. Увеличенное с помощью линз 5 и 6 в два раза изображение переносилось с задней грани кристалла на ПЗС-матрицу (разрешение 9 мкм/пиксель). Из-за высокой фоточувствительности кристалла оптическая система из кристалла и линз помещалась в светозащищающий кожух.

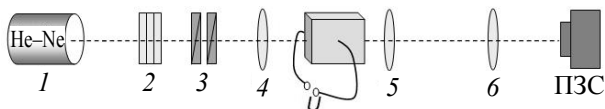


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для наблюдения солитоноподобных структур

Диаметр исследуемого пучка в перетяжке после входной линзы 4 составил 45–50 мкм.

На первом этапе работы были определены пространственно-временные характеристики распространения гауссового светового пучка в кристалле ВТО. Для этого использовались пучки с мощностями от 1 до 110 мкВт. Диаметр пучка на передней грани кристалла составлял 45 мкм.

Типичная динамика распространения гауссового светового пучка при небольшой мощности лазерного излучения представлена на рис. 2. Из рисунка видно, что при включении внешнего электрического поля интенсивность пучка начинает возрастать, происходит его небольшое сжатие в направлении поля, возникает самофокусировка исходного пучка и формирование солитоноподобной структуры. Структура может оставаться стабильной в течение часа.

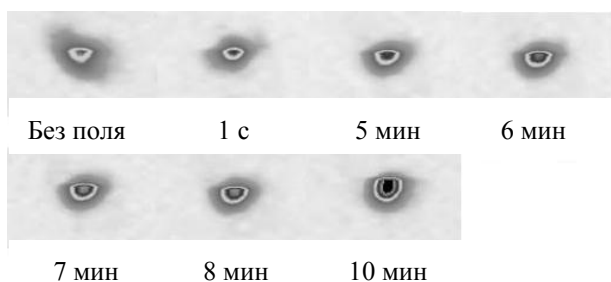


Рис. 2. Динамика распространения гауссового светового пучка в кристалле титаната висмута при мощности излучения 10 мкВт

При снятии внешнего электрического поля с кристалла канал самофокусировки сохраняется (рис. 3). Световой пучок можно перекрыть, а через некоторое время опять направить на кристалл, при этом поперечные и продольные размеры пучка остаются неизменными после включения источника излучения в течение длительного промежутка времени.

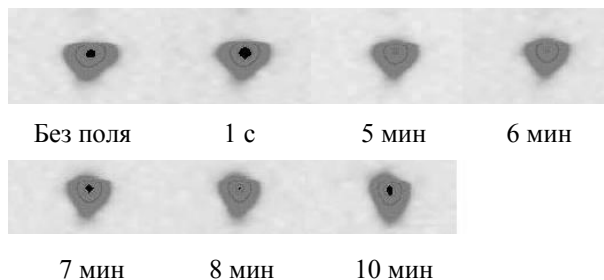


Рис. 3. Динамика пространственного профиля гауссового светового пучка при мощности излучения 10 мкВт после снятия напряжения

При более высоких мощностях излучения (порядка 100 мкВт) характер динамики распространения гауссового пучка в фоторефрактивном кристалле усложняется. При включении внешнего электрического поля происходит самофокусировка гауссового пучка за время порядка десятка секунд, при этом структура светового поля остается стабильной на протяжении нескольких минут. Однако после снятия внешнего напряжения с кристалла канал самофокусировки не сохраняется. Вместо описанных ранее процессов самофокусировки происходит полная дефокусировка с последующей релаксацией и восстановлением пучка до первоначальных размеров и интенсивности в течение нескольких десятков минут.

Из проведенных исследований динамики формирования солитоноподобных структур в кристалле титаната висмута установлена зависимость времени формирования устойчивой структуры от мощности излучения, падающего на кристалл. Необходимая экспозиция для гауссовых световых пучков составила 3,6 мДж. На рис. 4 представлена зависимость времени образования солитоноподобной структуры от мощности лазерного излучения.

На втором этапе работы была реализована схема поперечного зондирования для измерения светоиндуцированного изменения показателя преломления фоторефрактивного кристалла. Для этого в кристалл вдоль направления [11-2] посылалась дополнительная засветка от твердотельного Nd³⁺:YAG, работающего в непрерывном режиме на длине волны 532 нм (пучок накачки). Мощность такого пучка составляла 5–10 мВт. При этом световой пучок на

длине волны 633 нм (рис. 1) выполнял роль зондирующего пучка, и его мощность по сравнению с пучком накачки ослаблялась до 1 мкВт. Также из схемы регистрации (рис. 1) были убраны линзы 5 и 6, для того чтобы была возможность наблюдать отклонение зондирующего пучка в дальней зоне на ПЗС-матрице.

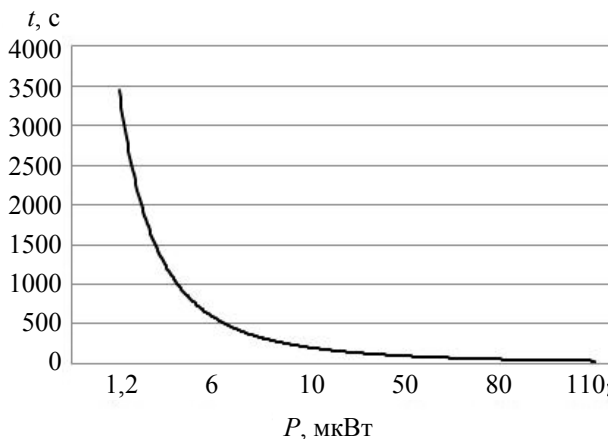


Рис. 4. Время образования солитоноподобной структуры в кристалле титаната висмута в зависимости от мощности светового пучка

Для выбранных интенсивностей световых пучков оптимальными для наблюдения эффекта взаимодействия являются следующие диаметры зондирующего пучка и пучка накачки: 100 и 350 мкм соответственно.

Зондирующий луч проходил перпендикулярно к лучу накачки на расстоянии D от его центра и отклонялся на созданной накачкой оптической неоднородности на угол φ . Знак угла отклонения зондирующего луча зависит от взаимных ориентаций поляризаций лучей и полярности прикладываемого электрического поля к образцу. Положительное значение угла (отклонение от центра пучка накачки) отвечает уменьшению показателя преломления под действием пучка накачки (дефокусирующая нелинейность). Отрицательное значение угла (отклонение к центру пучка накачки) означает

увеличение показателя преломления (фокусирующий тип нелинейности).

Максимальный эффект отклонения зондирующего пучка наблюдался при поляризации, совпадающей с направлением внешнего поля, приложенного к кристаллу. Из полученных экспериментальных данных можно оценить угол отклонения зондирующего луча:

$$\varphi = \Delta x / L = 400 \text{ мкм} / 1 \text{ м} = 0,4 \text{ мрад},$$

где Δx – величина отклонения луча в дальней зоне (на CCD-камере); L – расстояние до CCD-камеры. Тогда величина изменения показателя преломления, наведенного пучком накачки, составляет $\Delta n = 4 \cdot 10^{-4}$.

Заключение. Таким образом, проведенные экспериментальные исследования позволили определить общий сценарий распространения гауссовых световых пучков в фоторефрактивном кристалле титаната висмута. Время формирования стабильной солитонной структуры экспоненциально уменьшается с увеличением мощности светового пучка. На эффекте некогерентного взаимодействия двух гауссовых пучков продемонстрирован способ определения величины локализованной индуцированной оптической неоднородности в фоторефрактивном кристалле.

Результаты работы получены при выполнении государственной программы научных исследований «Электроника и фотоника», задание 2.2.09 (2011–2013).

Литература

1. Shih M., Segev M., Salamo G. Incoherent collisions between two-dimensional bright steady-state photorefractive spatial screening solitons // Opt. Lett. 1996. Vol. 21. P. 931–934.
2. Petter J., Denz C. Guiding and dividing waves with photorefractive solitons // Opt. Comm. 2001. Vol. 188. P. 55–61.
3. Two-beam coupling on the reflection grating in a $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ crystal / E. Yu. Ageev [et al.] // Quantum Electron. 2001. Vol. 31. P. 343–345.

Поступила 31.03.2014

УДК 621.391

В. И. Никитенок, кандидат технических наук, доцент (БГУ);**С. С. Ветохин**, кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой (БГТУ)**СВЕРХБЫСТРЫЙ НЕПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ ДВУХКАНАЛЬНЫЙ
ОБНАРУЖИТЕЛЬ СЛАБЫХ ОПТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ**

Рассматривается непараметрический двухканальный обнаружитель слабых оптических сигналов, основанный на тесте Вальда – Вольфовица, и его показатели качества. Обнаружитель обеспечивает постоянство условной вероятности ложной тревоги к изменениям интенсивности помех. Обосновано принятие решения об обнаружении на минимальном интервале времени, когда один из простейших пуассоновских потоков еще продолжается (отсюда термин «сверхбыстрый»). Представлена структурная схема обнаружителя.

The operation and quality indicators of a double channel nonparametric detector of weak optical signals, which is based on Wald – Wolfowitz runs test, is described. The detector provides a constant error probability under changing background intensity. The ability of decision making on signal detection within a minimized time interval is proved under still continuing simple Poisson sequences (that means just "superfast"). The structural scheme of the detector is shown.

Введение. Статистические характеристики оптических полей отличаются большим разнообразием. В то же время для решения задач в заданной обстановке достаточно использования соответствующей частной модели лазерного сигнала [1]. Для слабых оптических сигналов в следующих случаях приема допустима пуассоновская модель: общего случая для слабого оптического поля, теплового излучения, излучения одномодового лазера, отраженного лазерного излучения, отраженного лазерного излучения совместно с пуассоновским шумом.

Основная часть. В квантово-оптических средствах находят применение обнаружители предельно слабых сигналов, основанные на методе счета отдельных фотонов [2]. Метод реализуется с использованием фотоэлектронных умножителей, диссекторов и лавинных фотодиодов. Статистика фотоэлектронов повторяет при этом статистику фотонов в плоскости чувствительного слоя фотоприемника, и квантовый характер оптического сигнала проявляется в случайном количестве фотоэлектронов и в случайных моментах их появления. При этом слабый оптический сигнал на выходе детектора – это последовательность флуктуирующих по амплитуде «одноэлектронных» импульсов [2].

Оптимальное устройство обнаружения слабых оптических сигналов [3] содержит счетчик импульсов пуассоновской последовательности и пороговое устройство. Существенным недостатком его является отсутствие устойчивости условной вероятности ложной тревоги к изменениям интенсивности помех. Непараметрические обнаружители эту устойчивость обеспечивают, но предлагают сложные в реализации алгоритмы, включающие операции запоминания и упорядочения (формирования общего вариационного ряда) обрабатываемых данных [4].

Так, для формирования общего вариационного ряда при обработке двух стационарных пуассоновских потоков Π_1 и Π_2 с интенсивностями λ_1 и λ_2 требуются выборки первого и второго потоков, каждая из m импульсов; при этом измеряют величины интервалов между соседними импульсами в каждом потоке и получают составную выборку из этих элементов с экспоненциальными распределениями с параметрами λ_1 и λ_2 [5].

В рассматриваемом случае для формирования общего вариационного ряда выборки общего объема $2m$ запоминают, а затем упорядочивают по величине. Недостаток процедур очевиден – необходимость запоминания всей выборки, что исключает формирование общего вариационного ряда в реальном масштабе времени. Поэтому реализацию непараметрических тестов, основанных на использовании общего вариационного ряда, в реальном времени часто считают невозможной [4]. Однако для простейших пуассоновских потоков указанное обнаружение реализуемо в реальном времени (быстрое обнаружение) [6], так как при этом можно исключить операции запоминания и упорядочения обрабатываемых данных с сохранением высоких показателей качества.

Рассмотрим возможность применения двухвыборочного непараметрического теста Вальда – Вольфовица.

В [6] рассмотрен быстрый непараметрический двухканальный обнаружитель слабых оптических сигналов (БНО), построенный на базе этого теста со статистикой

$$S = s_1 + s_2 \quad (1)$$

и порогом решения (тест серий односторонний)

$$c = m + 1 - \sqrt{\frac{m(m-1)}{2m-1}} \Phi^{-1}(1-F), \quad (2)$$

где s_i – число серий элементов i -й выборки в общем вариационном ряду; m – количество импульсов в каждом потоке (объем выборки); $\Phi^{-1}(x)$ – функция, обратная интегралу вероятности; F – задаваемая условная вероятность ложной тревоги.

Уравнение рабочей характеристики БНО при $m \geq 20$ имеет вид [6]

$$D = \Phi \frac{(2+g)(g\sqrt{2m} - \Phi^{-1}(1-F)(2+g))}{2\sqrt{2(1+g)(1+(1+g)^2)}}, \quad (3)$$

где D – условная вероятность правильного обнаружения; g – отношение интенсивностей потока сигнала λ_c и помехи λ_0 . При этом условная вероятность правильного обнаружения зависит только от задаваемой условной вероятности ложной тревоги, отношения сигнала к помехе и количества импульсов в каждом пуассоновском потоке.

Время принятия решения на обнаружение стационарной пуассоновской последовательности импульсов с сигналом в пуассоновской помехе неизвестной интенсивности определяется наибольшим значением интервала $[0, T_1]$ или $[0, T_2]$, на каждом из которых наблюдаются пуассоновские потоки m импульсов с интенсивностями λ_1 и λ_2 соответственно. В этом недостаток БНО, особенно заметный при увеличении g . Авторам удалось его устранить при сохранении показателей качества обнаружения.

Для этого предлагается построить обнаружитель на базе двухвыборочного непараметрического теста Вальда – Вольфовица, но со статистикой, вид которой отличается от (1):

$$S = s_1 + s_2 + 1 \text{ при } t \in [0, \min(T_1, T_2)]. \quad (4)$$

Это основано на том, что после поступления последнего m -го импульса одного потока на интервале $[0, \min(T_1, T_2)]$ на оставшемся интервале $[\min(T_1, T_2), \max(T_1, T_2)]$ достоверно наблюдается хотя бы один импульс другого пуассоновского потока, т. е. имеет место только одна серия. Поэтому для вычисления теста Вальда – Вольфовица для интервалов $[0, T_1]$, $[0, T_2]$ достаточно нахождения s_1 и s_2 на минимальном интервале $[0, \min(T_1, T_2)]$ с добавлением

одной единицы. Если учесть, что статистика (4) и порог решения (2) могут быть уменьшены на единицу, то в обнаружителе формируется значение статистики

$$S = s_1 + s_2 \text{ при } t \in [0, \min(T_1, T_2)]. \quad (5)$$

Его сравнивают с порогом решения

$$c = m - \sqrt{\frac{m(m-1)}{2m-1}} \Phi^{-1}(1-F). \quad (6)$$

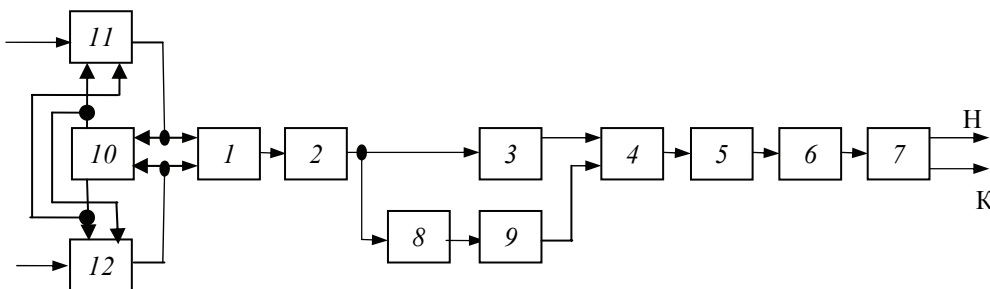
Поскольку принятие решения на обнаружение завершается на минимальном интервале времени, а один из потоков еще продолжается, то обнаружитель назван сверхбыстрым (СБНО). Его структурная схема представлена на рисунке и содержит RS-триггер 1, дифференцирующий блок 2, первый диод 3, блок сложения 4, блок нормирования 5, накопитель импульсов 6, пороговый блок 7, инвертор 8, второй диод 9, блок сравнения 10, первый ключевой блок 11, второй ключевой блок 12. СБНО работает следующим образом.

На один из входов обнаружителя поступает случайная стационарная пуассоновская последовательность Π_1 из m импульсов, обусловленная помехой, на другой – случайная стационарная последовательность Π_2 из m импульсов, обусловленная наличием смеси полезного сигнала и помехи. Первый стационарный пуассоновский поток с интенсивностью λ_1 , содержащий m импульсов на интервале времени $[0, T_1]$, представляет собой результат упорядочения элементов выборки из гипотетического равномерного распределения с плотностью [6]

$$f_1(t) \cong \begin{cases} T_1^{-1} \cong \lambda_1 m^{-1}, & 0 < t < T_1, \\ t = 0, & t \geq T_1, \end{cases} \quad (7)$$

а второй стационарный пуассоновский поток с интенсивностью λ_2 , содержащий m импульсов на интервале времени $[0, T_2]$, – результат упорядочения элементов выборки из гипотетического равномерного распределения с плотностью

$$f_2(t) \cong \begin{cases} T_2^{-1} \cong \lambda_2 m^{-1}, & 0 < t < T_2, \\ t = 0, & t \geq T_2. \end{cases} \quad (8)$$



Блок-схема сверхбыстрого обнаружителя

Блоки 10–12 обеспечивают прекращение процесса при поступлении на один из ключевых блоков 10 или 11 заданного количества m импульсов. Таким образом, на каждый вход RS-триггера 1 поступает стационарная пуассоновская последовательность коротких импульсов. Под их воздействием RS-триггер 1 формирует импульсы случайной длительности, фронты которых соответствуют началу или концу серий одной и второй последовательности импульсов в общей последовательности импульсов, представляющей общий вариационный ряд двух выборок из гипотетических равномерных распределений (7) и (8). Дифференцирующий блок 2 вырабатывает короткие импульсы положительной и отрицательной полярности, общее количество которых соответствует значению статистики теста суммы серий (5). Диод 3 пропускает импульсы положительной полярности, диод 9 – отрицательной полярности, которые на выходе инвертора 7 приобретают положительную полярность. Блок сложения 4 выдает последовательность импульсов положительной полярности. Их количество соответствует текущему значению суммы серий (5). Блок нормирования 5 генерирует импульсы стандартной амплитуды и длительности. Накопитель импульсов 6 суммирует по амплитуде стандартные импульсы, формируя напряжение, соответствующее текущему значению суммы серий, которое в пороговом блоке 12 сравнивается с порогом обнаружения (6). Если входное напряжение порогового блока меньше порога, то принимается решение К: «сигнал есть», в противном случае – Н: «сигнала нет». В момент времени, равный T_2 , накопитель импульсов 6 обнуляется.

Формирование статистики (5) завершается при поступлении m импульсов в одной из пуассоновских последовательностей. Так как из (7)

и (8) имеем $T \cong m / \lambda$, то в зависимости от того, в каком канале есть полезный сигнал, получаем

$$\frac{T_1}{T_2} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = 1 + g \quad \text{или} \quad \frac{T_2}{T_1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = 1 + g. \quad (9)$$

Очевидно, чем больше g , тем больше выигрыш во времени формирования статистики (5) по сравнению с (1). Например, как видно из (9), при $g = 1$ имеем двукратный выигрыш во времени принятия решения на обнаружение. При этом условные вероятности правильного обнаружения БНО и СБНО при одинаковых условиях равны между собой.

Заключение. Таким образом, в СБНО уменьшается время принятия решения на обнаружение стационарной пуассоновской последовательности импульсов с сигналом в пуассоновской помехе неизвестной интенсивности при сохранении его заданных показателей качества (условных вероятностей правильного обнаружения и ложной тревоги), особенно при увеличении отношения сигнала к помехе.

Литература

1. Лазерная локация / И. Н. Матвеев [и др]. М.: Машиностроение, 1984. 272 с.
2. Одноэлектронные фотоприемники / Ветохин С. С. [и др.]. М.: Энергоатомиздат, 1986. 246 с.
3. Тришенков М. А. Фотоприемные устройства и ПЗС. Обнаружение слабых оптических сигналов. М.: Радио и связь, 1992. 400 с.
4. Тарасенко Ф. П. Непараметрическая статистика. Томск: ТГУ, 1976. 294 с.
5. Вентцель Е. С. Теория вероятностей: учеб. для вузов. М.: Высшая школа, 2001. 575 с.
6. Никитенок В. И. Быстрые непараметрические алгоритмы обнаружения сигналов. Минск: БГУ, 2010. 131 с.

Поступила 28.02.2014

УДК 621.378.325

К. И. Рудик, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);**В. А. Чернявский**, кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой (БГАТУ)**АМПЛИТУДНАЯ И ФАЗОВАЯ АНИЗОТРОПИЯ
РАСТВОРОВ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ**

Экспериментально исследована амплитудная и фазовая анизотропия растворов красителей, наведенная линейно поляризованным излучением, методом зондирующего излучения. Установлено, что раствор красителя в этом случае представляет собой отрицательный кристалл, оптическая ось которого направлена вдоль вектора напряженности электрического поля возбуждающей волны. С помощью параметров Стокса получены данные об эллипсе поляризации зондирующего излучения, которые позволили рассчитать разность показателей преломления обыкновенного и необыкновенного лучей: $\Delta n = 10^{-5}$.

The amplitude and phase anisotropy of a dye solution induced by linearly-polarized radiation has been experimentally investigated by the radiation has been experimentally investigated by the method of light probing. It is shown that, in optical respect, this dye solution excited by linearly-polarized radiation represents a single-axis negative crystal whose optical axis is in line with voltage vector of the electric field intensity vector of the exciting light wave. With the help of the Stokes parameters of the polarization ellipse of the amplified probing radiation are received. From the obtained parameters of the ellipse the change in the refractive index $\Delta n = 10^{-5}$ of the excited dye solution has been calculated.

Введение. Молекулярные системы на растворах органических соединений, применяемые в качестве активных сред, под действием линейно поляризованного возбуждающего излучения приобретают анизотропные свойства, обусловленные значительным изменением населенностей основного и возбужденного состояний молекул и их анизотропным ориентационным распределением [1, 2]. Исследование наведенной анизотропии удобно проводить, зондируя исследуемую систему линейно поляризованным излучением. В этом случае изменение состояния поляризации луча на выходе из исследуемого раствора дает полную информацию о его оптической анизотропии как амплитудной, так и фазовой. Схематически опыт представлен на рис. 1.

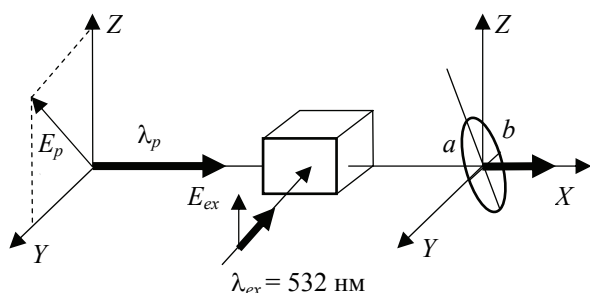


Рис. 1. Оптическая схема эксперимента

Основная часть. Оптическая анизотропия активных сред в значительной степени определяет характеристики излучения лазеров на красителях [3–5]. Оптическая анизотропия сложной молекулы определяется комплексным тензором поляризуемости, а оптическая анизотро-

пия активной среды описывается комплексным тензором восприимчивости. Действительная часть тензора восприимчивости определяет величину показателя преломления, а мнимая – усиления. Если \hat{T}_Ω – матрица преобразования системы координат, связанная с молекулой, в лабораторную, то тензор поляризуемости молекулы, имеющей ориентацию Ω в лабораторной системе координат, будет иметь вид

$$\hat{\alpha}^{\text{лаб}} = \hat{T}_\Omega \alpha^M \hat{T}_\Omega^{-1},$$

где \hat{T}_Ω^{-1} – обратная матрица; $\hat{\alpha}^{\text{лаб}}$, α^M – поляризуемости в лабораторной и молекулярной системах координат. Если $N(\Omega)$ – функция распределения молекул по ориентациям, то тензор восприимчивости в лабораторной системе координат будет иметь вид

$$\hat{\chi} = \sum \int \hat{T}_\Omega \alpha^M \hat{T}_\Omega^{-1} N_s(\Omega) d\Omega,$$

где Ω – совокупность углов Эйлера, задающих ориентацию молекулы относительно лабораторной системы координат; индекс $s = 1, 2$ соответствует основному и возбужденному состоянию.

Если ось X лабораторной системы координат выбрать по направлению зондирующего излучения, а ось Y – по направлению возбуждающего излучения (рис. 1), то из симметрии по отношению к плоскости XZ и при возбуждении линейно поляризованным излучением с ориентацией вектора E вдоль оси Z задача по определению тензора восприимчивости значительно упрощается.

Определение тензора восприимчивости возбужденного раствора проводилось путем усреднения по всем ориентациям диполей молекул. При этом установлено, что тензор восприимчивости представляет собой диагональный тензор третьего порядка $\chi = \{\chi_{11}, \chi_{22}, \chi_{33}\}$. С учетом симметрии и геометрии эксперимента $\chi_{11} = \chi_{22}$. В этом случае возбужденный раствор в оптическом отношении является одноосным кристаллом, оптическая ось которого направлена по вектору напряженности электрического поля световой волны возбуждения. Экспериментально проводилось определение состояния поляризации проводилось путем измерения параметров Стокса S_0, S_1, S_2, S_3 . Из полученных значений параметров Стокса установлено, что усиленное излучение эллиптически поляризовано. При этом определена степень эллиптичности, ориентация осей эллипса, а также разность значений показателей преломления обыкновенного и необыкновенного лучей, которая составила порядка 10^{-5} .

Прохождение света в направлении X через слой толщиной l возбужденного раствора красителя при указанной геометрии эксперимента можно записать в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta_y} & 0 \\ 0 & e^{\beta_y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{k_y/2} & 0 \\ 0 & e^{k_z/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{0y} \\ E_{0z} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где E_{0y}, E_y, E_{0z}, E_z – составляющие электрического поля световой волны на входе и выходе из раствора; k_y и k_z – коэффициенты усиления составляющих компонент поляризации y и z ; $\beta_y = \omega n_y l / c$, $\beta_z = \omega n_z l / c$ – некоторые сдвиги фаз. В выражении (1) левая матрица описывает изменение поляризации, связанное с фазовой анизотропией, правая описывает изменение поляризации за счет амплитудной анизотропии. Из этого выражения следует, что если $E_{0y} = 0$, то $E_y = 0$ и при $E_{0z} = 0$ $E_z = 0$, т. е. если $\varphi_0 = 0$ или 90° , то поляризация усиленного излучения остается неизменной.

Исследование состояния поляризации излучения в полной мере осуществляется при помощи параметров Стокса S_0, S_1, S_2, S_3 [6, 7]. Названные параметры экспериментально определяются следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} S_0 &= I(0^\circ, 0) + I(90^\circ, 0); \\ S_1 &= I(0^\circ, 0) - I(90^\circ, 0); \\ S_2 &= I(45^\circ, 0) - I(135^\circ, 0); \\ S_3 &= I(45^\circ, \pi/2) - I(135^\circ, \pi/2), \end{aligned} \quad (2)$$

где $I(\theta, \varepsilon)$ – интенсивность световых колебаний в направлении, образующем угол θ с осью Z при опережении z -компоненты на величину ε . Экспериментально определенные параметры Стокса

позволяют найти отношение осей эллипса a и b , а также угол φ между большой осью эллипса и осью Z . Кроме того, определяется и направление вращения светового вектора.

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{S_2}{S_1}; \quad \sin 2\chi = \frac{S_3}{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}}; \quad \operatorname{tg} \chi = \pm \frac{b}{a}. \quad (3)$$

Модуль сдвига фаз δ между z - и y -компонентами определяется выражением

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{\operatorname{tg} 2\chi}{\sin 2\varphi}. \quad (4)$$

Эксперимент. Излучение второй гармоники лазера на АИГ: Nd^{3+} , работающего в частотном режиме с усилителем, при помощи делительной пластинки расщеплялось на два пучка. Один из них служил для возбуждения лазера на красителе, излучение которого использовалось для зондирования исследуемого раствора. Необходимая ориентация плоскости поляризации зондирующего луча достигалась с помощью фазовой пластинки $\lambda/4$ и призмы Глана. Другая часть излучения второй гармоники с соответствующей ориентацией светового вектора служила для возбуждения исследуемого раствора.

Анализ поляризации зондирующего излучения, прошедшего через усиливающий раствор красителя, проводился на основании соотношений (2–4). Система регистрации интенсивностей $I(\theta, \varepsilon)$ осуществлялась при помощи цифрового запоминающего осциллографа, работавшего в режиме накопления и усреднения амплитуды импульсов.

Результаты экспериментов по определению степени эллиптичности (отношение малой оси эллипса b к большой a) усиленного излучения в зависимости от ориентации светового вектора E и плотности мощности возбуждающего излучения приведены на рис. 2, 3, из которых следует, что усиленное излучение является эллиптически поляризованным.

Кроме того, исследования показали, что имеет место левое вращение светового вектора E усиленной световой волны. Установлено, что при максимальной возможной плотности мощности возбуждающего излучения 10 МВт/см^2 , при которой не происходит разрушения молекул активной среды лазера на красителе, разность $\Delta n = 10^{-5}$.

Заключение. Раствор сложных органических соединений при возбуждении мощным линейно поляризованным излучением приобретает свойства оптически анизотропного одноосного кристалла. По этой причине поляризация усиленного излучения принципиально отличается от поляризации излучения на входе в усиливающий раствор красителя. На основании описанного явления возможно создание спектрально-селективного усиливающего затвора.

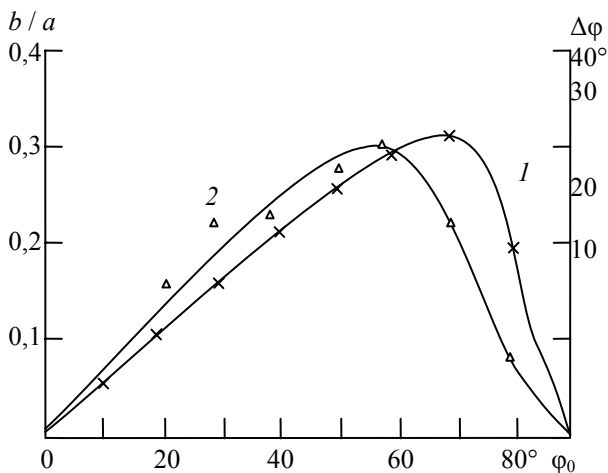


Рис. 2. Зависимость степени эллиптичности b/a усиленного излучения (1) и $\Delta\phi$ (2) от ориентации плоскости поляризации зондирующего излучения на входе в усиливающий раствор при $W = 10 \text{ МВт/см}^2$

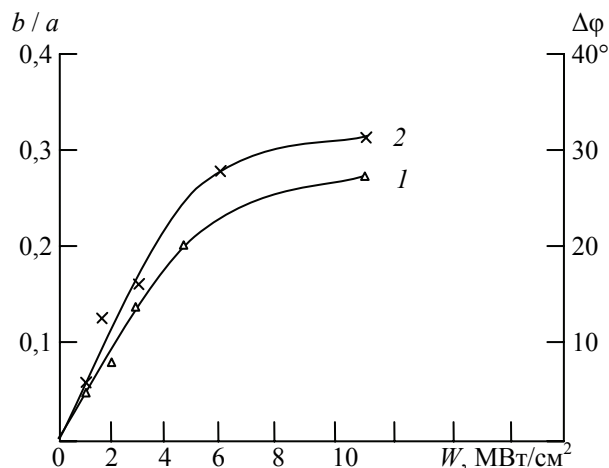


Рис. 3. Зависимость степени эллиптичности b/a усиленного излучения (1) усиленного луча и $\Delta\phi$ (2) от плотности мощности возбуждающего излучения

Литература

1. Рудик К. И., Ярошенко О. И. Осцилляторная модель сложной молекулы в анизотропной теории усилителей и лазеров на красителях // Acta Physica Polonica. 1978. Vol. 54. С. 879–888.

2. Рудик К. И., Ярошенко О. И. Тензорное описание усиления света растворами красителей // Квантовая электроника. 1981. Т. 8. С. 584–589.

3. Войтович А. П., Калинов А. Я., Смирнов С. С. Управление характеристиками излучения кольцевых лазеров на красителях с помощью резонаторных фазово-поляризационных методов // Квантовая электроника. 1984. Т. 11, № 7. С. 1492–1495.

4. Пикулик Л. Г., Чернявский В. А., Рудик К. И. Временной сдвиг между поляризационными модами излучения лазера на красителе // ДАН СССР. 1990. Т. 312, № 6. С. 1374–1378.

5. Пикулик Л. Г., Чернявский В. А., Рудик К. И. Спектральные особенности наведенной анизотропии растворов органических соединений // ДАН России. 1998. Т. 362, № 3. С. 339–342.

6. Федоров Ф. И. Теория гиротропии. Минск: Наука и техника, 1976. 456 с.

7. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1970. 856 с.

Поступила 27.02.2014

УДК 539.19

В. А. Кузьмицкий, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник
(Командно-инженерный институт МЧС Республики Беларусь)

ТОЧНЫЙ АЛГЕБРАИЧЕСКИЙ МЕТОД В ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ СЛОЖНОГО РЕЗОНАНСА ФЕРМИ ИЛИ ЕГО ВИБРОННОГО АНАЛОГА

Найдено точное решение задачи о восстановлении матричных элементов связи «светлого» и «темных» состояний b_i и энергии невозмущенных уровней a_i ($i = 1, 2, \dots, n - 1$); предполагается, что известны наблюдаемые энергии e_k и интенсивности переходов I_k ($k = 1, 2, \dots, n$) в результирующие «перемешанные» состояния. Алгоритм использует алгебраические методы, базирующиеся на нахождении собственных векторов матриц гамильтониана частного вида, а его модифицированный вариант – на элементарных вращениях Якоби. Для случая проявления неадиабатического вибронного взаимодействия у трех порфириновых соединений в области электронного 0–0-перехода $S_0 \rightarrow S_2$ найдены энергии возбужденного электронного состояния S_2 и состояний колебательных подуровней a_i состояния S_1 , а также матричные элементы вибронного взаимодействия b_i между этими состояниями.

We found an exact solution for the problem of reconstruction of coupling matrix elements between the "bright" and "dark" states b_i and unperturbed energy levels a_i ($i = 1, 2, \dots, n - 1$); it is suggested that the observed energies e_k and transition intensities I_k ($k = 1, 2, \dots, n$) into resulting "mixed" states are known. The algorithm uses algebraic methods and bases on finding of eigenvectors of Hamiltonian matrices of a particular form, and its modified version employs the elementary Jacobi rotations. For three porphyrin compounds, which manifest the non-adiabatic vibronic interaction in the region of electronic 0–0-transition $S_0 \rightarrow S_2$, energies of the excited electronic state S_2 and of the states of vibrational sublevels a_i of the electronic state S_1 was evaluated, as well as the coupling matrix elements b_i between these states.

Введение. Наличие нескольких последовательностей уровней энергии состояний, лежащих в близком диапазоне, но различающихся своей физической природой (автоинициация, преддиссоциация, безызлучательные переходы в многоатомных молекулах, внутримолекулярное перераспределение колебательной энергии), весьма характерно для атомно-молекулярных систем. К этому же кругу явлений относятся резонанс Ферми (актуально «взаимодействие» колебательных состояний) и его вибронный аналог (актуально «взаимодействие» электронно-колебательных состояний), суть которых состоит в расщеплении вырожденных (квазивырожденных) уровней и перераспределение интенсивности между переходами в результирующие состояния.

Классическим примером проявления сложного вибронного аналога резонанса Ферми являются низкотемпературные спектры поглощения молекулы нафталина – примесного центра в кристаллах дуrola и ксилoла [1]. Их характерная особенность состоит в том, что вместо одной линии 0–0-перехода $S_0 \rightarrow S_2$ наблюдается «запутанный» (tangle) спектр, состоящий из не менее полусотни нерегулярно расположенных узких линий. Другим примером такого рода могут служить низкотемпературные спектры возбуждения люминесценции молекул класса порфиринов в средах Шпольского (см. [2, 3] и цитированную там литературу), у ряда соеди-

нений которого 0–0-переход $S_0 \rightarrow S_2$ также распределен по большому числу ~ 30 –40 линий.

Основная часть. С квантово-механической точки зрения, для рассматриваемого случая существенно наличие точного или приближенного вырождения состояний Φ_1 и Φ_k ($k = 2, 3, \dots, n$) и «взаимодействия» между ними за счет возмущения \hat{H}^1 , которое первоначально в нулевом приближении отбрасывалось. Для описания резонансных взаимодействий будем использовать действительную матрицу гамильтониана $n \times n$ ($n \geq 3$) в следующем (каноническом) виде

$$H = \begin{pmatrix} 0 & B^t \\ B & A \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $A = \text{diag}\{a_1, a_2, \dots, a_{n-1}\}$ – диагональная матрица размерности $n - 1$; B – вектор размерности $n - 1$; $B^t = (b_1, b_2, \dots, b_{n-1})$; t – транспонирование; $a_i = \langle \Phi_{i+1} | \hat{H} | \Phi_{i+1} \rangle - \langle \Phi_1 | \hat{H} | \Phi_1 \rangle$; $b_i = \langle \Phi_1 | \hat{H}^1 | \Phi_{i+1} \rangle -$ матричные элементы связи ($i = 1, 2, \dots, n - 1$); $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$ – гамильтониан системы. С учетом приближенного равенства $\langle \Phi_{i+1} | \hat{H} | \Phi_{i+1} \rangle - \langle \Phi_1 | \hat{H} | \Phi_1 \rangle \approx \langle \Phi_{i+1} | \hat{H}^0 | \Phi_{i+1} \rangle - \langle \Phi_1 | \hat{H}^0 | \Phi_1 \rangle$ можно трактовать a_i как энергии невозмущенных уровней. В рамках линейного вариационного метода волновые функции возмущенных состояний Ψ_k представляются как $\Psi_k = \sum_{j=1}^n C_{jk} \Phi_j$, и C_{jk} определяются путем решения секулярной задачи $HC = CE$, $E = \text{diag}\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$. Предполагается – что существенно, – что источником интен-

сивности переходов в наблюдаемые состояния Ψ_k является только один переход $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$ (Φ_1 – «светлое» (bright) состояние, Φ_0 – начальное (основное) состояние), а переходы $\Phi_0 \rightarrow \Phi_i$ запрещены (Φ_i – «темные» (dark) состояния). В итоге относительная интенсивность $\Phi_0 \rightarrow \Psi_k$ определяется через первую строку матрицы C , $I_k = (C_{1k})^2$.

Величины a_i и b_i в случае **прямой задачи** при рассмотрении электронных и колебательных состояний можно было бы рассчитать квантово-химическими методами, однако такая задача для многоатомных молекул чрезвычайно сложна и требует высокой точности расчета. Поэтому может быть сформулирована **обратная задача**: *восстановить параметры связи b_i и энергии невозмущенных уровней a_i – составных элементов матрицы H в виде (1), считая, что величины e_k и I_k могут быть взяты из экспериментальных данных.*

Ранее для решения этой задачи применялся метод проб и ошибок [1] и метод функции Грина [4], которые существенным образом опирались на итерационные процедуры с согласованием по рассчитанной и наблюдаемой интенсивности переходов $\Phi_0 \rightarrow \Psi_k$.

В статье [5] нами разработан точный алгебраический метод решения рассматриваемой задачи.

Он состоит из двух этапов. На первом осуществляется преобразование подобия $X \cdot C^t \cdot H \cdot C \cdot X^t = X \cdot E \cdot X^t$ ($X^{-1} = X^t$), в котором $X = C_0 C_1 \dots C_M$, C_0, C_1, \dots, C_M – матрицы собственных векторов гамильтониана (1) частного вида H_0, H_1, \dots, H_M . Подробные алгебраические соотношения для построения матриц H_0, H_1, \dots, H_M даны в [5]. При этом преобразованию C_0 соответствует деление интенсивности от исходного перехода $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$ только в два перехода: $\Phi_0 \rightarrow \Psi^\lambda$, $\Psi^\lambda = \Phi_1(C_0)_{11} + \dots$ и $\Phi_0 \rightarrow \Psi^\rho$, $\Psi^\rho = \Phi_1(C_0)_{1n} + \dots$ с интенсивностями I^λ и I^ρ , которые определяются соответственно величинами $(C_0)_{11}$ и $(C_0)_{1n}$; остальные элементы первой строки матрицы C_0 равны нулю. Матрице C_1 аналогичным образом соответствует дальнейшее расщепление переходов $\Phi_0 \rightarrow \Psi^\lambda$ и $\Phi_0 \rightarrow \Psi^\rho$ таким образом, что интенсивности $I^{\lambda\lambda}$ и $I^{\lambda\rho}$ «черпаются» только из I^λ , а интенсивности $I^{\rho\lambda}$ и $I^{\rho\rho}$ – из I^ρ . Процесс деления такого рода заканчивается за конечное число шагов M (рис. 1).

В настоящей работе нами предлагается модификация этого этапа. Она может быть проиллюстрирована рис. 2. Теперь это деление интенсивностей не связано с диагонализацией матриц H_0, H_1, \dots, H_M , а задается только лишь элементарными матрицами вращения Якоби.

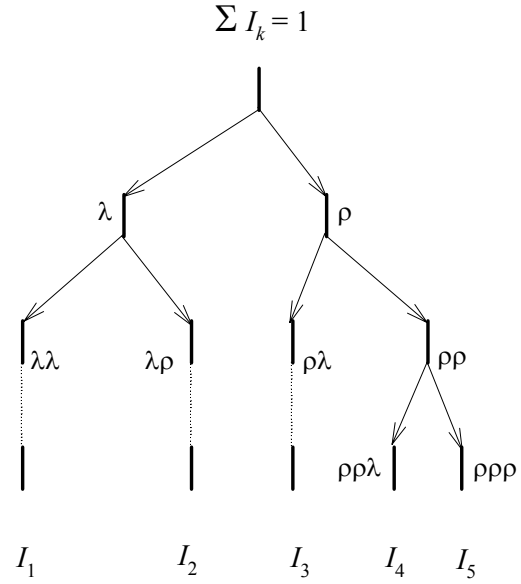


Рис. 1. Расщепление интенсивностей для «левых» λ и «правых» ρ переходов

$$\sum_{k=1}^n I_k^{(1)} = 1 \quad I_k^{(1)} = I_k^{(\text{эксп})} / \sum_{k=1}^n I_k^{(\text{эксп})}$$

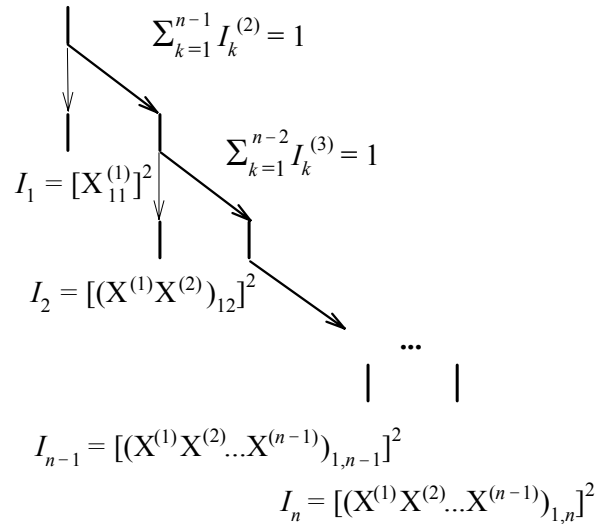


Рис. 2. Расщепление интенсивностей в результате преобразований $X^{(i)}$

В конце первого этапа $(X_{1k})^2 = I_k$ ($k = 1, 2, \dots, n$), а преобразование подобия $X \cdot E \cdot X^t$ дает

$$X \cdot E \cdot X^t = \begin{pmatrix} 0 & D^t \\ D & F \end{pmatrix}. \quad (2)$$

В уравнении (2) F – симметричная действительная матрица $(n-1)$ -го порядка, D – вектор $(n-1)$ -го порядка, $D^t = (d_1, d_2, \dots, d_{n-1})$.

Второй этап состоит в том, что для матрицы F формулируется задача на собственные значения

$$FZ = ZA, \quad (3)$$

где A – диагональная матрица, $A = \text{diag}\{a_i\}$.

Умножение выражения (2) слева на Y и справа на Y^t , где $Y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z^t \end{pmatrix}$ с учетом того, что $F = Z \cdot A \cdot Z^t$, $Z^t = Z^{-1}$, дает искомый вид (1) матрицы H :

$$H = C \cdot E \cdot C^t = Y \cdot X \cdot E \cdot X^t \cdot Y^t, \quad (4)$$

т. е. $C = Y \cdot X$. Таким образом, энергии невозмущенных уровней a_i даются собственными значениями задачи (3), а матричные элементы связи «светлых» и «темных» состояний b_i вычисляются из уравнения

$$b_i = \sum_{j=1}^{n-1} d_j Z_{ji}. \quad (5)$$

Заключение. На основе найденного алгоритма с использованием экспериментальных данных для трех порфириновых соединений [2, 3] рассчитаны энергии состояний невозмущенных уровней a_i (колебательных подуровней состояния S_1) и матричные элементы связи b_i (неадиабатического электронно-колебательного взаимодействия состояний S_2 и S_1). Найдено, что величины последних в большинстве случаев составляют $\sim 20\text{--}30 \text{ см}^{-1}$. Эти значения b_i сопоставимы с данными для молекулы нафталина – $\sim 10\text{--}20 \text{ см}^{-1}$, полученными в работе [4], в то время как в работе [1] для этой же молекулы параметры вибронной связи в 5–10 раз больше.

В работах [2, 3] показано также, что большинство частот составных колебаний, принад-

лежащих электронному уровню S_1 для двух главных сайтов рассматриваемых молекул порфиринов, согласуются между собой с точностью, не превышающей 8 см^{-1} , между тем как условия резонанса для этих сайтов существенно различаются – энергетический интервал S_2S_1 варьируется в пределах 100 см^{-1} .

Литература

1. Wessel J., McClure D. S. Vibronic interactions in the naphthalene molecule // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1980. Vol. 58. P. 121–153.
2. Арабей С. М., Кузьмицкий В. А., Соловьев К. Н. Проявление вибронного аналога резонанса Ферми в квазилинейчатых спектрах порфиринов: эксперимент и теоретический анализ // *Оптика и спектр.* 2007. Т. 102. С. 765–777.
3. Arabei S. M., Kuzmitsky V. A., Solovyov K. N. Complicated Fermi-type vibronic resonance: Untangling of the single-site quasi-line fluorescence excitation spectra of a methylated dibenzoporphin // *Chem. Phys.* 2008. Vol. 352. P. 197–204.
4. Langhoff C. A., Robinson G. W. Time decay and untangling of vibronically tangled resonances: Naphthalene second singlet // *Chem. Phys.* 1974. Vol. 6. P. 34–53.
5. Кузьмицкий В. А. Об определении невозмущенных уровней энергии и матричных элементов взаимодействия, ведущего к сложному вибронному аналогу резонанса Ферми // *Оптика и спектр.* 2006. Т. 101. С. 711–717.

Поступила 27.02.2014

УДК 539.19

Д. И. Волкович, младший научный сотрудник
(Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси);
В. А. Кузьмицкий, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник
(Командно-инженерный институт МЧС Республики Беларусь);
К. Н. Соловьев, член-корреспондент, доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник (Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси)

ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ МЕТОДОМ INDO/Sm

В рамках метода INDO/S для родоначальников ряда тетрапирролов – молекул порфина и Mg-порфина – проведено варьирование и одноэлектронных, и двухэлектронных интегралов, на основании чего предложен его вариант, INDO/Sm. Методом INDO/Sm рассчитаны электронные спектры фундаментальных тетрапиррольных структур (хлорин, бактериохлорин, тетраазпорфин и др.); показано, что энергии Q -уровней согласуются с экспериментальными с погрешностью $\sim 300\text{--}700\text{ см}^{-1}$, в то время как в расчетах INDO/S она составляет $\sim 3000\text{ см}^{-1}$. Методом INDO/Sm выполнены расчеты нескольких рядов тетрапиррольных соединений: аналогов фталоцианина с пятичленными гетероароматическими циклами, фенилзамещенных порфиразинов, аналогов бактериохлорофилла и др. Полученные результаты совместно с экспериментальными данными позволили установить существенные спектрально-структурные корреляции.

We have undertaken variation of the parameters of the INDO/S method for both one-electron and two-electron integrals when performing the quantum-chemical calculations on porphin and Mg porphin molecules, and proposed a modified parameterization, INDO/Sm. Using the INDO/Sm method, we calculated the electronic spectra of tetrapyrrole fundamental structures, including chlorin, bacteriochlorin, tetraazaporphin, and results for the energy of Q levels are consistent with the experimental data with an accuracy of ca. $300\text{--}700\text{ cm}^{-1}$, whereas the INDO/S calculation accuracy is ca. 3000 cm^{-1} . In the framework of the INDO/Sm method, we have carried out extensive calculations of several series of tetrapyrrole compounds, in particular, phthalocyanine analogues with five-membered heteroaromatic rings, phenyl substituted porphyrazines, bacteriochlorophyll analogues and others. The results obtained, together with experimental data, enabled establishing significant spectral-structural correlations.

Анализ результатов расчетов возбужденных электронных состояний. Сравнение результатов квантово-химических расчетов молекул тетрапирролов как полуэмпирическими, так и неэмпирическими и DFT/TDDFT-методами с экспериментальными данными показывает, что между ними имеется ряд существенных расхождений, в том числе для родоначальника ряда – молекулы порфина (H_2P) (см. [1] и цитированную там литературу):

1. Энергия уровней Q_x и Q_y систематически занижена, погрешность составляет $\delta E_Q \sim 3000\text{ см}^{-1}$. Энергия уровней B_x и B_y систематически завышена. Примерно в 4 раза завышена сила осциллятора переходов $G \rightarrow B_x$ и $G \rightarrow B_y$ (G – основное состояние). Приближение случайных фаз улучшает характеристики B -состояний, но энергия Q -состояний оказывается заниженной еще в большей мере.

2. Конфигурационный состав пары Q -состояний и пары B -состояний определяется главным образом электронными конфигурациями четырехорбитальной модели $a_u b_{3g}$, $a_u b_{2g}$, $b_{1u} b_{3g}$, $b_{1u} b_{2g}$. Вклад конфигураций $a_u b_{3g}$ и $b_{1u} b_{2g}$ слиш-

ком велик для состояния N_x , из-за чего сила осциллятора перехода $G \rightarrow N_x$ чересчур велика. Положение центра тяжести уровней B_x , B_y , N_x завышено – $\delta E_{\text{Core}} \sim 3500\text{ см}^{-1}$. В то же время экспериментально полоса Core H_2P по сравнению с магниевым комплексом (MgP) не претерпевает радикальных изменений, а полоса Core тетрабензопорфина расщеплена только на две компоненты.

Аналогичные недостатки имеют место и для молекулы MgP .

Параметризация INDO/Sm. В связи с вышесказанным в работе [1] нами проведены обширные расчеты молекул H_2P и MgP при варьировании параметров метода INDO/S. Их цель состояла в нахождении параметризации, которая позволила бы достичь улучшенного согласия расчетных данных с экспериментальными и была бы пригодной для описания электронных спектров других молекул рассматриваемого класса.

В полуэмпирических методиках часть матричных элементов оценивается на основе экспериментальных данных, а часть подгоняется.

К числу последних относятся недиагональные матричные элементы одноэлектронного гамильтониана $H_{\mu\nu}$ и интегралы электрон-электронного взаимодействия $\gamma_{\mu\nu}$ как функции межядерного расстояния R_{AB} . В методе INDO/S $H_{\mu\nu}$ определяются следующим образом:

$$H_{\mu\nu} = (\beta_A^0 + \beta_B^0) / 2 \cdot (\alpha_1 k_\sigma S_{\mu\nu}^\sigma + \alpha_2 k_\pi S_{\mu\nu}^\pi), \quad (1)$$

где β_A^0, β_B^0 – атомные параметры; α_1, α_2 – ориентационные множители; $S_{\mu\nu}^\sigma, S_{\mu\nu}^\pi$ – интегралы перекрывания АО по σ - или π -типу; k_σ, k_π – параметры, стандартные значения которых: $k_\pi = 0,585$, $k_\sigma = 1,287$. Интегралы $\gamma_{\mu\nu}$ в методе INDO/S задаются формулой Нишимото – Матага, которую можно представить в виде

$$\gamma_{\mu\nu}(R_{AB}) = C \gamma_W / (C \gamma_W a_{\mu\nu} f_1 + R_{AB} f_2), \quad (2)$$

где $C = 27,2098 \cdot 0,529177$ эВ; $\gamma_W = 1,2$; $a_{\mu\nu} = [(\gamma_{\mu\mu} + \gamma_{\nu\nu})/2]^{-1}$; $\gamma_{\mu\nu}$ выражены в электрон-вольтах (эВ), R_{AB} – в ангстремах (Å). В исходной формуле Нишимото – Матага $\gamma_W = f_1 = f_2 = 1$.

Молекулы H_2P и MgP . В большей части расчетов проводилось варьирование параметра π -электронного перекрывания k_π и факторов f_1 и (или) f_2 . Оказалось, что изменение только k_π ответственно за сдвиг уровней Q, B и N в одну и ту же сторону и положение центра тяжести Q - и B -уровней \bar{E}_{BQ} линейно зависит от k_π . Изменение f_1 при фиксированных значениях k_π оказывает влияние в первую очередь на расщепление $\delta E_{BQ} = (E_{By} + E_{Bx} - E_{Qy} - E_{Qx}) / 2$.

Полученные зависимости интерпретированы на основе результатов применения теории возмущений (ТВ) к нижним возбужденным состояниям молекул класса порфиринов [2], особенностями которых, как показано, определяются рамками четырехорбитальной модели и действием двух возмущений $\Delta\hat{H}^1$ и $\Delta\hat{H}^2$. Оператор $\Delta\hat{H}^1$ описывает отклонение двухэлектронного взаимодействия от хартри-фоковского у «невозмущенной» молекулы симметрии D_{4h} , а одноэлектронный оператор $\Delta\hat{H}^2$ задается возмущением, отвечающим переходу к рассматриваемой, «возмущенной» молекуле в соответствии с изменением структурных факторов, воздействия окружающей, внешних полей и т. п. В нулевом порядке ТВ в таком подходе энергия четырех уровней Q и B почти одинакова. Поэтому в простой теории Хюккеля \bar{E}_{BQ} будет определяться резонансным интегралом β , а в полуэмпирических аналогах метода ССП – матричными элементами вида (1); в итоге \bar{E}_{BQ} должна линейно зависеть от k_π . Учет двухэлектронного оператора $\Delta\hat{H}^1$ приводит к «расталкиванию» δE_{BQ} пар Q - и B -уровней относительно \bar{E}_{BQ} , тем самым δE_{BQ} зависит от интегралов электрон-электронного взаимодействия $\gamma_{\mu\nu}$.

Для H_2P расчет энергий (приведено в 10^3 см⁻¹) с $k_\pi = 0,680, f_1 = 2,0, f_2 = 1,0$ дает: $E_{Qx} = 16,3$ (16,3), $E_{Qy} = 19,5$ (19,3), $E_{Bx} = 25,3$ (25,0), $E_{By} = 25,7$ (25,7) для MgP : $E_Q = 18,5$ (17,3), $E_B = 27,1$ (24,4); для MgP с $k_\pi = 0,635, f_1 = 2,1, f_2 = 1,0$ получено $E_Q = 17,4$ (17,3), $E_B = 25,7$ (24,4) (в скобках данные эксперимента). Полученные результаты свидетельствуют о гораздо лучшем соответствии эксперименту данных INDO/Sm, чем вышеупомянутых данных полуэмпирических методов и методов ab initio или DFT/TDDFT.

В работах [1, 3–7] метод INDO/Sm применен для расчетов нескольких рядов тетрапиррольных соединений. Основные результаты можно суммировать следующим образом.

Фундаментальные тетрапиррольные структуры [1].

1. Для молекулы хлорина, так же как и для молекулы H_2P , предпочтительно сопоставление полосы Core только двух электронных переходов $G \rightarrow B_y$ и $G \rightarrow B_x$ с близкой энергией.

2. Последовательность уровней Q_x, Q_y, B_y, B_x молекулы бактериохлорина (H_2BX) находится в соответствии с предсказаниями ТВ [2] и поляризационными данными флуоресценции, и она отлична от последовательности Q_x, Q_y, B_x, B_y у молекулы H_2P .

3. Переход от молекулы H_2P к молекуле тетраазпорфина или порфиразина (H_2PA) сопровождается «перекачкой» интенсивности от переходов $G \rightarrow B_x, G \rightarrow B_y$ к переходам $G \rightarrow N_x, G \rightarrow N_y$, что соответствует «размытой» полосе Core, у которой более отчетливый максимум расположен в коротковолновой стороне.

Производные H_2P и H_2PA с аннелированным пятичленным гетероароматическим циклом (ряды с гетероатомами N, O, S) [3].

1. Аннелирование пятичленных циклов к пиррольному кольцу H_2P (NH-изомеры типа b) ведет к расширению главного пути сопряжения – от 18-членного циклополиена к 21-членному. У производных H_2P с аннелированием к пирроленовому кольцу (NH-изомеры типа a) и для обоих NH-изомеров a и b у производных H_2PA соответственно 18- и 16-членный циклополиены изолированы от 5-членных колец с шестью π -электронами. Симметрия центральной части молекул близка к D_{2h} .

2. Электронные спектры поглощения на границе видимой и УФ-области у изомеров a производных H_2P определяются интенсивными переходами $G \rightarrow B_x$ и $G \rightarrow B_y$, а в случае H_2PA – в этой же области актуальны переходы $G \rightarrow B_x, G \rightarrow B_y, G \rightarrow N_x$ и $G \rightarrow N_y$.

Магниевый комплекс Mg-1,4-дiazеино-трибензопорфирина [4].

1. Энергия основного состояния у изомеров 6H и 1H (различие по положению атома водорода у diaзепинового фрагмента) невелико, т. е. возможна таутомерия.

2. Согласно с экспериментом для энергий Q -уровней (приведено 10^3 см^{-1}) лучше для геометрии, полученной методом DFT, чем для геометрии, полученной методом PM3.

$$\text{PM3: } E_{Q1} = 13,9, E_{Q2} = 15,2, \Delta E_{Q2Q1} = 1,3;$$

$$\text{DFT: } E_{Q1} = 14,9, E_{Q2} = 15,6, \Delta E_{Q2Q1} = 0,7;$$

$$\text{Эксп.: } E_{Q1} = 14,5, E_{Q2} = 15,3, \Delta E_{Q2Q1} = 0,8.$$

Фенилзамещенные порфирины с халькогенсодержащим гетероциклом [5, 6].

1. Геометрическая структура основного состояния молекул MgII, MgIIA, MgIIAФ₈, Mg{SN₂}IIA, Mg{SN₂}IIAФ₆ (Ф – фенил, {SN₂} – символическое обозначение гетероцикла) и соответствующих свободных оснований получена на основе метода DFT.

2. Для области полосы Soret энергии переходов и распределение их интенсивностей существенным образом зависят от двугранного угла γ между фенильными кольцами и порфириновым макроциклом. Расчеты при $\gamma = 60^\circ$ позволяют с точностью $\sim 2000\text{--}3000 \text{ см}^{-1}$ сделать отнесение полос в наблюдаемых спектрах поглощения и поляризационных спектрах флуоресценции.

Аналоги бактериохлорофилла [7]. Для выяснения факторов формирования наблюдаемого батохромного сдвига $\delta E_{Q1} \cong -300 \text{ см}^{-1}$ длинноволновой полосы бактериохлорофилла относительно бактериофеофитина *a* (что существенно для поиска потенциальных фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии) рассмотрены свободные основания H₂BX, тетразабактериохлорина (H₂ТАБХ) и их магниевых комплексов (MgBX и MgТАБХ). Для пар H₂BX, MgBX и H₂ТАБХ, MgТАБХ детально проанализирован вклад одноэлектронных и двухэлектронных взаимодействий в сдвиг полосы Q_x . Показано, что батохромный сдвиг у пар тетрагидропроизводных обусловлен уменьшением орбитальной энергетической щели между нижней вакантной МО и верхней заполненной МО. При этом для обеих пар H₂BX, MgBX и H₂ТАБХ,

MgТАБХ одноэлектронный сдвиг орбитальных уровней велик; двухэлектронные вклады – как в энергию электронных конфигураций, так и за счет наложения конфигураций – оказывают компенсирующее «гипсохромное» действие. В итоге результирующий сдвиг δE_{Qx} для пар H₂BX, MgBX и H₂ТАБХ, MgТАБХ составляет соответственно $\delta E_{Qx} = -260$ и $\delta E_{Qx} = -150 \text{ см}^{-1}$. В целом рассчитанные электронные спектры рассмотренных молекул на количественном уровне согласуются с экспериментальными спектрами поглощения.

Литература

1. Кузьмицкий В. А., Волкович Д. И. Расчет электронного спектра порфина и его производных модифицированным методом INDO/S // ЖПС. 2008. Т. 75. С. 28–35.

2. Кузьмицкий В. А. Переходы в нижние синглетные и триплетные состояния молекул порфиринов: подход на основе теории возмущений и орбиталей ССП. Минск, 1988. 54 с. (Препринт / Акад. наук БССР, Ин-т физики; № 518).

3. Волкович Д. И., Кузьмицкий В. А., Стужин П. А. Расчеты модифицированным методом INDO производных порфина и порфирина с аннелированным пятичленным гетероароматическим циклом // ЖПС. 2008. Т. 75. С. 606–622.

4. Электронная структура и флуоресценция молекул Mg(II)-комплекса 1,4-дiazеинотрибензопорфирина / Кнюкшто В. Н. [и др.] // ЖПС. 2009. Т. 76. С. 365–375.

5. Porphyrines with annulated chalcogen-containing heterocycle: study of spectral-luminescence properties and quantum-chemical calculations of the excited electronic states / Solovyov K. N. [et al.] // Macroheterocycles / Макрогетероциклы. 2010. Т. 3. С. 51–62.

6. Люминесценция и электронная структура молекул фенилзамещенных Mg-порфиринов с аннелированным халькогенсодержащим гетероциклом / Кнюкшто В. Н. [и др.] // Оптика и спектр. 2012. Т. 113. С. 401–417.

7. Расчет электронной структуры и спектров молекул аналогов бактериохлорофилла / Волкович Д. И. [и др.] // ЖПС. 2011. Т. 78. С. 171–180.

Поступила 05.03.2014

УДК 535.36;535.37;584.4;537.26

Е. М. Шишенок, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);
В. Г. Лугин, кандидат химических наук, доцент (БГТУ)

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ СИНТЕТИЧЕСКОГО АЛМАЗА

С использованием рентгеновской дифрактометрии исследованы порошки синтетического алмаза (СА) с различной зернистостью, содержанием примесей и прочностью, полученные в едином цикле синтеза, в сравнении с эталонным образцом натурального алмаза. Выявлена тонкая структура линий рентгеновских дифрактограмм спектров порошков СА, свидетельствующая об искажениях его кристаллической решетки. Установлена связь характера искажений с прочностью и морфологией зерен порошков.

Using XRD analysis, powders of synthetic diamond (SD) were investigated. These sets of powders possessed various grain sizes, different impurity contents and strength and were synthesized during one cycle of synthesis. XRD patterns of the powder sets were compared with standard of natural diamond. As established, lines of the patterns of SD were presented by finely resolved multiplets which testified to distortions of CD crystal lattice. A connection of the distortion's character with strength and morphology of powders of grains is established.

Введение. Алмаз, натуральный (НА) и синтетический (СА) – сверхтвердый материал и широкозонный ($E_g = 5,5$ эВ) полупроводник. Широко используется в промышленных приложениях (абразивный и лезвийный инструмент), обладает наибольшими теплопроводностью (теоретическая – 2000 Вт/мК), твердостью и прочностью из всех существующих материалов. Алмаз уступает по радиационной, химической и термической стойкости только кубическому нитриду бора (сBN). Свойства алмаза давно исследуются, СА исследуют с момента его получения в технике высоких давлений в 1953 г. по настоящее время. В последние десятилетия исследования алмаза направлены на его использование в электронике.

Алмаз уже нашел применение как функциональный материал в датчиках температуры, детекторах излучений (УФ-, рентгеновское, нейтронное, α -, γ -, синхротронное, высокоэнергетические ионы), микроволновых усилителях и передатчиках (Diamond Microwave Devices Ltd., UK) и т. п. Разного рода алмазные детекторы являются коммерчески доступными. СА для их изготовления считается даже более предпочтительным, поскольку стабильность его свойств может быть обеспечена стабильностью режимов синтеза (CVD, HPHT). Компания Element Six Ltd. (UK) в 2008 г. дала старт созданию следующего поколения алмазных электронных устройств на основе монокристаллов СА, включая сверхтонкие и наноразмерные.

Практическое применение в электронных устройствах, требующих экстремально высоких характеристик, алмазу, помимо его высокой теплопроводности, обеспечивают высокая подвижность носителей ($\mu_e \sim 1800$ см²/В·с – поликристаллический CVD, $\mu_e \sim 4500$ см²/В·с –

монокристаллический CVD) и высокая энергия смещения атомов (~80 эВ). Особую важность в последнее время приобретают исследования NV-центра в алмазе (точечного оптически активного дефекта с БФЛ при ~1,945 нм) как основы для создания квантового компьютера.

Характеристики реально синтезируемых образцов СА ниже теоретических по причине различного состояния их дефектно-примесной структуры. Она к настоящему времени исследовалась методами спектроскопии (КЛ, ФЛ, ЭПР, ИК, КР). Было выявлено множество оптически активных точечных дефектов в НА и значительно меньше в СА, в частности в люминесценции – в основном со спектрами «месбауэровского типа». Последние ввиду большой ширины запрещенной зоны сBN оказались характерными и для этого материала.

Легирование СА примесями больших размеров, чем собственные атомы (а это все легирующие примеси и атомы катализаторов синтеза), например с целью придания ему полупроводниковых свойств, должно влиять как на прогнозируемые функциональные характеристики СА, так и на его структуру и прочность. Ожидалось, таким образом, что линии в рентгеновских дифрактограммах СА должны быть чувствительны к концентрации в нем примесей, аналогично выявленному нами ранее эффекту на микропорошках сBN, активированному редкоземельными элементами [1]. Интересным представлялось установить связь между структурным состоянием СА и его прочностью.

В настоящей работе исследована структура линий рентгенограмм порошков СА с различным содержанием технологических примесей (Ni, Mn и др.) и их механическая прочность в сравнении с рентгенограммой микропорошка (14/10)

натурального алмаза (НА) – наиболее совершенным и доступным для нас алмазным материалом, взятым в качестве эталона.

Порошки СА были получены в каталитической системе Ni – Mn в условиях высоких давлений. Порошки различной зернистости (63/50, 80/63, 100/80, 125/100, 160/125) выделялись из массы синтезированного порошка (после химической обработки продуктов синтеза) путем ситового анализа. Различная размерность зерен СА свидетельствовала о различных скоростях их роста после нуклеации. Прочность порошков на разрушение (Н/зерно) измерялась согласно ГОСТ 9206–80. Рентгеновские дифрактограммы порошков СА и НА регистрировались на дифрактометре D8 Advance Bruker AXS на $CuK\alpha$ -излучении, скорость регистрации дифрактограмм (рентгенограмм) составляла 0,01°/мин. Примесный состав порошков исследовался методом рентгенофлуоресцентного анализа. Микроструктура и морфология зерен оценивалась с использованием сканирующей микроскопии.

Основная часть. На рис. 1 представлена зависимость прочности порошков СА от их зернистости. Очевидно, что порошки с зернистостью 100/80 обладают максимальной прочностью. Такого рода экстремальная зависимость является характерной и известна для партий порошков СА, полученных в одном синтезе.

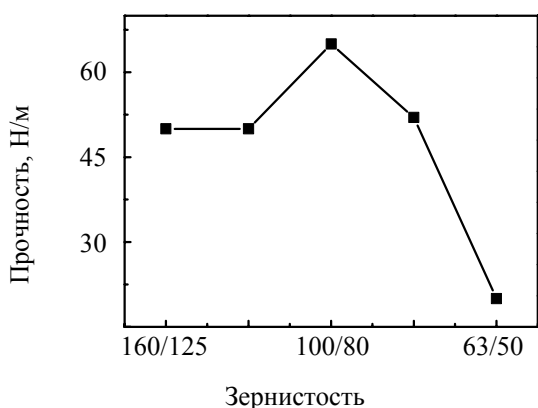


Рис. 1. Зависимость прочности порошков СА от их зернистости

На рис. 2 представлена микроструктура зерен порошков с зернистостью 63/50 и 100/80. Во втором случае морфология зерен является более совершенной, что коррелирует с большей прочностью указанных порошков. Примесный состав порошков с указанной зернистостью оказался различным. Порошки с зернистостью 100/80 содержали примеси Ni и Mn, а малоразмерные порошки (63/50) нет. Общее количество примесей (Cu, Si и Ni, Mn) в порошках СА увеличивалось с повышением зернистости.

Наличие примесей катализаторов (Ni, Mn) в составе порошков 100/80 указывало на благоприятные условия их роста вблизи катализатора, о чем свидетельствуют также их повышенная прочность и морфология зерен.

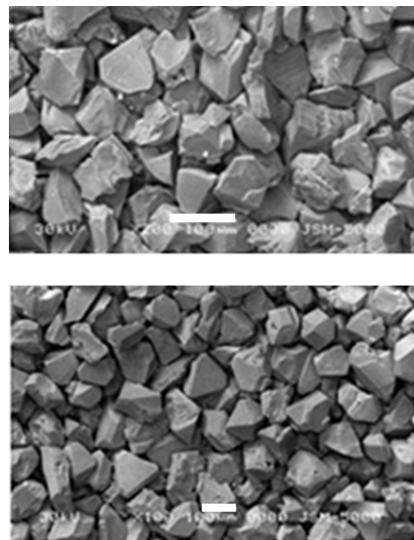


Рис. 2. Микроструктура порошков СА с зернистостью 63/50 (верхний) и 100/80 (нижний). Штрих белого цвета – 100 мкм

РД-анализ показал однофазный состав порошков СА, так как их рентгенограммы содержали только линии (111), (220), (311) и (331), принадлежащие алмазу. В указанных рентгенограммах наблюдалось перераспределение интенсивностей линий в сравнении с эталоном, на рис. 3 – на примере СА 100/80. Указанные наблюдения свидетельствуют о наличии искаженной кристаллической решетки СА (например, 100/80), с одной стороны, и о текстуре зерен – с другой. Характер изменений интенсивностей линий варьировался от одной зернистости порошка СА к другой.

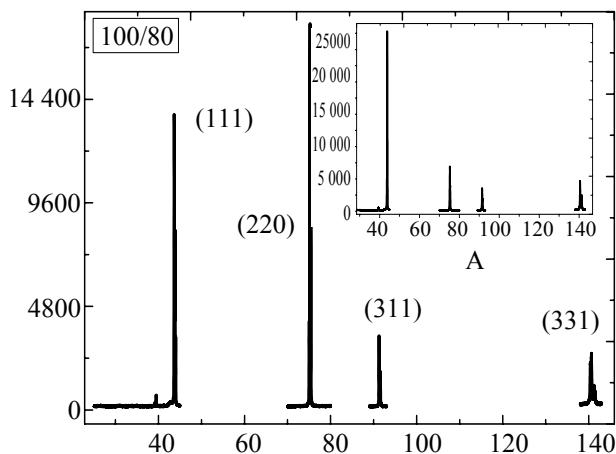


Рис. 3. Рентгенограмма порошка СА (100/80) и эталона, микропорошка НА – на вставке

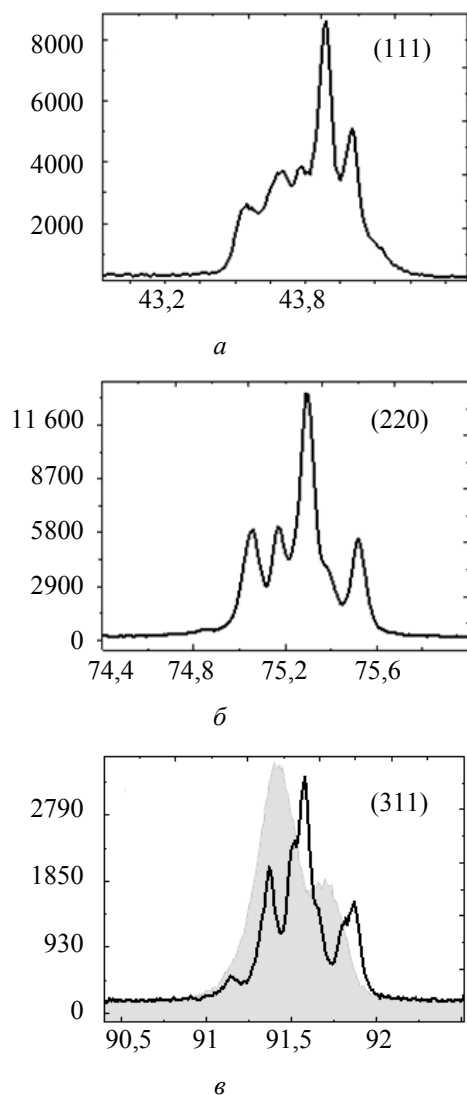


Рис. 4. Линии (111), (220) и (311) (а, б, в) на фоне линии эталона (в) на рентгенограмме порошка СА зернистостью 63/50

Исследовалась форма линий рентгенограмм порошков СА. Установлено, что в рентгенограмме эталонного НА все линии представлены $K\alpha$ -дублетами. На рентгенограммах порошка СА (63/50) с низкой прочностью линии обладают развитой структурой, не связанной с условиями съемки.

На рис. 4 представлены линии (111), (220) и (311) рентгенограммы СА 63/50, в случае линии (311) – в сравнении с линией рентгенограммы эталона. Линии на рентгенограмме порошка СА (100/80) также не представлены одним дублетом, однако в их структуре содержится меньшее количество компонент (рис. 5), чем для порошка СА 63/50. Установлено, что дополнительные линии в двух упомянутых случаях не принадлежат примесям в СА.

Известно, что причиной расщепления линий на рентгенограмме кубической структуры

(ОЦК и ГЦК) являются ее искажения. Более детально вопрос был освещен нами в [1]. Чем больше число дополнительных линий (в нашем случае α_1 - α_2 -дублетов) в области основной линии рентгенограммы алмаза с ГЦК-структурой, тем более низкосимметричные искажения несет кристаллическая решетка алмаза.

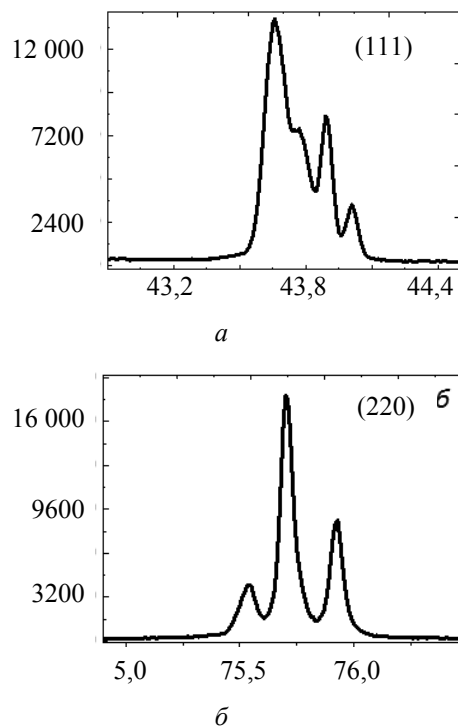


Рис. 5. Линии (111) и (220) на рентгенограмме порошка СА зернистостью 100/80

Заключение. Установлено, что кристаллическая решетка СА в форме порошков различной зернистости, содержащего технологические примеси, несет искажения в отличие от эталона НА, линии в рентгенограмме которого уширены (ввиду малой зернистости) и представлены α_1 - α_2 -дублетами. Изменение характера искажений кристаллической решетки алмаза от неупорядоченных низкосимметричных к более упорядоченным и более симметричным сопровождается повышением его прочности.

Литература

1. Шишонов Е. М., Лугин В. Г. Оценка типа и величины искажений кристаллической решетки кубического нитрида бора, активированного редкоземельными элементами (Eu, Gd, Nd) // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 60–62.

Поступила 01.03.2014

УДК 674.055:621.934(043.3)

В. В. Чаевский, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);
А. А. Гришкевич, кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой (БГТУ);
В. Н. Гаранин, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);
В. В. Углов, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой (БГУ);
А. К. Кулешов, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией (БГУ)

ВЛИЯНИЕ ZrN- И Mo-N-ПОКРЫТИЙ НА ИЗНОС ЛЕЗВИЯ НОЖА ФРЕЗЕРНОГО ИНСТРУМЕНТА ПРИ РЕЗАНИИ ДСтП

Определены параметры обработки методом КИБ лезвий ножей фрезерного инструмента, при которых период стойкости модифицированного инструмента с ZrN-покрытиями увеличивается до 50%, с Mo-N-покрытиями – до 70% по сравнению с необработанным инструментом при резании ДСтП. Износ твердосплавных лезвий ножей без обработки является абразивным. Mo-N-покрытия изменяют вид износа лезвия с механического диспергирования в сочетании с абразивным на окислительный износ при резании ламинированных ДСтП.

The parameters of the treatment by PVD of shears edges knives of a milling tool at which durability period of modified milling tool with ZrN-coatings when cutting chipboard increases to 50%, with Mo-N-coatings – up to 70% compared with bare tool are determined. Wear shears of hard alloy knives without treatment is abrasive. Mo-N-coatings change the form of shear knife wear from mechanical dispersion in combination with abrasive to an oxidative form of wear when cutting laminated chipboard.

Введение. Развитие технологии деревообработки потребовало применения износостойкого материала при изготовлении ножей инструмента, выдерживающего большие динамические и вибрационные нагрузки. Кроме того, для обработки древесины, пропитанной антисептиками, клееной различными клеями, древеснослоистых пластиков необходимо применение режущего инструмента с ножами повышенной твердости и износостойкости, так как различные кристаллические включения и клеевая прослойка обладают значительными абразивными свойствами, быстро изнашивающими металл ножа. Поэтому наиболее подходящим материалом для инструмента, применяющегося при обработке клееной древесины, являются твердые сплавы [1].

Однако установлено, что используемый при изготовлении резца твердый сплав с высоким содержанием кобальта является достаточно хрупким материалом. Формирующиеся при резании древесностружечной плиты химически активные продукты распада (формальдегид, восковые и клеевые наполнители), а также связующие компоненты ДСтП взаимодействуют с кобальтом, инициируя процесс вырывания зерен карбида вольфрама WC из твердосплавного материала лезвия [1, 2]. В результате лезвие ножа быстро теряет свою остроту и режущую способность из-за механического удаления крупных частиц лезвия за счет абразивного действия твердых включений, присутствующих в материале ДСтП. При этом в процессе износа лезвия степень шероховатости среза плиты и количество сколов на нем заметно возрастает [2].

Поэтому определение состава материала и установление оптимальных методов обработки

лезвий ножей инструмента, направленных на улучшение его эксплуатационных свойств (прежде всего – периода стойкости), является актуальной задачей.

Износ современных дереворежущих инструментов представляет собой сложный физико-химический процесс, включающий в различных сочетаниях механическое диспергирование, тепловой износ, окислительный износ, электрохимическую коррозию, абразивный износ [1], а также оказывает существенное влияние на режимы резания инструмента и, соответственно, его период стойкости. Поэтому выяснение физической сущности износа ножей инструмента является необходимым для правильного выбора материала дереворежущего инструмента и методов его упрочнения.

Среди наиболее эффективных способов обработки поверхности твердосплавных и стальных лезвий ножей дереворежущих инструментов является метод конденсации вещества (например, тугоплавких металлов Ti, Mo, Cr, Zr и др.) из плазменной фазы в вакууме с ионной бомбардировкой поверхности (КИБ), существенно увеличивающий эксплуатационные свойства резцов [3].

В данной работе исследовалось влияние обработки методом КИБ поверхности двухлезвийных из твердого сплава (на основе WC) ножей фирмы Leitz (Германия) фрезерного инструмента путем формирования ионно-плазменных ZrN-, Mo-N-покрытий с целью повышения периода стойкости инструмента при резании ламинированных ДСтП с учетом фазового и элементного состава сформированных слоев.

Основная часть. ZrN- и Mo-N-покрытия осаждались на поверхность лезвий ножей фрез

методом КИБ на установке ВУ-1Б «Булат» на кафедре деревообрабатывающих станков и инструментов (ДОСИИ) БГТУ в два этапа – с предварительной обработкой ионами металла в вакууме 10^{-3} Па при потенциале подложки -1 кВ и последующим нанесением покрытий при токах горения дуги катода 100 А (для Zr) и 180 А (для Mo), опорном напряжении -100 В в атмосфере азота при давлении 10^{-1} Па. Температура при осаждении покрытия соответствовала $400-450^{\circ}\text{C}$. Толщина полученных покрытий не превышала $1,5$ мкм.

Для определения элементного состава сформированных слоев, видов износа обработанных лезвий ножей и их периода стойкости были проведены с помощью методов рентгеноспектрального микроанализа (РСМА), растровой и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на электронном микроскопе LEO-1455 VP фрактографические исследования морфологии режущей кромки лезвия ножа после лабораторных испытаний на кафедре ДОСИИ на многооперационном центре ROVER-B 4.35 (Италия) при резании ламинированной ДСтП толщиной 25 мм с двусторонней отделкой пластей сборной фрезой диаметром 21 мм при установленных режимах [4]. Критерием потери режущей способности реза являлось появление сколов отделки плиты.

Фазовый состав сформированных слоев исследовался методом рентгеноструктурного анализа при помощи дифрактометра ДРОН-3.0.

Объемный износ лезвия ножей определялся с помощью программы обработки СЭМ-снимков поперечных изломов ножей путем расчета площади фигуры на изображении поперечного излома, ограниченной лучами, являющимися продолжением граней лезвия и сложной линией поверхности износа кромки лезвия ножа (рис. 1). Программа позволяла с высокой точностью численно описывать линию поверхности кромки лезвия ножа на СЭМ-снимке и определять износ пропорционально относительному изменению площади фигуры на СЭМ-снимках до и после испытаний.

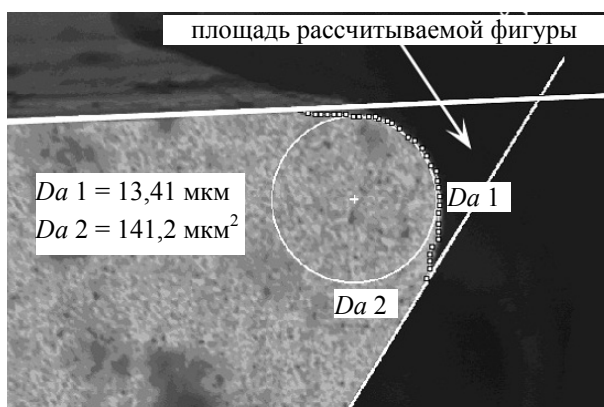


Рис. 1. Способ расчета износа лезвия ножа с помощью СЭМ-снимка излома изношенной кромки лезвия

Установлено, что полученное ZrN-покрытие состоит из нитрида ZrN, имеющего гранецентрированную кубическую структуру с текстурой (111), формирование которой обусловлено ростом зерен в направлении плазменного потока. Mo-N-покрытие содержит металл α -Mo и нитрид молибдена δ -Mo₂N.

Исследования показали, что объемный износ режущей кромки лезвия ножа с покрытием и без него имеет одинаковое неоднородное распределение по длине (рис. 2). Имеются три области: область 1 – от края кромки лезвия ножа до места крепления ножа (без износа), область 2 длиной менее 1 мм напротив мест крепления ножа с максимальным износом, область 3 основного износа, по величине меньшего, чем износ в области 2, но длиной ~ 25 мм.

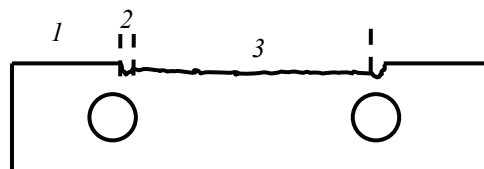


Рис. 2. Схематичное изображение распределения износа по длине кромки лезвия ножа

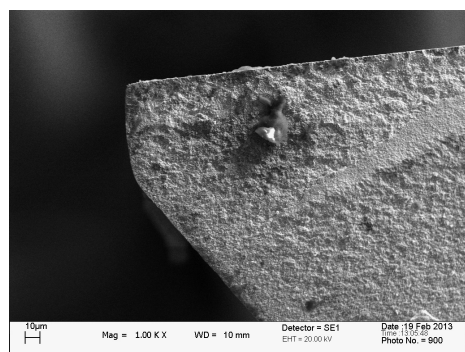
Анализ СЭМ-снимков изломов лезвия ножей после резания ДСтП (рис. 3), проведенный по сравнению радиуса закругления режущей кромки лезвия, показывает, что степень износа лезвия ножей с Mo-N-покрытием (рис. 3, в) и с ZrN-покрытием (рис. 3, б) значительно меньше, чем в случае лезвия ножей без покрытия (рис. 3, а).

Выполненные расчеты усредненного объемного износа лезвия ножей после лабораторных испытаний (таблица), показывают, что объемный износ лезвия с покрытием уменьшается до 2 раз по сравнению с лезвием без покрытия.

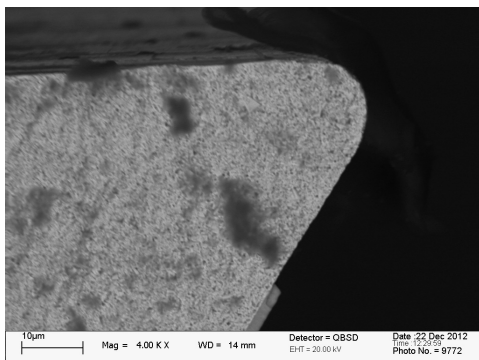
Результаты расчета объемного износа лезвия ножей после резания ламинированной ДСтП

Вид обработки	Объемный износ, 10^6 , мкм ³
Без покрытия	$2,3 \pm 0,4$
Mo-N-покрытие	$0,9 \pm 0,2$
ZrN-покрытие	$1,1 \pm 0,2$

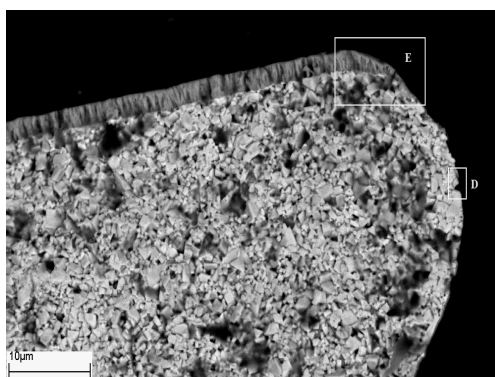
Исследование с помощью РСМА элементного состава лезвия ножей показали, что при резании ДСтП происходит истирание (механическое диспергирование) Mo-N-покрытия на лезвии и значительное окисление лезвия ножа [5]. Механическое диспергирование подтверждает СЭМ-снимок излома изношенной кромки лезвия с покрытием (область Е на рис. 3, в).



а



б



в

Рис. 3. СЭМ-снимки изломов изношенного лезвия ножа без обработки (а), модифицированного ZrN- (б) и Mo-N-покрытием (в) после резания ДСтП

На основании анализа СЭМ-снимка изношенного лезвия ножа с Mo-N-покрытием (область D на рис. 3, в) можно сделать вывод, что основным механизмом износа твердосплавного лезвия без покрытия при резании ламинированных ДСтП является выкрашивание зерен карбидов сплава по их границам (область D на рис. 3, в) – абразивный износ.

Присутствие значительной доли фазы металлического молибдена в Mo-N-покрытиях, вероятно, вызывает истирание Mo-N-покрытия за счет налипания на лезвие металлических частиц α -Mo и последующего их деформационного втирания в лезвие в области его контакта с

обрабатываемым материалом, способствующее снижению коэффициента трения при резании.

Проведенные на предприятиях ЗАО «Холдингская компания «Пинскдрев», ОАО «Минскдрев», ОАО «Борисовский ДОК» опытно-промышленные испытания модифицированных фрез при резании ламинированных ДСтП подтвердили расчетные оценки объемного износа лезвия ножей и показали, что период стойкости фрезерного инструмента с ZrN- и Mo-N-покрытиями увеличивается до 50 и 70% соответственно по сравнению с необработанным инструментом.

Заключение. Установлено, что обработанные методом КИБ ножи из твердых сплавов хвостовых фрез обеспечивают при резании ламинированных ДСтП повышение периода стойкости инструмента. Опытно-промышленные испытания модифицированных фрез подтверждают актуальность и достоверность проведенных исследований.

Mo-N-покрытия изменяют вид износа лезвия ножа с механического диспергирования в сочетании с абразивным на окислительный износ при резании ламинированных ДСтП.

Литература

1. Абрамов В. В. Износостойкость режущего инструмента при обработке композиционных материалов на древесной основе: автореф. дис. ... д-ра техн. наук: 05.21.05 / Моск. гос. ун-т леса. М., 2009. С. 9–29.
2. Моисеев А. В. Контактные явления в микрообласти лезвия при резании древесины и их влияние на природу затупления инструмента: автореф. дис. ... д-ра техн. наук: 05.03.01 / Моск. гос. ун-т леса. М., 1983. С. 15–16.
3. Эффективность применения TiN-, ZrN-, Ti-Zr-N- и Ti-покрытий на твердосплавных резаках при обработке ламинированных древесностружечных плит концевыми фрезами / А. А. Гришкевич [и др.] // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. Минск, 2008. Вып. XVI. С. 52–54.
4. Аникеев А. Ф., Гришкевич А. А. Методика проведения экспериментальных исследований по фрезерованию древесных плитных материалов на обрабатывающем центре с числовым программным управлением Rover b4.35 // Труды БГТУ. Сер. II. Лесная и деревообработка. Минск, 2007. Вып. XV. С. 213–216.
5. Особенности износа упрочненных методом КИБ лезвий ножей дереворежущего фрезерного инструмента при обработке ДСтП / А. А. Гришкевич [и др.] // Современные методы и технологии создания и обработки материалов: сб. материалов VII Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 19–21 сент. 2012 г.: в 2 кн. / Нац. акад. наук Беларуси, Физ.-техн. ин-т. Минск, 2012. Кн. 2. С. 297–303.

Поступила 27.02.2014

УДК 539.213.2

В. К. Долгий, кандидат физико-математических наук, ассистент (БГТУ);
А. Е. Почтенный, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДсорбЦИОННО-РЕЗИСТИВНОГО ОТКЛИКА В СЕНСОРНЫХ СЛОЯХ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Предложенная теоретическая модель адсорбционно-резистивного отклика примесного органического полупроводника при сопоставлении с экспериментальными данными позволила установить механизм сенсорного отклика на диоксид азота пленок ионно-легированного фталоцианина меди. Показано, что ионно-имплантированная примесь увеличивает сенсорный отклик, если электронные состояния этой примеси располагаются по шкале энергий ниже собственных, а состояния регистрируемого газа – между собственными и состояниями ионно-имплантированной примеси. Установлено, что максимальный сенсорный отклик наблюдается при концентрации ионно-имплантированной примеси, соответствующей переходу от собственной к примесной проводимости примесного органического полупроводника.

The proposed theoretical model of adsorption-resistive response of organic impurity in semiconductors, when compared with experimental data, allowed to establish the mechanism of the touch response to nitrogen dioxide films of ion-doped copper phthalocyanine. It is shown that the ion-implanted impurity increases touch response, if the electronic states of the impurity distribution rely on the energy scale below their own, and the state of the recorded gas – between its own states and ion-implanted impurity. Found that the maximum touch response observed at a concentration of ion-implanted impurity corresponding to the transition from private to extrinsic impurity organic semiconductor.

Введение. Многие органические полупроводники, например металлфталоцианины [1], под воздействием газовой среды изменяют свои электрофизические характеристики, в частности удельную проводимость, что позволяет использовать пленки таких материалов как чувствительные элементы сенсоров газового анализа. Чувствительность этих сенсоров во многом определяется их исходными электрическими и сорбционными свойствами, которые могут быть оптимизированы ионно-лучевой обработкой [2]. Ионное легирование вызывает не только изменение проводимости пленок фталоцианинов в вакууме, но и изменения адсорбционно-резистивного отклика пленок на присутствие адсорбируемого газа.

Целью данной работы является выяснение механизма влияния примеси (например, ионно-имплантированной) на чувствительность сенсорных слоев органических полупроводников.

Основная часть. На рис. 1 представлена кинетика сенсорного отклика пленок фталоцианина меди на подложках из диоксида кремния с нагревателем, терморезистором и двумя системами электродов растрового типа, которые имплантировались ионами платины с энергией 15 кэВ в интервале доз от 10^{12} до 10^{13} см⁻² на диоксид азота при температуре 80°C.

Как показывает рис. 1, ионная имплантация увеличивает относительную чувствительность пленок фталоцианина при малых дозах ионно-имплантированной примеси. По мере увеличения дозы имплантируемой примеси относительная чувствительность уменьшается и ста-

новится меньше, чем у исходной пленки. При этом расхождение значений относительной чувствительности для образцов одной серии также уменьшается и при дозе 10^{13} см⁻² достигает 10%.

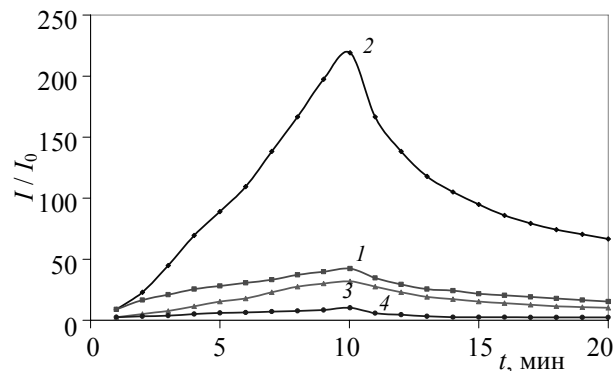


Рис. 1. Кинетика сенсорного отклика ионно-легированного платиной фталоцианина меди на диоксид азота при температуре 80°C:
 1 – исходная пленка; 2 – при $\Phi = 10^{12}$ см⁻²;
 3 – при $\Phi = 5 \cdot 10^{12}$ см⁻²; 4 – при $\Phi = 10^{13}$ см⁻²

С целью определения механизма влияния примеси на чувствительность сенсорных слоев органических материалов было выполнено моделирование адсорбционно-резистивного отклика с помощью теоретической модели прыжковой проводимости [3], расширенной на случай наличия двух типов примесей (ионно-имплантированной и регистрируемого газа).

При этом проводимость будет определяться как собственными центрами локализации, так и

центрами локализации, обусловленными введенными примесями.

Удельные проводимости σ_i каждой системы электронных энергетических уровней с номерами i и радиусами локализации электронов a_i можно представить как

$$\sigma_i = (\sigma_{03})_i \exp\left(-\frac{\alpha}{a_i n_i^{1/3}} - \frac{E_{ai}}{kT}\right), \quad (1)$$

где $(\sigma_{03})_i$ – постоянные, зависящие от радиуса локализации; $\alpha = 1,73$ – перколяционная константа; n_i – концентрации центров локализации, соответствующие различным электронным энергетическим уровням; E_{ai} – энергии активации соответствующих этим уровням проводимостей.

Величины E_{ai} определяются соотношениями

$$E_{ai} = \frac{0,99e^2 n_i^{1/3}}{4\pi\epsilon_0\epsilon}. \quad (2)$$

Тогда удельная проводимость материала, содержащего примеси, будет равна

$$\sigma = \sum_{i=1}^{i=N} \sigma_i, \quad (3)$$

а наблюдаемая экспериментально энергия активации проводимости определяется как

$$E_a = \frac{\sum_{i=1}^{i=N} E_{ai} \sigma_i}{\sum_{i=1}^{i=N} \sigma_i}. \quad (4)$$

Концентрации центров локализации должны быть связаны между собой соотношением

$$n = n_1 + n_2 + n_3 = \text{const}, \quad (5)$$

где n – полная концентрация центров локализации, равная концентрации собственных центров локализации в материале без примесей; n_1 – концентрация центров локализации, соответствующая собственным состояниям; n_2 – концентрация ионно-имплантированной примеси; n_3 – концентрация регистрируемого газа.

Выразив относительные концентрации ионно-имплантированной примеси x и регистрируемого газа z через полную концентрацию центров локализации как

$$z = \frac{n_3}{n}; \quad x = \frac{n_2}{n} \quad (6)$$

и решая совместно систему уравнений (5)–(6), получим

$$n_1 = n(1 - x - z); \quad n_2 = nx; \quad n_3 = nz. \quad (7)$$

Тогда удельная проводимость материала с примесями и наблюдаемая экспериментально

энергия активации проводимости будут определяться по формулам:

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3; \quad (8)$$

$$E_a = \frac{E_{a1}\sigma_1 + E_{a2}\sigma_2 + E_{a3}\sigma_3}{\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3}.$$

Предположим, что энергетические уровни ионно-имплантированной примеси и регистрируемого газа расположены в области собственных электронных состояний фталоцианина (рис. 2).

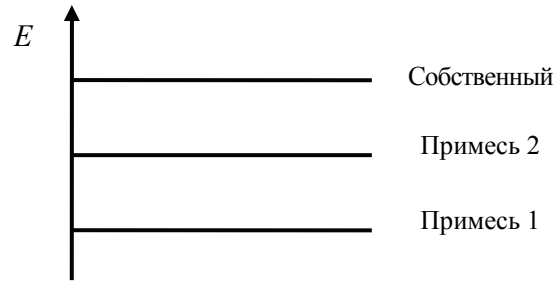


Рис. 2. Расположение энергетических уровней

Для расчетов использовались значения концентрации $n = 2,15 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$ и радиусов локализации электронов, соответствующих собственным, ионно-имплантированным (примесь 1) и регистрируемым газом (примесь 2) электронным состояниям, равные $a_1 = 0,425 \text{ нм}$, $a_2 = 0,39 \text{ нм}$, $a_3 = 0,42 \text{ нм}$. Для построения зависимости проводимости от относительной концентрации x значение z принималось равным 0,1.

Результаты расчетов проводимости и относительной чувствительности, которая определялась как отношение проводимости в присутствии регистрируемого газа к проводимости без газа, представлены на рис. 3 и 4.

Как показывает рис. 4, увеличение относительной чувствительности в 12 раз происходит при относительной концентрации ионно-имплантированной примеси, составляющей 42%.

Интерпретация полученного результата может быть осуществлена на основе теоретической модели прыжковой проводимости с использованием рис. 3.

При расположении энергетических уровней регистрируемого газа и ионно-имплантированной примеси в области собственных электронных состояний фталоцианина, перенос электронов должен осуществляться по общей схеме собственных и примесных центров локализации, что и наблюдается на рис. 3. При значении относительной концентрации ионно-имплантированной примеси, составляющей 42%, происходит переход от примесной проводимости к собственной.

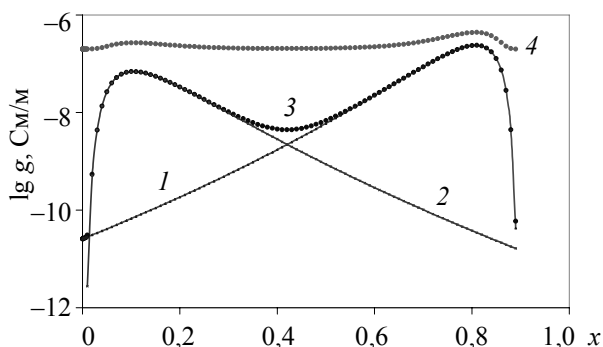


Рис. 3. Зависимость проводимости от относительной концентрации ионно-имплантированной примеси: 1 – с учетом только собственных состояний; 2 – с учетом только примесных состояний; 3 – без учета регистрируемого газа; 4 – с учетом регистрируемого газа

При дальнейшем увеличении концентрации ионно-имплантированной примеси наблюдается только уменьшение относительной чувствительности.

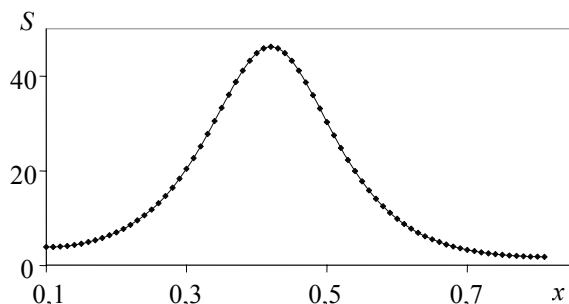


Рис. 4. Зависимость относительной чувствительности от относительной концентрации ионно-имплантированной примеси при $a_1 = 0,425$ нм; $a_2 = 0,39$ нм; $a_3 = 0,42$ нм

В случае когда энергетические уровни ионно-имплантированной примеси не перекрываются с собственными электронными состояниями фталоцианина, перенос электронов должен осуществляться по одному из двух каналов – по собственным либо примесным локализованным состояниям, одно из которых вследствие экспоненциальной зависимости электропроводности от концентрации центров локализации является экспоненциально преобладающим. Тогда относительная чувствительность при увеличении концентрации ионно-имплантированной примеси должна монотонно убывать. Для расчетов использовались значения $a_1 = 0,425$ нм, $a_2 = 0,22$ нм,

$a_3 = 0,42$ нм. Результаты расчетов представлены на рис. 5.

Заключение. Предложена теоретическая модель адсорбционно-резистивного отклика примесного органического полупроводника. Сопоставление расчетов по предложенной модели с экспериментальными данными позволило установить механизм сенсорного отклика на диоксид азота пленок ионно-легированного фталоцианина меди.

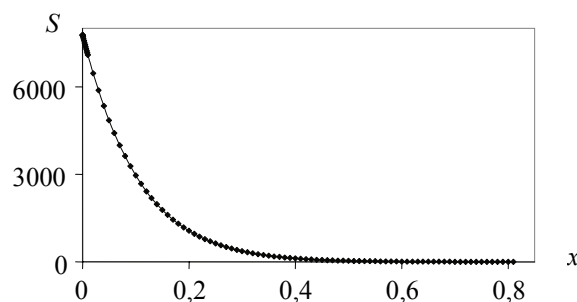


Рис. 5. Зависимость относительной чувствительности от относительной концентрации ионно-имплантированной примеси при $a_1 = 0,425$ нм; $a_2 = 0,22$ нм; $a_3 = 0,42$ нм

Показано, что ионно-имплантированная примесь увеличивает сенсорный отклик, если электронные состояния этой примеси располагаются по шкале энергий ниже собственных, а состояния регистрируемого газа – между собственными и состояниями ионно-имплантированной примеси. Установлено, что максимальный сенсорный отклик наблюдается при концентрации ионно-имплантированной примеси, соответствующей переходу от собственной к примесной проводимости примесного органического полупроводника.

Литература

1. Wright J. D. Gas adsorption and conductivity of phthalocyanines // Progress in surface science. 1989. Vol. 31. P. 1–60.
2. Pochtenny A. E., Fedoruk G. G., Pyushonok I. P., Misevich A. V. The modified metall-phthalocyanines: Electron transport mechanism and gas sensing properties // Electron Technology. 2000. Vol. 33, No. 1/2. P. 145–152.
3. Почтенный А. Е., Мисевич А. В. Влияние адсорбированного кислорода на проводимость пленок фталоцианина свинца // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29, № 1. С. 56–61.

Поступила 27.02.2014

УДК 537.633.2

В. Р. Мадьяров, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)**СВЧ-ДИАГНОСТИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ
НА ОСНОВЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА**

На основе решения кинетического уравнения Больцмана получено выражение для холловской подвижности в СВЧ-области через параметры зонной структуры полупроводника. Показано, что независимо от поперечных размеров образца холловскую подвижность можно определить, измерив проводимости плоского полупроводникового образца в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Экспериментальная проверка расчета диэлектрической проницаемости согласно кинетической модели проводилась на СВЧ-интерферометре в области частот 30–80 ГГц по измерению фазового сдвига зондирующего излучения. Получено удовлетворительное соответствие между результатами расчета с использованием энергетической зависимости времени релаксации $\tau \sim (W/kT)^{-1/2}$ и экспериментальными данными для образца *n*-Ge.

On the basis of solution of Boltzmann kinetic equation the relation was obtained between Hall mobility in the VHF region and semiconductor energy band parameters. It is shown that irrespective of the sample lateral dimensions the Hall mobility can be found by measuring semiconductor sample conductivity in orthogonally related directions. Dielectric permeability calculations according to the kinetic model were verified experimentally using VHF interferometer in the range of 30–80 GHz by phase shift measurements of probing radiation. The calculated results for the *n*-Ge thin sample were found to be in satisfactory agreement with experimental data provided that relaxation time dependence of the type $\tau \sim (W/kT)^{-1/2}$ was used.

Введение. Методы СВЧ-диагностики полупроводников позволяют определить проводимость и подвижность носителей заряда [1, 2], а также такие фундаментальные параметры электронного переноса, как эффективную массу [3] и время релаксации τ , которое можно определить из частотной зависимости фазового сдвига в области частот ω , где значение параметра $\omega\tau \sim 1$ [4].

Применение упрощенной модели переноса заряда показало возможность оценки времени релаксации из измерений диэлектрической проницаемости [4]. Результативность применения СВЧ-метода измерений параметров электронного переноса в полупроводниках можно повысить, используя более фундаментальный подход к обработке данных измерений. В настоящей работе предлагается модель переноса носителей заряда с применением кинетического уравнения Больцмана для холловских измерений и измерений времени релаксации с помощью СВЧ-интерферометрии. Последние оказываются предпочтительнее, если требуется сравнительно невысокая точность измерений, так как отпадает необходимость создания достаточно сильного продольного магнитного поля в области образца.

Основная часть. Схема холловских СВЧ-измерений представлена на рис. 1. Электромагнитная волна с напряженностью электрического поля E_x , выходящая из секции волновода 1, возбуждает в образце, помещенном в магнитное поле с индукцией B , холловское поле E_y . Колебания E_y после прохождения волновода 3 регистрируются датчиком 4. Волновод 2 при-

меняется для регистрации фазы или амплитуды прошедшей волны. Электрические поля E_x и E_y возбуждают токи в образце, которые можно выразить через параметры электронного переноса.

Для описания переноса носителей заряда под действием электрического поля волны используется уравнение Больцмана для функции распределения носителей заряда по энергии $f(W)$ в пространстве волновых векторов k , которое в приближении сферических энергетических долин имеет вид

$$e[\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}] \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_k f(\vec{k}, \vec{r}) = -\frac{f - f_0}{\tau}. \quad (1)$$

где e – элементарный заряд; \vec{E} – локальная напряженность электрического поля волны с частотой ω , $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\omega t}$; \vec{v} – скорость дрейфа носителей; \vec{B} – магнитная индукция; f_0 – равновесная часть функции распределения; τ – время релаксации.

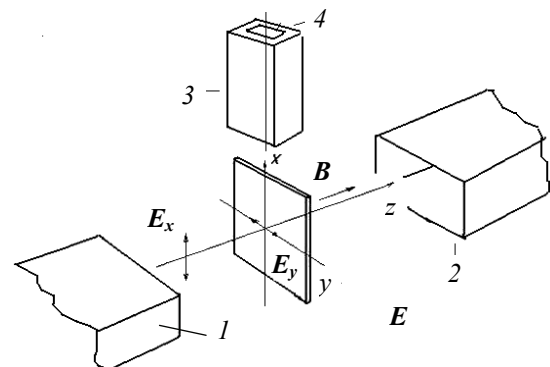


Рис. 1. Схема холловских СВЧ-измерений

Для решения уравнения (1) использовалась подстановка [5]:

$$f = f_0 - \bar{v} \cdot \bar{\psi} \frac{\partial f_0}{\partial W}. \quad (2)$$

Решение (1) позволяет найти проекции вектора $\bar{\psi}$, входящего в (2), через проекции E_x и E_y :

$$\begin{aligned} \psi_x &= \frac{\tau' e [E_x + (\omega_c \tau') E_y]}{1 + (\omega_c \tau')^2}, \\ \psi_y &= \frac{\tau' e [-(\omega_c \tau') E_x + E_y]}{1 + (\omega_c \tau')^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\omega_c = eB / m^*$ – циклотронная частота, m^* – эффективная масса носителя заряда.

Плотность тока носителей заряда, которая определяется неравновесной частью функции распределения (2), находится путем интегрирования по всем зонам Бриллюэна:

$$\bar{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int \bar{v} (\bar{v} \cdot \bar{\psi}) \frac{\partial f_0}{\partial W} dV_k, \quad (4)$$

где dV_k – элемент объема в \bar{k} -пространстве.

Подстановка (2) в (3) приводит к следующим уравнениям для проекций плотности тока проводимости j_x и j_y :

$$\left(1 - i \frac{e^2}{\varepsilon_0 \omega} L_1\right) j_x + i \frac{e^2}{\varepsilon_0 \omega} L_2 j_y = e^2 L_1 E_x + e^2 L_2 E_y; \quad (5)$$

$$i \frac{e^2}{\varepsilon_0 \omega} L_2 j_x + \left(1 - i \frac{e^2}{\varepsilon_0 \omega} L_2\right) j_y = -e^2 L_2 E_x + e^2 L_2 E_y,$$

где коэффициенты L_1 и L_2 для невырожденного полупроводника усредняются по k -й энергетической долине:

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_k \frac{n_k}{m_k^*} \int_0^\infty \frac{\tau(x)}{1 + [\omega_{ck} \tau(x)]^2} x^{3/2} e^{-x} dx; \\ L_2 &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sum_k \frac{n_k \omega_{ck}}{m_k^*} \int_0^\infty \frac{\tau^2(x)}{1 + [\omega_{ck} \tau(x)]^2} x^{3/2} e^{-x} dx; \quad (6) \\ x &= \frac{W}{kT}. \end{aligned}$$

Интегрирование в (6) проводится по всем энергетическим долинам, m_k^* и n_k – эффективные массы и концентрации носителей в k -й долине. При получении формул (5) полагалось, что f_0 является функцией Максвелла – Больцмана.

Из уравнений (6) следуют соотношения между проекциями суммарной плотности тока (тока проводимости и смещения) и напряженности электрического поля:

$$j_x = \sigma_x E_x - \sigma_y E_y + \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t}; \quad (7)$$

$$j_y = -\sigma_y E_x + \sigma_x E_y + \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t},$$

где σ_x и σ_y – удельные проводимости в направлениях x и y соответственно:

$$\sigma_x = i \varepsilon_0 \omega \left(1 - \frac{\alpha}{\alpha^2 - \beta^2}\right); \quad \sigma_y = \varepsilon_0 \omega \frac{\beta}{\alpha^2 - \beta^2}. \quad (8)$$

В формулах (8) $\alpha = 1 - i \varepsilon_0 \omega L_1$, $\beta = (e^2 / \varepsilon_0 \omega) L_2$.

Для слабых магнитных полей слагаемым $\omega_c \tau$ в формулах (6) можно пренебречь. Тогда используя (7) и (8), можно получить следующее выражение для холловской подвижности:

$$\mu_H = \frac{1}{B} \frac{|\sigma_y|}{\text{Re}(\sigma_x)}. \quad (9)$$

Из формулы (9) следует, что для определения холловской подвижности достаточно измерить проводимость образца в направлении, лежащем в плоскости колебаний электрического поля зондирующей волны (σ_x), и в направлении, перпендикулярном к нему (σ_y). Если предположить, что время релаксации одинаково для всех энергетических долин, то из формул (5)–(7) можно получить выражение для μ_H :

$$\mu_H = e \left\langle \frac{\tau^2}{(1 + i\omega\tau)^2} \right\rangle \left\langle \frac{\tau}{1 + i\omega\tau} \right\rangle^{-1} \left(\sum_k \frac{n_k}{m_k^*} \right)^{-1}. \quad (10)$$

В формуле (10) усреднение проводится по одной из энергетических долин.

Если время релаксации не зависит от энергии носителей, т. е. $\tau = \tau_0$, то μ_H не зависит от частоты электрического поля падающей волны, так как в этом случае из (10) следует:

$$\mu_H = e \tau_0 \sum_k \frac{n_k}{m_k^*} \left(\sum_k \frac{n_k}{m_k^*} \right)^{-1}. \quad (11)$$

Оценить зависимость τ от энергии носителей можно по частотной зависимости $\mu_H(\omega\tau)$ в области частот, где $\omega\tau \sim 1$. На рис. 2 представлены расчетные зависимости отношения μ_H к подвижности на постоянном токе, $\mu_H(\omega\tau) / \mu_H(0)$, для n -Ge в предположении зависимостей $\tau = \tau_0 (W / kT)^{-1/2}$ и $\tau = \tau_0 (W / kT)^{-1}$ ($\tau_0 = \text{const}$) с использованием формулы (11).

При $B = 0$ из кинетических соотношений можно получить выражение для диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon = \varepsilon_{\text{ст}} \frac{1}{1 + [\varepsilon_0 \omega / e^2 L(\omega)]^2}, \quad (12)$$

где $\epsilon_{ст}$ – диэлектрическая проницаемость на постоянном токе;

$$L(\omega) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left\langle \frac{\tau}{1+i\omega\tau} \right\rangle \sum_k \frac{n_k}{m_k^*}$$

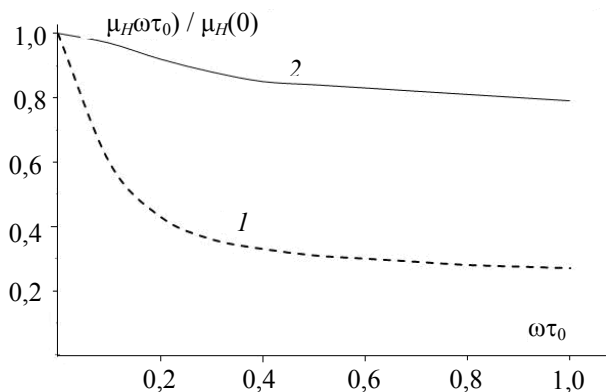


Рис. 2. Сравнение расчетных зависимостей холловской подвижности для n -Ge от параметра $\omega\tau_0$ ($\tau_0 = 3 \cdot 10^{-12}$ с) с использованием зависимости: $1 - \tau \sim (W/kT)^{-1}$; $2 - \tau \sim (W/kT)^{-1/2}$

Экспериментальная проверка формулы (12) для ϵ проводилась на СВЧ-интерферометре с помощью метода фазовой компенсации [4] в области частот 30–80 ГГц для n -Ge. Результаты представлены на рис. 3.

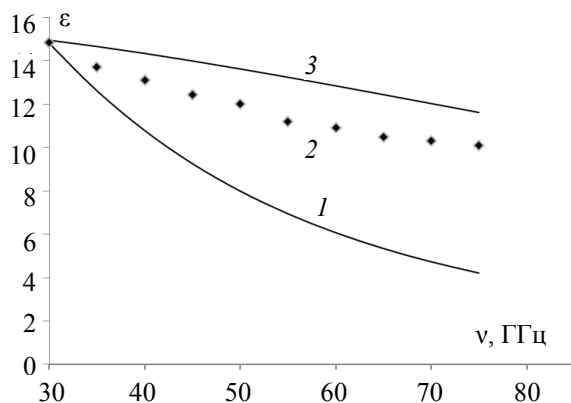


Рис. 3. Сравнение расчетных и измеренных зависимостей диэлектрической проницаемости от частоты:

1 – расчет, $\tau \sim (W/kT)^{-1/2}$; 2 – эксперимент, n -Ge, $n = 5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$, 12 См/м ; 3 – расчет, $\tau \sim (W/kT)^{-1}$

Данные для диэлектрической проницаемости в исследуемой частотной области удовлетворительно согласуются с расчетными кривыми, полученными с использованием формулы (12) для энергетических зависимостей $\tau \sim (W/kT)^{-1}$ (1) и $\tau \sim (W/kT)^{-1/2}$. Первая из кривых получена в предположении, что основным механизмом, влияющим на время релаксации, является рассеяние на акустических колебаниях решетки. С учетом того что в зоне проводимости герма-

ния энергетические поверхности представлены восемью эллипсоидами, для расчетов использовалось значение суммы:

$$\sum_k \left(\frac{n_k}{m_k^*} \right) = \left(\frac{n}{3} \right) \left(\frac{2}{m_{||}} + \frac{1}{m_{\perp}} \right). \quad (13)$$

В формуле (13) n – суммарная концентрация электронов; $m_{||}$ и m_{\perp} – продольная и поперечная эффективные массы электронов ($m_{||} = 0,082 m_0$, $m_{\perp} = 1,59 m_0$).

Заметное отклонение экспериментальных данных от расчетной кривой, очевидно, обусловлено дополнительными механизмами рассеяния электронов – рассеянием на ионах и атомах примесей и дислокациях.

Заключение. На основе решения кинетического уравнения Больцмана получены выражения для холловской подвижности и диэлектрической проницаемости в СВЧ-области через параметры зонной структуры полупроводника. Холловскую подвижность можно определить, измерив проводимости плоского полупроводникового образца в двух взаимно перпендикулярных направлениях.

Экспериментальная проверка показала удовлетворительное соответствие результатов расчета диэлектрической проницаемости по кинетической модели и измерений фазового сдвига в области частот 30–80 ГГц для образца n -Ge. Путем сравнения данных измерений диэлектрической проницаемости ϵ в области частот $\omega\tau \sim 1$ с расчетной частотной характеристикой $\epsilon(\omega)$ дана оценка энергетической зависимости времени релаксации носителей в образце.

Литература

1. Broadband complex permittivity measurement techniques of materials with thin configuration at microwave frequencies / Murata Kenichiro [et al.] // J. Appl. Phys. 2005. Vol. 98, No. 8. P. 084107/1–084107/8.
2. Excess carrier lifetime measurement for plasma-etched GaN by the microwave photoconductivity decay method / Hideki Watanabe [et al.] // Jap. J. Appl. Phys. 2007. Vol. 46. No. 1. P. 35–39.
3. Мадьяров В. Р. Определение параметров переноса носителей заряда в полупроводниках с помощью СВЧ-зондирования // Труды БГТУ. 2012. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 88–90.
4. Мадьяров В. Р. Исследование релаксационных свойств полупроводников с помощью интерферометрии миллиметрового диапазона // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 54–56.
5. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.

Поступила 05.03.2014

УДК 539.1.06:539.23.234

О. Г. Бобрович, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);
И. С. Ташлыклов, доктор физико-математических наук, профессор (БГПУ);
В. В. Тульев, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИОННО-АССИСТИРУЕМОГО ОСАЖДЕНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ Me/Si-СТРУКТУР

Методом POP изучен элементный состав металлических (Co, Mo, W) покрытий, осажденных на (100)Si в условиях ионного (Co^+ , Mo^+ , W^+) ассистирования. Толщина покрытия увеличивается с уменьшением ускоряющего напряжения для ассистирующих ионов Co^+ , Mo^+ , W^+ от 20 до 7 кВ и зависит как от отношения плотности потока ионов J_i к плотности потока нанесенных атомов J_A (J_i/J_A), так и типа осаждаемого на Si металла. Установлено, что оптимальное отношение J_i/J_A , при котором достигается наибольшая толщина Co- и Mo-покрытий составляет 0,06, а для W-покрытия – 0,04.

By RBS elemental composition of Co, Mo, W coatings deposited on (100)Si substrate in the condition of ion (Co^+ , Mo^+ , W^+) assisting have been investigated. Thickness of the coatings are increases with the decrease of the accelerating voltage for assisting Co^+ , Mo^+ , W^+ ions from 20 to 7 kV and depends on the relationship of the flux density of ions J_i to the flux density of deposited atoms J_A (J_i/J_A) and type deposited on Si metal. It is established that the optimal ratio of J_i/J_A at which is reached the maximum thickness Co-coating and Mo-coating is 0.06 and for W-coating – 0.04.

Введение. Воздействие ионных пучков на рост пленки и ее физические свойства зависит во многом от типа иона, его энергии и отношения плотности потока ионов J_i к плотности потока нанесенных атомов J_A (J_i/J_A). При формировании металлических покрытий ионно-ассистируемым нанесением тонких пленок представляется важным исследование влияния отношения J_i/J_A на скорость роста пленки при различных условиях нанесения покрытий.

Ионно-ассистируемое нанесение металлических (Co, Mo, W) покрытий на пластины (100)Si и на предварительно подготовленные структуры металл – (100)Si (металл: Co, Mo, W) в условиях ассистирования ускоренными ионами Co^+ , Mo^+ , W^+ осуществлялось при ускоряющем напряжении $U = 7, 15$ и 20 кВ. Для этого использовали резонансный ионный источник вакуумной электродуговой плазмы, который генерирует как нейтральный поток J_A , так и ионный поток J_i частиц наносимого металла [1–3]. Отношение J_i/J_A в наших экспериментах менялось от 0,02 до 0,45, что соответствовало условиям роста покрытия на подложке [4]. При этом следует отметить, что ионно-ассистируемое нанесение металлических покрытий осуществлялось на структуры металл – Si, полученные осаждением соответствующего металла в течение 1 ч в режиме работы (пассивного нанесения) ионного источника при нулевом значении ускоряющего напряжения. В рабочей камере в процессе создания металлических покрытий поддерживался вакуум $\sim 10^{-2}$ Па. Измеренные скорости осаждения металлических покрытий были от 0,4 до 1,9 нм/мин, а плотности ионного тока менялись

от 2,5 до 20 мкА/см² в зависимости от энергии облучения и типа наносимого металла. Элементный состав исходных и модифицированных образцов проводили с применением метода Резерфордского обратного рассеяния (POP) ионов гелия с энергией $E_0 = 1,5$ МэВ и геометрией рассеяния $\theta_1 = 0^\circ$, $\theta_2 = 70^\circ$, $\theta = 110^\circ$ [5]. Энергетическое разрешение детектора составляло 15 кэВ, а глубинное разрешение в кремнии 13 нм. Для анализа толщины наносимого металлического покрытия, распределения элементов по глубине в формируемых структурах покрытие – подложка, применяли компьютерное моделирование спектров POP по программе RUMP [6].

Основная часть. Экспериментальные спектры POP ионов гелия от исходного образца Si и образцов Mo/Si, модифицированных нанесением Mo в условиях ассистирования ионами Mo^+ , показаны на рис. 1. Вертикальными стрелками отмечены номера каналов, которые связаны с энергиями рассеяния ионов гелия на атомах соответствующих элементов, локализованных на поверхности образцов Si. В числе элементов, находящихся в поверхностном слое исследуемых материалов, на спектрах идентифицируются молибден, а также S, O, Si. Сдвиг сигнала от кремния в область меньших номеров каналов на спектрах POP свидетельствует о том, что на поверхности кристалла кремния образуется покрытие. Факт осаждения металлического покрытия подтверждается также появлением сигнала в области 190–210 каналов в результате обратного рассеяния ионов гелия от атомов молибдена (спектры 1–3, рис. 1).

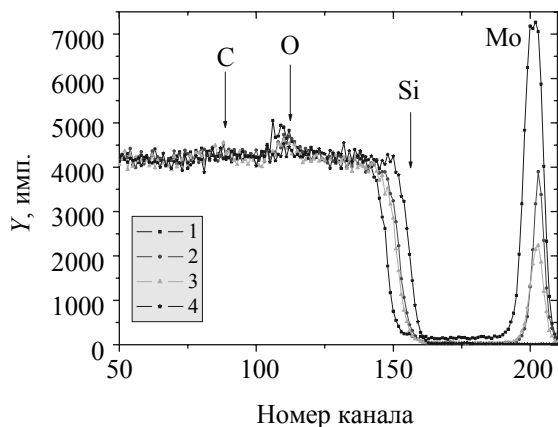
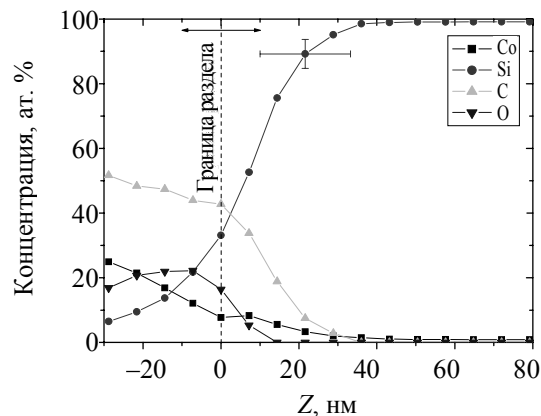


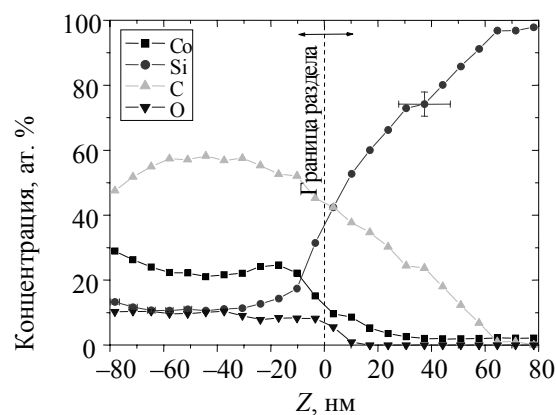
Рис. 1. Энергетические спектры ОР ионов гелия с $E_0 = 1,5$ МэВ от кристаллов (100)Si, модифицированных ионно-ассистированным нанесением молибденовых покрытий при ускоряющем напряжении:
1 – 7 кВ; 2 – 15 кВ; 3 – 20 кВ;
4 – исходный образец кремния

Факт осаждения металлического покрытия подтверждается также появлением сигнала в области 190–210 каналов в результате обратного рассеяния ионов гелия от атомов молибдена (спектры 1–3, рис. 1). Пики в области 70–120 каналов отражают появление в осаждаемых на кремний покрытиях атомов углерода и кислорода, по-видимому, из остаточной атмосферы вакуумной камеры экспериментальной установки. Качественно подобные результаты наблюдались при пассивном без ионного ассистирования и ионно-ассистированном осаждении Co- и W-покрытий на Si-подложку.

На рис. 2 приведены профили распределения элементов по глубине в образцах Co/Si, полученных в разных условиях. На представленных концентрационных профилях указана граница раздела покрытие – подложка, которая устанавливалась согласно разработанной методике введения Хе-маркера [7]. Анализ концентрационных зависимостей распределения элементов в сформированных металлических покрытиях обнаруживает их существенное различие от металла осаждаемого покрытия, а также технологических условий осаждения. При ускоряющем напряжении 7 кВ концентрация атомов Co на поверхности составляет 30 ат. %, а при 20 кВ – 25 ат. % и далее она плавно уменьшается до 10 ат. % к границе раздела покрытие – подложка. Распределение Mo и W в покрытии носит аналогичный характер. Максимальная концентрация атомов Mo на поверхности составляет 20 ат. % ($U = 7$ кВ) и плавно уменьшается до 10 ат. % к границе раздела покрытие – подложка. При $U = 20$ кВ концентрация атомов Mo уменьшается от поверхности к границе раздела покрытие – подложка от 9 до 2 ат. %.



а



б

Рис. 2. Распределение элементов по глубине в образцах Si с Co покрытием, нанесенным в условиях ионного ассистирования при ускоряющем напряжении:
а – 20 кВ; б – 7 кВ

Анализ распределения W в формируемых металлических покрытиях на кремнии обнаруживает уменьшение концентрации атомов W от поверхности покрытия к границе раздела покрытие – подложка от 20 до 2 ат. % (при $U = 7$ кВ) и от 30 до 3 ат. % (при $U = 15$ кВ).

Кислород и углерод распределены в покрытии неравномерно. Так, концентрация кислорода в Co и W покрытиях составляет 10–20 ат. %, а в Si становится ниже, чем концентрация Co и W. Распределение углерода в покрытии качественно подобно распределению в нем кислорода. Однако концентрация атомов C примерно в 2–6 раз в Co-покрытии и в 1,5–4 раза в W-покрытии выше, чем атомов O, и снижается до ~40 ат. % к границе раздела покрытие – подложка. В случае Mo-покрытий кислорода в ~4–6 раз больше, чем углерода, что может быть связано с высокой химической активностью Mo по отношению к кислороду. Кроме того, по всей толщине осаждаемого

покрытия содержит кремний с концентрацией от 10–20 ат. % у поверхности покрытия с увеличением до 40–50 ат. % к границе раздела покрытие – подложка. Наличие в покрытии кремния связано со встречной диффузией из подложки. Подобная встречная диффузия серы на поверхность из объема модифицируемой аналогичным методом резины наблюдалась ранее [8] при осаждении металлических покрытий на эластомер.

На рис. 3 представлена зависимость толщины осаждаемого покрытия от отношения J_i/J_A .

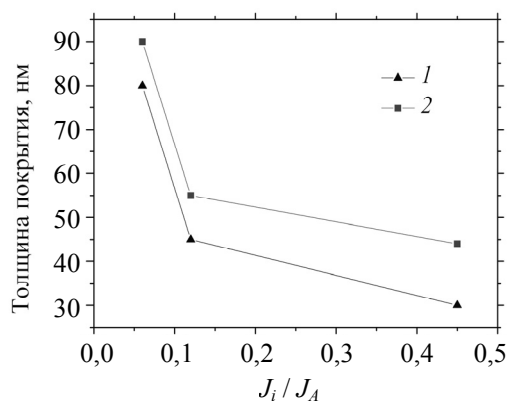


Рис. 3. Зависимость толщины осаждаемого покрытия Co от отношения J_i/J_A на подложку: 1 – Si; 2 – Co/Si

Уменьшение отношения J_i/J_A с 0,45 до 0,06 позволяет увеличить толщину наносимого на подложку Co-покрытия с 30–40 до 80–90 нм. Как видно, нанесение металлического покрытия на структуры Co/Si в режиме работы ионного источника при нулевом значении ускоряющего напряжения позволяет получить более толстые покрытия. Уменьшение ускоряющего напряжения для assisting ионного Co^+ , Mo^+ , W^+ до 7 кВ позволяет также увеличить толщину осаждаемого покрытия за счет уменьшения интенсивности процессов распыления осаждаемого покрытия.

Заключение. Методом резерфордовского обратного рассеяния установлено, что в состав получаемых на кремнии металлических покрытий входят атомы наносимого металла (Co, Mo, W), технологических примесей углерода и кислорода из вакуумной камеры, а также Si в результате встречной диффузии из подложки в покрытие. Ионно-ассистируемое нанесение со скоростью 0,4–1,9 нм/мин металлических покрытий при ускоряющем напряжении от 7 до 20 кВ позволяет получить покрытия различной

толщины, которая зависит как от отношения J_i/J_A , так и типа осаждаемого на Si металла. Установлено, что оптимальное отношение J_i/J_A , при котором достигается наибольшая толщина Co- и Mo-покрытий, составляет 0,06, а для W-покрытия – 0,04.

Литература

1. Композиционный состав и повреждение поверхности кремния ионно-ассистируемым нанесением тонких пленок / И. С. Ташлыков и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 5. С. 92–95.
2. Тульев В. В., Ташлыков И. С. Изучение композиционного состава покрытий на основе Cr, Ti и Zr, сформированных на алюминии и кремнии методом ионно-ассистируемого нанесения в условиях саморадиации // Радиационно-термические эффекты и процессы в неорганических материалах: труды IV Междунар. науч. конф., Томск, 12–19 авг. 2004 г. / Томский политехн. ун-т. Томск, 2004. С. 92–95.
3. Carter G., Colligon J., Tashlykov I. S. A simple theory and experimental investigation of ion assisted deposition of cobalt on silicon // J. of Advanced Materials. 1999. Vol. 5, No. 1. P. 1–6.
4. Hirvonen J. K. Ion beam assisted thin film deposition: Fundamentals and Applications of IBAD Processing // Materials and Processes for Surface and Interface Engineering / Y. Pauleau (ed.). Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1995. P. 307–346.
5. Комаров Ф. Ф., Кумахов М. А., Ташлыков И. С. Неразрушающий анализ поверхностей твердых тел ионными пучками. – Минск: Университетское, 1987. 256 с.
6. Doolittle L. R. A semiautomatic algorithm for Rutherford backscattering analysis // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 1986. Vol. B15. P. 227–234.
7. Бобрович О. Г., Ташлыков И. С., Глухаренко Т. И. Изучение границы раздела фаз в структуре Ti – Si с применением Хе маркера // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2005. Вып. XIII. С. 90–92.
8. Тульев В. В., Верес О. Г., Ташлыков И. С. Исследование структуры и химических связей в покрытиях на основе W, полученных на эластомере методом ионно-ассистируемого осаждения // Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы 7-й Междунар. конф., Минск, 26–28 сент. 2007 г. / Белорус. гос. ун-т. Минск, 2007. С. 338–340.

Поступила 27.02.2014

УДК 539.1.06:539.23.234

В. В. Тульев, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);
И. С. Ташлыков, доктор физико-математических наук, профессор (БГПУ);
Д. А. Литвинов, студент (БГТУ)

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ОСАЖДЕНИЯ НА ТОЛЩИНУ МОДИФИЦИРОВАННОГО СЛОЯ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ АТОМНОМ ПЕРЕМЕШИВАНИИ Pd/Fe-СТРУКТУР

Методом Резерфордского обратного рассеяния ионов гелия в сочетании с компьютерным моделированием определено, что при осаждении Pd-покрытия на железо методом динамического атомного перемешивания, в котором в качестве ассистирующих ионов использовались ионы Ar^+ с энергией 6 кэВ, и интегральными потоками $(0,7-1,6) \cdot 10^{16}$ ион/см² формируется Pd-пленка толщиной $\sim(14-23)$ нм. Установлено, что толщина сформированного покрытия зависит от параметра I/A (отношение числа I ассистирующих ионов к числу A атомов осаждаемого покрытия). При расчете толщины пленки необходимо учитывать помимо распыления ассистирующими ионами атомов покрытия также распыление атомов подложки.

Rutherford backscattering and RUMP simulation programmer have been applied to investigate composition of Pd/Fe system prepared using dynamic atomic deposition process when deposition of Pd thin film on Fe (99,5%) substrate was assisted with 6 keV Ar^+ ions irradiation. The thickness of Pd film was $\sim(14-23)$ nm. It was found, that the thickness of coating depends on parameter I/A (ratio the number I of assisting ions to the number A atoms deposited coating).

Введение. Ионно-лучевые методы модифицирования структуры и свойств приповерхностных слоев материалов и изделий достаточно широко исследуются и применяются в последние десятилетия [1–4]. Эти методы позволяют изменять структуру и состав поверхности материалов; формировать слой с повышенными физико-механическими, физико-химическими и другими свойствами; получать сплавы и соединения, состав которых невозможно получить традиционными способами, и т. д. [1–6].

На структуру и свойства приповерхностных слоев материалов, модифицированных ионно-лучевыми методами, влияют разнообразные факторы: природа атомов подложки, покрытия, и сопутствующих примесей, плотность ионного тока, скорость и время осаждения покрытий, энергия и интегральный поток ассистирующих ионов, коэффициенты распыления покрытия и подложки и др. [1–5]. В данной работе изучалось влияние параметра I/A (отношение плотности потока I ассистирующих ионов к плотности потока A атомов осаждаемого покрытия) на толщину покрытия, сформированного методом динамического атомного перемешивания (ДАП). В этом методе процесс осаждения покрытий на подложку сопровождается облучением ионами инертного газа.

Основная часть. В качестве подложки использовалось железо чистотой 99,5%. На нее наносилось палладиевое покрытие методом динамического атомного перемешивания. Скорость осаждения покрытия r составляла $(0,130 \pm 0,005)$ нм/с, время осаждения покрытия – (130 ± 2) с. Толщина покрытия, осаждаемого на подложку без ионного ассистирования,

составляла $(19,8 \pm 1,1)$ нм. В качестве ассистирующих ионов использовались ионы аргона с энергией 6 кэВ. Диаметр ионного пучка составлял ~ 10 см. Плотность тока j в центре ионного пучка была равна $(20,2 \pm 0,2)$ мкА/см². По мере удаления от центра пучка плотность ионного тока уменьшалась. Зависимость плотности j ионного тока от расстояния до центра ионного пучка представлена на рис. 1.

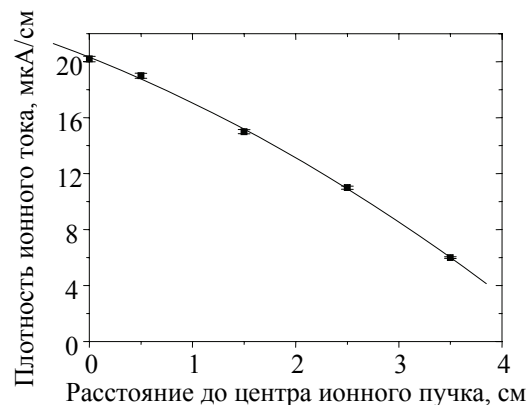


Рис. 1. Зависимость плотности ионного тока от расстояния до центра ионного пучка

Изменение плотности тока в ионном пучке приводит к тому, что интегральный поток (Φ) ассистирующих ионов аргона в пределах ионного пучка изменяется от $0,7 \cdot 10^{16}$ до $1,6 \cdot 10^{16}$ ион/см². Используя плотность ионного тока и скорость осаждения покрытия по формуле (1), можно рассчитать параметр I/A :

$$\frac{I}{A} = \frac{1}{F} \frac{j}{r} \frac{M}{\rho}, \quad (1)$$

где F – постоянная Фарадея; j – плотность ионного тока; r – скорость осаждения покрытия; M – молярная масса палладия; ρ – плотность палладия.

Расчеты показали, что используемый ионный пучок позволяет изменять параметр I/A в интервале от 0,04 до 0,12 (рис. 2).

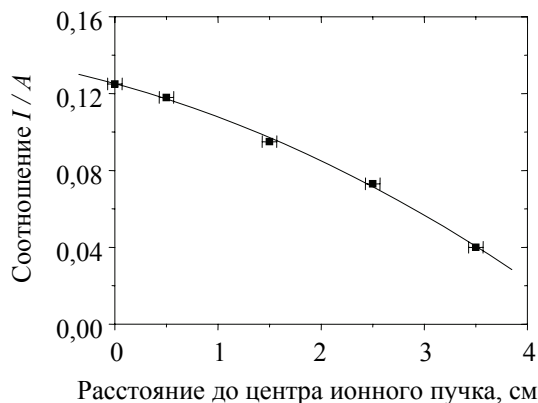


Рис. 2. Зависимость параметра I/A от расстояния до центра ионного пучка

При расчете толщины осажденного покрытия учитывались интегральные потоки ассистирующих ионов и нейтральных атомов, а также распыление атомов покрытия:

$$d = d_0 \left(1 - S \left(\frac{I}{A} \right) \right), \quad (2)$$

где d_0 – толщина покрытия, получаемого при осаждении без ионного ассистирования; S – коэффициент распыления атомов палладия ионами аргона.

С использованием формулы (2) была рассчитана толщина d палладиевого покрытия, которое должно сформироваться на подложке из железа при определенном значении параметра I/A . Данные представлены на рис. 3.

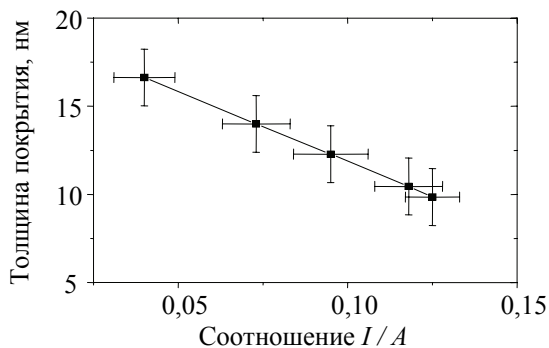


Рис. 3. Расчетная толщина d покрытия в зависимости от параметра I/A

Элементный состав, распределение компонентов по глубине и толщина покрытия определялись методом резерфордовского обратного

рассеяния (РОР) ионов гелия в сочетании с компьютерным моделированием. Энергия ионов гелия составляла 2 МэВ, угол влета 0° , угол вылета 15° , угол рассеяния 165° . Энергетическое разрешение анализирующей системы равнялось 15 кэВ, что обеспечивало разрешение по глубине ~ 11 нм. Моделирование экспериментальных спектров резерфордовского обратного рассеяния выполнялось с использованием программы RUMP [7]. Исследуемый образец представлял собой пластину длиной 4 см. Спектры РОР снимались в четырех различных точках образца: на расстоянии 0,5, 1,5, 2,5 и 3,5 см от края пластины (при осаждении покрытия один край образца располагался под центром ионного пучка). Это позволило анализировать распределение компонентов по глубине в покрытии, полученном при различных потоках ассистирующих ионов (при различных значениях параметра I/A).

Экспериментальный спектр РОР ионов гелия от структуры Pd/Fe, сформированной при интегральном потоке ассистирующих ионов $\Phi = 0,7 \cdot 10^{16}$ ион/см² ($I/A = 0,12$), показан на рис. 4.

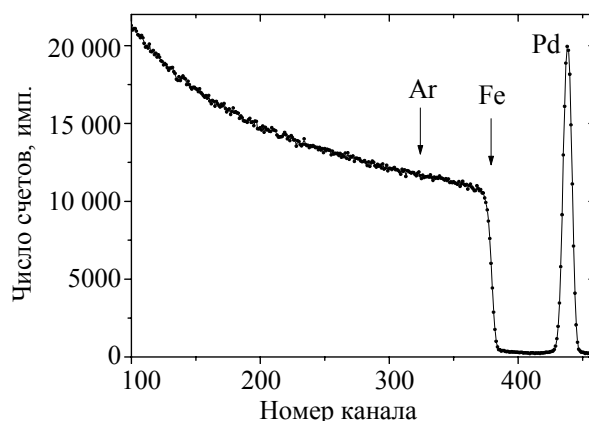


Рис. 4. Спектр РОР ионов гелия от структуры Pd/Fe, полученной при интегральном потоке ассистирующих ионов $\Phi = 0,7 \cdot 10^{16}$ ион/см²

На спектре РОР, полученного от сформированной Pd/Fe-структуры (рис. 4), мы наблюдаем сигналы от атомов подложки железа, атомов осаждаемого покрытия палладия и аргона.

На основе данных РОР с применением компьютерного моделирования RUMP [7] были построены концентрационные профили компонентов Pd/Fe-структуры, полученной при различных значениях параметра I/A (рис. 5). Используя методику [5], по концентрационным профилям экспериментально определили толщину покрытия, сформированного при различных значениях параметра I/A . Сравнительные данные приведены на рис. 6.

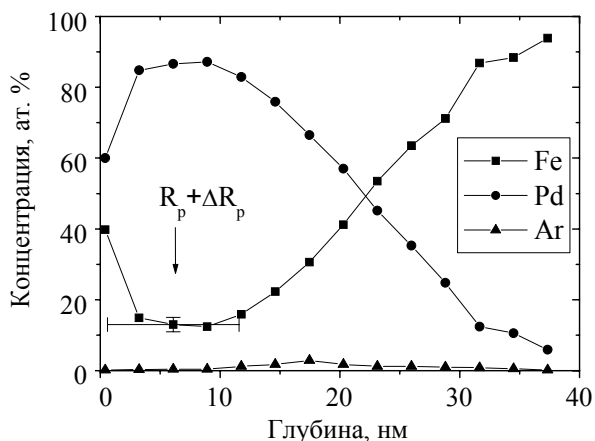


Рис. 5. Профили распределения компонентов по глубине в Pd/Fe-структуре, полученной при параметре $I/A = 0,073$

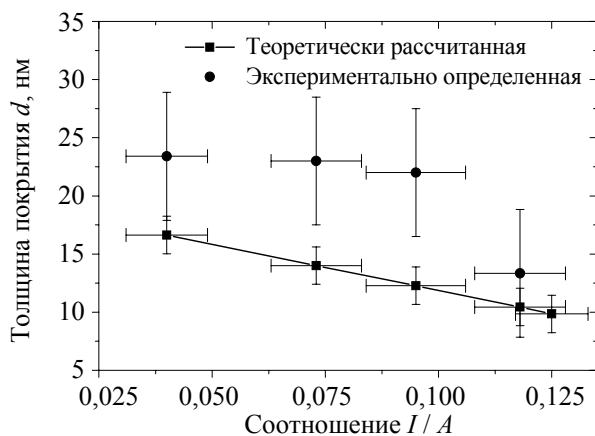


Рис. 6. Толщина покрытия в зависимости от параметра I/A

Из рис. 6 видно, что при значениях параметра $I/A = 0,04-0,10$ экспериментально определенная толщина покрытия выше рассчитанной толщины, а при значениях $I/A < 0,10$ сравнима в пределах погрешности с рассчитанной. Так как при расчете толщины покрытия мы учитывали только распыление атомов Pd ионами аргона, то наблюдаемое различие при $I/A = 0,04-0,10$, по нашему мнению, связано с тем, что помимо распыления атомов Pd происходит распыление атомов Fe из подложки. Атомы железа в покрытии присутствуют вследствие атомного перемешивания на границе раздела покрытие – подложка и встречной диффузии атомов подложки в покрытие [8]. Поэтому экспериментально определенная толщина покрытия больше рассчитанной. При значениях $I/A > 0,10$ (более интенсивном потоке ассистирующих ионов) процесс распыления атомов Pd играет существенную роль, так как коэффициент распыления атомов Pd в 1,5 раза больше, чем Fe. Соответственно толщина покрытия близка к теоретически рассчитанной.

Заключение. Методом резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия в сочетании с компьютерным моделированием определено, что при осаждении Pd-покрытия на Fe методом динамического атомного перемешивания, в котором в качестве ассистирующих ионов использовались ионы Ag^+ с энергией 6 кэВ, и интегральными потоками $(0,7-1,6) \cdot 10^{16}$ ион/см² формируются покрытия толщиной $\sim(14-23)$ нм. Установлено, что толщина сформированного покрытия зависит от параметра I/A (отношение плотности потока I ассистирующих ионов к плотности потока A атомов осаждаемого покрытия). Следует отметить, что при расчете толщины покрытия необходимо учитывать не только процессы распыления атомов осаждаемой пленки, но и процессы распыления атомов подложки.

Литература

1. Влияние параметров мощного ионного пучка на изменение поверхностных свойств твердого сплава Т14К8 / И. Н. Царева [и др.] // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2005. № 9. С. 84–89.
2. Блинков И. В., Волхонский А. О., Юдин А. Г. Многофазность материала покрытий как фактор, влияющий на формирование наноструктуры и их свойств // ФХОМ. 2011. № 6. С. 57–64.
3. Авдиенко А. А., Авдиенко К. И. Упрочнение поверхности конструкционных материалов и сплавов методом ионно-лучевой обработки // Упрочняющие технологии и покрытия. – 2009. № 12. С. 16–27.
4. Лотков А. И., Мейснер Л. Л., Гришков В. Н. Сплавы на основе никелида титана: ионно-лучевая, плазменная и химическая модификация поверхности // Физика металлов и металловедение. 2005. Т. 99, № 5. С. 66–78.
5. Изучение металлосодержащих (Ti, Co) покрытий, осажденных на кремний при ионном ассистировании, ядерно-физическими методами / Бобрович О. Г. [и др.] // ФХОМ. 2006. № 1. С. 54–58.
6. Ионно-лучевое модифицирование трибологических свойств хромистой стали / Козлов Д. А. [и др.] // ФХОМ. 2010. № 1. С. 50–53.
7. Doolittle L. R. A semiautomatic algorithm for rutherford backscattering analysis / L. R. Doolittle // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 1986. Vol. B15. P. 227–234.
8. Тульев В. В., Ташлыков И. С., Литвинов Д. А. Элементный состав и распределение компонентов по глубине в структурах Pd/Fe, полученных методом динамического атомного перемешивания / В. В. Тульев. Труды БГТУ. 2012. № 6 (153): Физ.-мат. науки и информатика. С. 81–85.

Поступила 01.03.2014

УДК 535.374:537.6:621

А. К. Сойка, доктор физико-математических наук (БГТУ);

В. Г. Шепелевич, доктор физико-математических наук, профессор (БГУ)

ДОЛГОВРЕМЕННЫЙ ОТРИЦАТЕЛЬНЫЙ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В МЕТАЛЛАХ, ВЫЗВАННЫЙ ВОЗДЕЙСТВИЕМ СИЛЬНОГО ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Экспериментально исследовано влияние сильных импульсных магнитных полей с индукцией 5–40 Тл на механические свойства фольг из Zn, Sn, Al, Al – Zn. В фольгах из Al и Al – Zn обнаружен отрицательный магнитопластический эффект с магнитной памятью, заключающийся в значительном и, по-видимому, необратимом увеличении микротвердости этих фольг после однократного воздействия на них униполярного импульсного магнитного поля.

The influence of strong pulsed magnetic fields with induction of 5–40 T on the mechanical properties of the foils Zn, Sn, Al, Al – Zn. In a foil of Al and Al – Zn magnetoplastic detected negative effect from the magnetic memory, comprising a wide and apparently irreversible increase the microhardness of the foils after a single exposure to a unipolar pulsed magnetic field.

Введение. Обнаружение магнитопластического эффекта (МПЭ) в ионных кристаллах [1] и гипотеза о его электронной спин-зависимой природе [2, 3], подтвержденная экспериментально [4–6], вызвали большой интерес к вопросу о влиянии магнитных полей на свойства немагнитных твердых тел, обусловленный как научным интересом к МПЭ, так и перспективами его практического использования.

К настоящему времени известен весьма обширный круг различных МПЭ в диэлектрических, полупроводниковых, металлических и полимерных материалах в постоянных, переменных и импульсных магнитных полях от долей тесла до 30 Тл (см. обзоры [7–10]), а также при одновременном воздействии постоянных и микроволновых магнитных полей по методу электронного спинового резонанса [5, 11].

В большинстве МПЭ изменения пластичности твердых тел наблюдаются только в присутствии магнитного поля. Обнаружены также МПЭ с магнитной памятью, когда изменения механических свойств материалов сохраняются долгое время (часы, сутки и месяцы) после исчезновения магнитного поля или даже имеют необратимый характер [12]. Так, в [13] наблюдалось необратимое увеличение (до 50%) твердости модифицированной древесины после обработки ее серией импульсов магнитного поля с индукцией до 0,5 Тл.

Основная часть. В данной работе приведены результаты экспериментального исследования влияния импульсных магнитных полей (ИМП) с индукцией до 40 Тл на микротвердость металлов при комнатной температуре.

Исследуемые образцы представляли собой прямоугольные полоски ($5 \times 15 \text{ мм}^2$) фольг толщиной 0,2 мм из металлов Al, Sn, Zn и сплава Al – 6 ат. % Zn. Структура, физические свойства и методика изготовления этих фольг описаны в [14].

Полоски фольг приклеивались шеллачным лаком на стеклянные пластинки, которые размещались в катушке так, что линии магнитного поля были параллельны большей стороне полосок. Тем самым минимизировались пондеромоторное и тепловое воздействия ИМП на фольги вследствие наведения в них вихревых токов (скорости изменения магнитного поля $dB/dt \sim 10^6 \text{ Тл/с}$).

Каждый из исследуемых образцов подвергался однократному воздействию ИМП с амплитудой индукции от 5 до 40 Тл. Осциллограмма импульса магнитного поля приведена на рис. 1 [15].

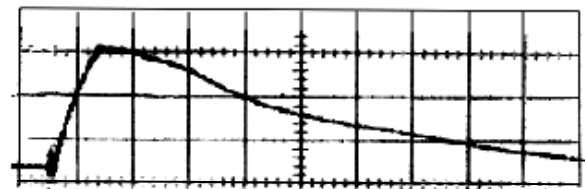


Рис. 1. Осциллограмма импульса магнитного поля. Развертка – 20 мкс/деление, по вертикали – 15 Тл/деление

Микротвердость фольги измерялась по Виккерсу на приборе ПМТ-3 с погрешностью не более 5%. Нагрузка на индентор составляла 20 г, время действия нагрузки – 30 с. Микротвердости образцов измерялись до и после наложения на них ИМП.

Результаты однократного воздействия ИМП с амплитудой индукции от 10 до 40 Тл на фольгу из Zn представлены на рис. 2, которые демонстрируют положительный МПЭ в этой фольге, т. е. имеет место разупрочнение фольги. Наложение ИМП с амплитудой 10, 20, 30 и 40 Тл на образцы цинковой фольги приводило практически к одинаковому результату – уменьшению их микротвердости примерно на 10%.

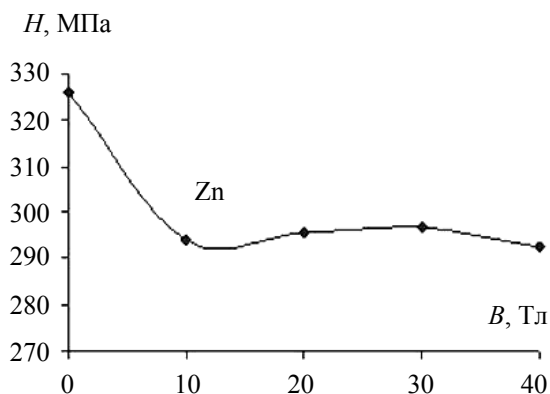


Рис. 2. Изменение микротвердости цинковой фольги в зависимости от индукции магнитного поля

Почти такая же картина (в пределах ошибок измерений) наблюдается и в случае образцов оловянной фольги (рис. 3). Различие состоит в том, что при индукции ИМП 20 Тл имеет место наибольшее ($\approx 13\%$) уменьшение микротвердости оловянной фольги, после чего она заметно увеличивается с ростом поля.

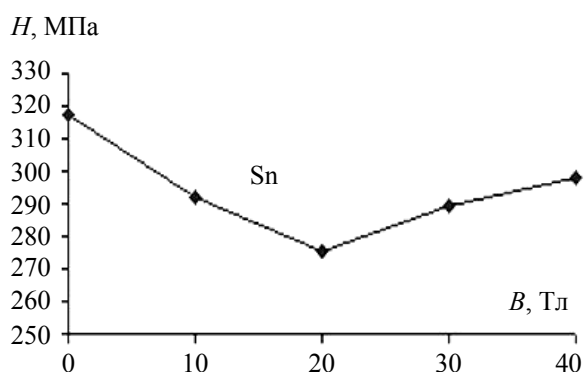


Рис. 3. Изменение микротвердости оловянной фольги в зависимости от индукции магнитного поля

Результаты экспериментов для фольг из Al и Al – Zn приведены на рис. 4. В первом приближении микротвердость фольг линейно растет с ростом индукции магнитного поля, т. е. в этих фольгах наблюдается отрицательный МПЭ, величина которого при амплитуде индукции ИМП 40 Тл достигает 48 и 44% для Al и Al – Zn соответственно.

Заметим, что допирование алюминиевой фольги атомами цинка (до 6 ат. %) более чем в два раза повышает ее исходную микротвердость (см. рис. 2), однако масштаб наблюдаемого в нашем случае МПЭ в фольге из Al и фольге из сплава Al – 6 ат. % Zn практически одинаков (при амплитудах индукции ИМП до 40 Тл).

Этот результат (без учета эффекта магнитной памяти) прямо противоположен данным

работы [8], согласно которым МПЭ в алюминии и цинке, наблюдаемый в присутствии внешнего постоянного магнитного поля с индукцией до 2 Тл, имеет положительный характер, т. е. пластичность этих металлов в магнитном поле увеличивается.

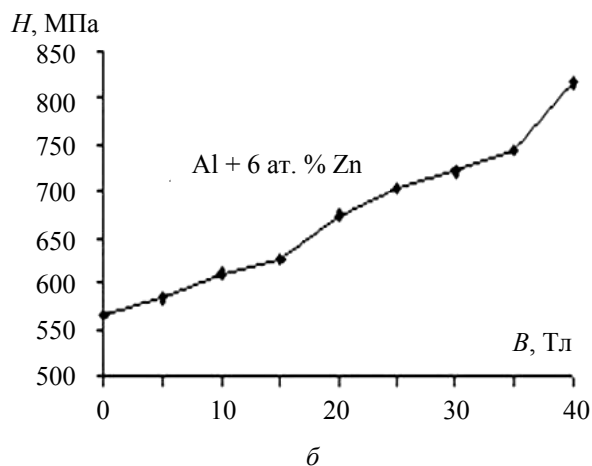
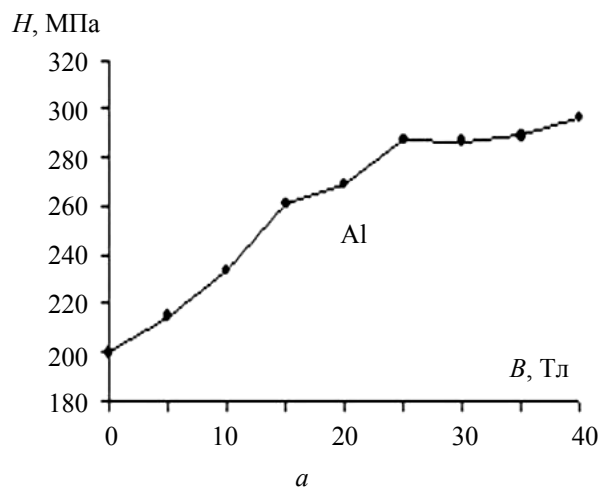


Рис. 4. Изменение микротвердости фольги в зависимости от амплитуды индукции магнитного поля: а – фольга из Al; б – фольга из Al – Zn

В наших экспериментах длительность промежутков времени между актом магнитной обработки образцов фольг, заключающейся в однократном наложении на них ИМП, и последующими измерениями их микротвердости составляла не менее 10-ти суток. Это означает, что обнаруженные в исследованных фольгах МПЭ носят, по меньшей мере, долговременный характер. Для образцов фольг из Al и Al – Zn спустя примерно не менее чем 11 месяцев после их магнитной обработки были проведены повторные измерения микротвердости, результаты которых с точностью до $\pm 7\%$ совпали с результатами первичных измерений, что позволяет считать, что в этих фольгах МПЭ является, по-видимому, необратимым.

Заключение. По мнению авторов, выяснение физической природы описанных выше МПЭ требует дальнейших исследований, поскольку известную теорию электронных спин-зависимых процессов в твердых телах, объясняющую МПЭ в диамагнитных материалах [7–12], можно считать достаточно обоснованной лишь для ионных кристаллов, у которых нет электронов проводимости, вследствие чего представления этой теории нельзя автоматически переносить на металлы.

Вклад электронов проводимости в силы сопротивления металла сжатию невелик (по сравнению с ролью заполненных электронных оболочек атомов), но не учитывать его нельзя, как нельзя исключить и влияние магнитного поля на эти силы путем перераспределения электронной плотности между узлами решетки. Точечные дефекты, роль которых в пластичности ионных кристаллов и механизмах возникновения в них МПЭ велика (согласно концепции электронных спин-зависимых процессов), также значительно меньше сказываются на пластичности металлов. Таким образом, необходимо не только более детальное изучение обнаруженных МПЭ, но и исследование, в том числе рентгенографическими и рентгеноспектральными методами, влияния ИМП на дефекты кристаллической и, особенно, электронной структуры металлов.

Литература

1. О движении дислокаций в кристаллах NaCl под действием постоянного магнитного поля / В. И. Альшиц [и др.] // Физика твердого тела. 1987. Т. 29, вып. 2. С. 467–470.
2. «In situ» изучение магнитоэластического эффекта в кристаллах NaCl методом непрерывного травления / В. И. Альшиц [и др.] // Физика твердого тела. 1991. Т. 33, вып. 10. С. 3001–3010.
3. Молоцкий М. И. Возможный механизм магнитоэластического эффекта // Физика твердого тела. 1991. Т. 33, вып. 10. С. 3112–3114.
4. Магнитный резонанс в короткоживущих комплексах структурных дефектов в монокристаллах NaCl / Головин Ю. И. [и др.] // Доклады Академии наук. 1998. Т. 361, № 3. С. 352–354.
5. Эффекты разупрочнения ионных кристаллов, вызванные изменением спиновых состояний в условиях парамагнитного резонанса / Ю. И. Головин [и др.] // ЖЭТФ. 2000. Т. 116, вып. 6. С. 1080–1093.
6. Альшиц В. И., Даринская Е. В. Магнитоэластический эффект в кристаллах LiF и продольная релаксация спинов // Письма в ЖЭТФ. 1999. Т. 70, вып. 11. С. 749–753.
7. Моргунов Р. Б. Спин-зависимые реакции между дефектами структуры и их влияние на пластичность кристаллов в магнитном поле // Вестник РФФИ. 2003. № 2. С. 19–46.
8. Магнитоэластический эффект: основные свойства и физические механизмы / В. И. Альшиц [и др.] // Кристаллография. 2003. Т. 48, № 5. С. 826–854.
9. Эффекты магнитного воздействия на механические свойства и реальную структуру немагнитных кристаллов / А. А. Урусовская [и др.] // Кристаллография. 2003. Т. 48, № 5. С. 855–872.
10. Головин Ю. И. Магнитоэластичность твердых тел (Обзор) // Физика твердого тела. 2004. Т. 46, вып. 5. С. 769–803.
11. Изменение микротвердости немагнитных кристаллов после их экспозиции в магнитном поле Земли и в переменном поле накачки в схеме ЭПР / В. И. Альшиц [и др.] // Физика твердого тела. 2012. Т. 54, вып. 2. С. 305–312.
12. Моргунов Р. Б., Бучаченко А. Л. Магнитоэластичность и магнитная память в диамагнитных твердых телах // ЖЭТФ. 2009. Т. 136, вып. 3 (9). С. 505–515.
13. Воздействие слабых импульсных магнитных полей на модифицированную древесину / В. В. Постников [и др.] // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31, вып. 9. С. 14–19.
14. Шепелевич В. Г., Лозенко В. В. Структура и физические свойства фольги и сплавов на основе цинка и кадмия, полученных сверхбыстрой закалкой из расплава // Вестник БГУ. Сер. 1. 2009. № 1. С. 20–26.
15. Сойка А. К. Автоматический плазменный кроубар // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14, вып. 3. С. 1238–1241.

Поступила 27.02.2014

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

УДК 004.021:004.942

И. В. Акиншева, старший преподаватель (МГУП);
И. Ф. Кузьмицкий, кандидат технических наук, доцент (БГТУ)

ОСОБЕННОСТИ ИНТЕГРАЛЬНОГО ОЦЕНИВАНИЯ МНОГОМЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ И АЛГОРИТМОВ УПРАВЛЕНИЯ

В статье изложен способ интегральной оценки алгоритмов управления многомерного объекта. Способ основывается на использовании разработанной математической модели, в которой зависимость параметров объекта представлена в виде интегральных выражений, и теории вариационного исчисления для определения оптимальных значений управляющих параметров многомерного объекта. В качестве объекта управления выступают реакторы поликонденсации технологического процесса производства полиэтилентерефталата, математическая модель представлена интегральными рядами Вольтерра второго порядка. Результатом исследования является алгоритм, позволяющий, используя численные методы решения интегро-дифференциальных уравнений, определить изменение оптимальных значений параметров работы реакторов в зависимости от времени протекания технологического процесса поликонденсации. Разработанный математический аппарат дает предпосылки для синтеза адаптивной системы управления исследуемым объектом.

The article describes the method of integral evaluation of control algorithms for multi-dimensional object. The method is based on the use of the developed mathematical model in which the dependence of the parameters of the object is represented in the form of integral expressions, and the theory of the calculus of variations to determine the optimal control parameters of a multidimensional object. As the object of governance are polycondensation reactors manufacturing process of polyethylene terephthalate, a mathematical model is presented Volterra integral rows of the second order. The result of this study is an algorithm which, using numerical methods for solving integro-differential equations, determine the change in the optimal values of the parameters of reactors depending on the time course of the polycondensation process. Developed mathematical apparatus gives the prerequisites for the synthesis of adaptive control system of the object under study.

Введение. В настоящее время на промышленных предприятиях остро стоит вопрос экономии энергоресурсов. Один из способов энергосбережения – поддержание параметров процесса, требующих больших энергетических затрат, на оптимальном уровне. Для реализации указанного способа необходимо решить задачу оптимизации.

В работе исследуется поликонденсационный процесс получения полиэтилентерефталата (ПЭТФ), протекающий в реакторах предварительной (ППК) и основной (ОПК) поликонденсации. Согласно технологии, процесс поликонденсации протекает при высокой температуре (275–310°C) и низком давлении (250–600 Па), что подразумевает большие затраты электроэнергии.

Таким образом, цель исследования заключается в разработке методики для определения

оптимальных значений параметров процесса поликонденсации. При достижении цели были решены следующие задачи:

- 1) выделены основные переменные рассматриваемого объекта управления, влияющие на ход технологического процесса;
- 2) разработана математическая модель процесса поликонденсации, отражающая взаимосвязь параметров качества получаемого продукта от управляющих параметров, требующих больших затрат электроэнергии;
- 3) составлен интегральный критерий качества процесса;
- 4) разработан алгоритм оптимизации, в основе которого лежит математический аппарат теории вариационного исчисления;
- 5) проведена оценка полученного решения.

Основная часть. В процессе поликонденсации наибольший интерес представляют такие выходные переменные, как вязкость расплава на выходе из реакторов ППК и ОПК – $v_1(t)$, $v_2(t)$ и расход ПЭТФ – $Q_1(t)$, $Q_2(t)$. Рассмотрим выражение для вязкости на выходе из реактора ППК:

$$\begin{aligned} v_1(t) = & v_0(t) + A_1 \int_0^t (e^{p_1 \tau_1} - e^{p_2 \tau_1}) T_1(t - \tau_1) d\tau_1 + \\ & + A_2 \int_0^t (e^{p_3 \tau_2} - e^{p_4 \tau_2}) P_1(t - \tau_2) d\tau_2 + \\ & + A_3 \int_0^t \int_0^t (e^{p_5 \tau_1} - e^{p_6 \tau_1})(e^{p_7 \tau_2} - e^{p_8 \tau_2}) \times \\ & \times T_1(t - \tau_1) P_1(t - \tau_2) d\tau_1 d\tau_2, \end{aligned} \quad (1)$$

где $v_0(t)$ – вязкость поступающего дигликольтерефталата в реактор ППК, Па·с; A_{1-3} – коэффициенты аппроксимации; p_{1-8} – коэффициенты настройки модели, c^{-1} ; $\tau_{1, 2}$ – время запаздывания динамического элемента, реализующего физическое воздействие на объект исследования.

Управляющими параметрами являются температура в реакторах $T_1(t)$, $T_2(t)$ и давление в реакторах $P_1(t)$, $P_2(t)$. Математическая модель составлена на основе интегральных рядов Вольтерра второго порядка, подробное описание ее представлено в [1].

Мгновенные значения ошибок по рассматриваемым параметрам будут выглядеть следующим образом:

$$e_v(t) = v_i(t) - v_i^M(t); \quad (2)$$

$$e_Q(t) = Q_i(t) - Q_i^M(t), \quad (3)$$

где $v_i^M(t)$ и $Q_i^M(t)$ – мгновенные значения вязкости и расхода полимера, полученные в результате моделирования.

Необходимо учитывать и мгновенные значения функции ошибки по степени полимеризации, которая также является выходной переменной:

$$e_{DP}(t) = DP_i(t) - DP_i^M(t), \quad (4)$$

где $DP_i^M(t)$ – мгновенные значения степени полимеризации ПЭТФ.

Кроме выходных переменных необходимо в критерий оптимизации включить и управляющие переменные: температуру $T_1(t)$, $T_2(t)$ и давление $P_1(t)$, $P_2(t)$ внутри реакторов поликонденсации. В исследуемом процессе существует необходимость в определении скорости реакции исполнительных устройств на изменяющийся режим управления, поэтому учтем и скорости

изменения управляющих переменных в виде их производных по времени. Таким образом, мгновенные значения функции ошибок по управляющим переменным и их производным имеют вид

$$e_T(t) = T_i(t) - T_i^M(t); e_P(t) = P_i(t) - P_i^M(t); \quad (5)$$

$$\dot{e}_T(t) = \dot{T}_i(t) - \dot{T}_i^M(t); \dot{e}_P(t) = \dot{P}_i(t) - \dot{P}_i^M(t), \quad (6)$$

где $T_i^M(t)$, $P_i^M(t)$ и $\dot{T}_i^M(t)$, $\dot{P}_i^M(t)$ – мгновенные значения температуры, давления и их производных, полученные в результате моделирования соответственно.

В конечном итоге критерий качества характеризует общую ошибку за весь период работы системы управления от некоторого начального значения времени $t = t_n$ до времени окончания процесса $t = T$. Поэтому критерий представляет собой сумму мгновенных значений ошибок основных переменных процесса, проинтегрированную по времени работы системы. Как известно, в системе наблюдаются не монотонные процессы, а процессы, характеризующиеся постоянной сменой знака ошибки, поэтому для устранения зависимости вычислений от знака ошибки будем использовать интегральную квадратичную оценку.

Задача оптимального управления процессом поликонденсации, задаваемого выражениями (2)–(6), сформулирована как задача минимизации обобщенного интегрального квадратичного критерия:

$$\begin{aligned} I(t) = & \int_0^T \Psi(t) (\alpha (v_1(t) - v_1^M(t))^2 + \\ & + \beta (v_2(t) - v_2^M(t))^2 + \chi (Q_1(t) - Q_1^M(t))^2 + \\ & + \gamma (Q_2(t) - Q_2^M(t))^2 + \psi (DP(t) - DP^M(t))^2 + \\ & + \eta (T_1(t) - T_1^M(t))^2 + \lambda (P_1(t) - P_1^M(t))^2 + \\ & + \mu (T_2(t) - T_2^M(t))^2 + \pi (P_2(t) - P_2^M(t))^2 + \\ & + \theta (\dot{T}_1(t) - \dot{T}_1^M(t))^2 + \rho (\dot{P}_1(t) - \dot{P}_1^M(t))^2 + \\ & + \sigma (\dot{T}_2(t) - \dot{T}_2^M(t))^2 + \xi (\dot{P}_2(t) - \dot{P}_2^M(t))^2) dt, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\Psi(t)$ – сглаживающая функция; $\alpha, \beta, \chi, \gamma, \psi, \eta, \lambda, \mu, \pi, \theta, \rho, \sigma, \xi$ – весовые коэффициенты, определяющие компромисс между основными переменными процесса, а также дополнительными условиями по скорости изменения управляющих переменных.

Понятие минимизации критерия качества продукта путем соответствующего выбора оптимального сигнала управления в отличие от оптимизации параметров или импульсной характеристики приводит к значительному обобщению метода оптимизации системы управле-

ния с обратной связью. Математическая теория оптимизации, применяемая для синтеза сложных систем управления многомерных объектов, определяется сложностью получения числовых решений. Выбор формы функции ошибки определяет характеристики уравнения оптимального управления.

Для нахождения оптимальных значений управляющих переменных воспользуемся теорией вариационного исчисления. Данный метод оптимизации позволяет определить оптимальный сигнал управления не только в зависимости от желаемого выходного сигнала, но также и в функции текущего состояния динамического процесса. Так как исследуемый объект является нелинейным, то система управления также является нелинейной в зависимости от формы уравнения Эйлера – Лагранжа [2].

Таким образом, подынтегральное выражение критерия (7) обозначим через $F(t)$. Функция, которая минимизирует функционал (7), должна удовлетворять дифференциальному уравнению второго порядка Эйлера – Лагранжа:

$$\frac{\partial F(t)}{\partial T_i(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial F(t)}{\partial \dot{T}_i(t)} \right) = 0. \quad (8)$$

Учитывая выражения (7) и (8), запишем систему уравнений для определения значений оптимальных переменных процесса поликонденсации.

$$\begin{cases} \frac{\partial F(t)}{\partial T_1(t)} + 2\alpha - 2\xi \frac{d\dot{T}_1(t)}{dt} = 0, \\ \frac{\partial F(t)}{\partial P_1(t)} + 2\beta - 2\chi \frac{d\dot{P}_2(t)}{dt} = 0, \\ \frac{\partial F(t)}{\partial T_2(t)} + 2\gamma - 2\mu \frac{d\dot{T}_2(t)}{dt} = 0, \\ \frac{\partial F(t)}{\partial P_2(t)} + 2\delta - 2\omega \frac{d\dot{P}_2(t)}{dt} = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Ранее были выделены выходные переменные: вязкость на выходе из реактора ППК – $\nu_1(t)$, расход на выходе из реактора ППК –

$Q_1(t)$, вязкость на выходе из реактора ОПК – $\nu_2(t)$, расход на выходе из реактора ОПК – $Q_2(t)$, степень полимеризации $DP(t)$ расплава на выходе из реактора ОПК, определяемая с помощью математической модели кинетики процессов, протекающих в реакторах; а также четыре управляющие переменные: температура в реакторе ППК – $T_1(t)$, давление в реакторе ППК – $P_1(t)$, температура в реакторе ОПК – $T_2(t)$, давление в реакторе ОПК – $P_2(t)$. Поэтому система (9) состоит из четырех уравнений, путем решения которых определяются оптимальные значения управляющих переменных процесса поликонденсации.

Разработав математическую модель, введем ограничения на выходные параметры процесса. Расход продукта определен производительностью установки и равен 0,834 кг/с (3004 кг/ч), вязкость ПЭТФ – 250 Па·с, степень полимеризации – 115, время пребывания полимера в реакторах поликонденсации – 1,5 ч. Введенные ограничения являются ограничениями функции, минимизирующей функционал (7).

Ставится трудоемкая задача, связанная с большим количеством вычислений. Рассматривать будем первое и второе уравнения системы (9), прибегнув к ряду допущений, чтобы решение поставленной задачи представлялось возможным:

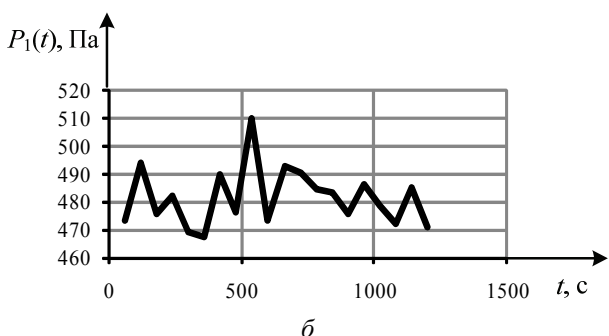
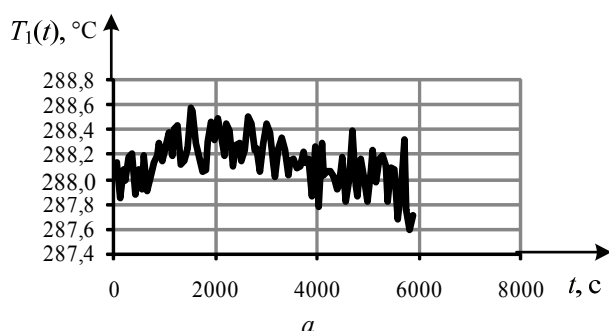
- переменные t и τ являются эквивалентными, так как измерения параметров с течением времени проводились в одной системе;
- переменные t и τ принадлежат отрезку $[0; T]$, где T – время протекания процесса поликонденсации в реакторах;
- интеграл представляется в виде конечной суммы, а производная в виде конечной разности;
- шаг изменения t бесконечно мал по отношению к временному отрезку.

Согласно [3], учитывая принятые допущения, разбивая отрезок $[0; T]$ на число интервалов n и принимая функции $T_1(t)$ и $P_1(t)$ фиксированными на каждом из этих интервалов, получим формулу (10). Аналогичные преобразования произведем и для второго уравнения системы (см. (11)).

$$\begin{aligned} & \frac{\left(A_1 \sum_{k=0}^n (e^{p_1 t_k} - e^{p_2 t_k}) T_1(t_k) + A_3 \sum_{k=0}^n \sum_{k=0}^n (e^{p_5 t_k} - e^{p_6 t_k}) T_1(t_k) (e^{p_7 t_k} - e^{p_8 t_k}) P_1(t_k) \right)}{T_1(t_k) - T_1(t_{k-1})} - \\ & \frac{\left(A_1 \sum_{k=0}^n (e^{p_1 t_{k-1}} - e^{p_2 t_{k-1}}) T_1(t_{k-1}) + A_3 \sum_{k=0}^n \sum_{k=0}^n (e^{p_5 t_{k-1}} - e^{p_6 t_{k-1}}) T_1(t_{k-1}) (e^{p_7 t_{k-1}} - e^{p_8 t_{k-1}}) P_1(t_{k-1}) \right)}{T_1(t_k) - T_1(t_{k-1})} + \\ & + 2\alpha - 2\xi \frac{T_1(t_{k+1}) - 2T_1(t_k) + T_1(t_{k-1}))}{(t_k - t_{k-1})} = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{A_1 \sum_{k=0}^n (e^{P_3 t_k} - e^{P_4 t_k}) T_1(t_k) + A_3 \sum_{k=0}^n \sum_{k=0}^n (e^{P_5 t_k} - e^{P_6 t_k}) T_1(t_k) (e^{P_7 t_k} - e^{P_8 t_k}) P_1(t_k)}{P_1(t_k) - P_1(t_{k-1})} \right) - \\ & \left(\frac{A_1 \sum_{k=0}^n (e^{P_3 t_{k-1}} - e^{P_4 t_{k-1}}) T_1(t_{k-1}) + A_3 \sum_{k=0}^n \sum_{k=0}^n (e^{P_5 t_{k-1}} - e^{P_6 t_{k-1}}) T_1(t_{k-1}) (e^{P_7 t_{k-1}} - e^{P_8 t_{k-1}}) P_1(t_{k-1})}{P_1(t_k) - P_1(t_{k-1})} \right) + \\ & + 2\beta - 2\chi \frac{P_1(t_{k+1}) - 2P_1(t_k) + P_1(t_{k-1}))}{(t_k - t_{k-1})} = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Задавая начальные значениями $T_1(0) = 288^\circ\text{C}$ и $P_1(0) = 480$ Па, получим решение системы двух уравнений и отобразим его на графиках зависимости $T_1(t)$ и $P_1(t)$, представленных на рисунке.



Полученные в результате аппроксимации исходных данных графики оптимальных управляющих параметров реактора предварительной поликонденсации: a – температуры; b – давления

Для получения функциональной зависимости управляющих параметров от времени необходимо аппроксимировать вычисленные значения.

Заключение. Разработан алгоритм поиска оптимальных значений управляющих переменных, составленный на основе теории вариационного исчисления и использующий интегральный критерий оптимизации процесса поликонденсации.

В случае принятия таких допущений как в (10) и (11), возникает потребность в оценке ошибки, полученной при вычислениях. Величину оптимальной положительной ошибки определения $T_1(t)$ и $P_1(t)$ будем находить согласно следующему выражению [4]:

$$\varepsilon(T_1, t) = 2I(T_1, t)\delta(P_1, t) - \delta(T_1, t) \sum_{t=0}^T (P_1(t))^2; \quad (12)$$

$$\varepsilon(P_1, t) = 2I(P_1, t)\delta(T_1, t) - \delta(P_1, t) \sum_{t=0}^T (T_1(t))^2, \quad (13)$$

где $I(T_1, t)$, $I(P_1, t)$ – сумма всех положительных значений $T_1(t)$, $P_1(t)$; $\delta(T_1, t)$, $\delta(P_1, t)$ – инвариантные ошибки, равные, как правило, максимальному значению переменной.

Подставляя полученные значения температуры и давления в выражения (12) и (13), получим значение оптимальной положительной ошибки определения $T_1(t)$ и $P_1(t)$: $\varepsilon(T_1, t) = 9199$, $\varepsilon(P_1, t) = 8783$, что составляет менее 10% от произведения максимальных значений давления и температуры.

Следовательно, принятые допущения не повлияют существенно на решение задачи оптимизации.

Литература

1. Акиншева И. В., Кузьмицкий И. Ф., Карраскель И. Особенности идентификации динамики химических реакторов на основе рядов Вольтерра // Труды БГТУ. 2012. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 86–89.
2. Андреева Е. А., Цирулева В. М. Вариационное исчисление и методы оптимизации. М.: Высш. шк., 2006. 584 с.
3. Крылов А. В. Приближенное вычисление интегралов. Минск: Наука, 1976. 540 с.
4. Дзюбко С. И. Инвариантные разбиения при интегральном оценивании многомерных объектов // Автоматика и телемеханика. 2005. № 6. С. 5–18.

Поступила 14.03.2014

УДК 62.50

А. В. Лапето, ассистент (БГТУ);

И. Ф. Кузьмицкий, кандидат технических наук, доцент (БГТУ)

СИНТЕЗ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ВЛОЖЕНИЯ НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМОВ АППРОКСИМАЦИИ ФУНКЦИЙ С ОТКЛОНЯЮЩИМСЯ АРГУМЕНТОМ

Работа посвящена синтезу систем управления с отклоняющимся аргументом на основе теории вложения. Показана возможность применения разложений различного типа для аппроксимации звеньев чистого запаздывания. Рассматривается возможность применения алгоритмов синтеза систем управления необходимой размерности на основе желаемого показателя перерегулирования и нормированного времени переходного процесса.

The paper deals with the synthesis of control systems with deviating argument based on the embedding theory. It goes about the possibility of using of different types of expansions for the approximation of the pure delay units. In the paper, we show how to use algorithms for synthesis of control systems based on the desired dimension of the desired rate of overshoot and normalized transient time.

Введение. В связи с развитием теории автоматического управления и моделирования объектов управления в настоящее время все большее внимание уделяется объектам с запаздыванием [1]. Это явление заключается в том, что с началом изменения сигнала на входе объекта управления выходной сигнал начинает изменяться только через определенный промежуток времени.

Наиболее распространенными примерами объектов управления с запаздыванием могут служить процессы сушки и горения, прокатка металла, ленточные транспортеры, процессы измельчения и в некоторых случаях процессы в химических реакторах [2].

Моделирование процессов, протекающих в объектах управления с запаздыванием, осуществляется с помощью дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. Трудности в математическом решении этих уравнений перетекают в проблемы технической реализации систем управления с запаздыванием [3].

Целью этого исследования является аналитический синтез системы управления объектами с запаздыванием по управлению, выходу и состоянию объекта, используя теорию вложения систем.

Основная часть. Так как математические модели представляют большое количество звеньев, иногда с запаздыванием, соединенных между собой и оказывающих влияние не только на выходной параметр процесса, но и на состояние во время протекания этого процесса, достаточно удобно использовать описание таких объектов и процессов в пространстве состояний:

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \sum_{i=0}^l (A_i x(t - \tau_i)) + \sum_{j=0}^r (B_j u(t - \theta_j)); \\ y(t) &= \sum_{i=0}^l (C_i x(t - \tau_i)), \end{aligned} \quad (1)$$

где $\tau_0 = 0$, $0 < \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_l$ – постоянные времена запаздываний в каналах состояния и выхода; $\theta_0 = 0$, $0 < \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_r$ – постоянные времена запаздываний в каналах управления; $i = 0, \dots, l$; $j = 0, \dots, r$; $u(t) \in R^s$, $y(t) \in R^m$, $x(t) \in R^n$ – векторы входных, выходных переменных и фазовый вектор объекта управления соответственно. В нашем случае матрицы A_i имеют размер $n \times n$, $C_i - m \times n$, являются числовыми при временах запаздывания τ_i . Матрицы B_j размера $n \times s$ также являются числовыми и соответствуют временам запаздывания по управлению θ_j .

Начальные условия в рассматриваемой задаче примем с учетом задержки прохождения сигналов в объекте управления, т. е. формально будем рассматривать отрицательные моменты времени, предполагая, что в объекте происходили динамические процессы до начального момента времени:

$$x(t) = \phi_x(t), \quad t_0 - \tau \leq t \leq t_0;$$

$$u(t) = \phi_u(t), \quad t_0 - \theta \leq t \leq t_0,$$

где τ, θ – наибольшие времена запаздывания по состоянию и управлению соответственно.

Задачу синтеза системы управления в нашем случае можно разделить на два этапа. На первом этапе стоит задача формирования проматрицы системы управления, а на втором – построение системы в зависимости от варианта ее синтеза.

Формирование проматрицы. В современной теории автоматического управления все более широко используется представление объектов в пространстве состояний [4]. От традиционных методов исследования (частотного, корневых годографов) метод пространства состояний отличают принципиально новые возможности. Этот тип представления объектов управления позволяет, например, судить, достижима ли цель управления (управляемость

объекта), определять необходимый состав измерителей (наблюдаемость объекта), синтезировать управление на все входы многомерного объекта и др.

Использование аппарата вложения предполагает представление системы управления в блочно-матричном виде:

$$\Omega(p) \begin{bmatrix} x \\ y \\ u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_0 \\ 0 \\ u \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где $\Omega(p)$ – проматрица системы управления; x_0 – вектор начальных условий;

Для задачи управления системами с запаздыванием матрица $\Omega(p)$ должна быть расширена:

$$\Omega(p) = \begin{bmatrix} pI_n - \sum_{i=0}^l A_i e^{\tau_i p} & 0 & -\sum_{j=0}^r B_j e^{\theta_j p} & 0 \\ -\sum_{i=0}^l C_i e^{\tau_i p} & I_m & 0 & 0 \\ 0 & K(p) & I_s & -G(p) \\ 0 & 0 & 0 & I_s \end{bmatrix} \quad (3)$$

Квадратная и всегда полная (невырожденная) матрица $\Omega(p)$ называется проматрицей системы в пространстве состояний.

Представление системы с помощью проматрицы обладает исчерпывающей полнотой. В силу своей полноты проматрица всегда характеризуется двусторонней обратимостью независимо от задания матриц A , B , C системы. Отсюда следует единственность обратной к (3) матрицы или репроматрицы:

$$\Omega^{-1}(p) = \begin{bmatrix} E_x^{\phi_x}(p) & * & * & E_x^g(p) \\ E_y^{\phi_x}(p) & * & * & E_y^g(p) \\ E_u^{\phi_x}(p) & * & * & E_u^g(p) \\ 0 & 0 & 0 & I_s \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где $E_i^j(p)$ – матричная передаточная функция от параметра i к параметру j .

После выполнения процедур технологии вложения можно получить уравнения, которым должны удовлетворять матричные передаточные функции предкомпенсатора $G(p)$ и регулятора $K(p)$, для трех случаев: при синтезе по свободной и вынужденной составляющим $E_y^{\phi_x}(p)$ и $E_y^g(p)$ соответственно, а также при совместном синтезе по свободной и вынужденной составляющим движения замкнутой динамической системы.

После выбора варианта синтеза и задания желаемых матричных передаточных функций системы они приравниваются к элементам ре-

проматрицы, содержащим комбинации матриц системы, предкомпенсатора и регулятора.

Использование процедуры вложения.

Многие математические модели технологических процессов имеют в своем составе звенья запаздывания. В этом случае использование теории вложения для синтеза управления становится труднореализуемым либо невозможным [3].

Применение методов модального управления становится возможным либо при компенсации звеньев запаздывания, либо при их аппроксимации.

При использовании компенсаторов Смита главным недостатком является невысокая робастность системы либо ее отсутствие, так как при изменении модели объекта управления регуляторы и компенсаторы становятся неэффективными.

Компенсатор Смита обладает еще одним важным недостатком в реальных технологических процессах. При использовании компенсаторов не учитывается динамика составных частей объектов управления, которая остается неизменной. Например, если в состав объекта управления входит транспортер, при использовании компенсатора влияние его запаздывания просто не учитывается, однако в реальности сохраняется.

При аппроксимации запаздываний рядами различного типа озвученные недостатки можно устранить, увеличивая порядок разложения.

Формирование передаточных функций желаемого поведения системы. Для формирования проматрицы системы управления необходимо выполнить две операции:

- 1) исключение звеньев запаздывания из состава системы;
- 2) формирование передаточных функций желаемого поведения системы.

Согласно механизму теории вложения, размерности модели объекта управления и модели, описывающей желаемое поведение системы управления, должны совпадать.

Рассмотрим алгоритм формирования передаточной функции желаемого поведения системы определенной размерности на основе синтеза систем управления с апериодической реакцией [5].

К передаточным функциям с апериодической реакцией на единичное ступенчатое воздействие относятся такие, у которых перерегулирование находится в диапазоне 0,1–2%, установившаяся ошибка равна нулю и наблюдается высокое быстродействие. Рассмотренный метод применим для синтеза систем управления, имеющих замкнутую передаточную функцию вида

$$W_{з.с}(p) = \frac{d^n}{p^n + \alpha d p^{n-1} + \beta d^2 p^{n-2} + \gamma d^3 p^{n-3} + \delta d^4 p^{n-4} + \varepsilon d^5 p^{n-5} + d^n}, \quad (5)$$

$$n \leq 6,$$

где $d, \alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon$ – коэффициенты.

Выражение (5) можно нормировать, введя обозначение $\bar{p} = p/d$, и записать

$$W_{з.с}(\bar{p}) = \frac{1}{\bar{p}^n + \alpha \bar{p}^{n-1} + \beta \bar{p}^{n-2} + \gamma \bar{p}^{n-3} + \dots + 1}. \quad (6)$$

Нормированное время переходного процесса определяется по соотношению

$$t_p^H = dt_{p,ж}, \quad (7)$$

где $t_{p,ж}$ – желаемое время переходного процесса системы.

Коэффициенты и характеристики переходного процесса нормированной системы с аperiodической реакцией приведены в табл. 1.

После формирования передаточной функции определенной размерности с желаемым временем переходного процесса стоит задача корректирования желаемого показателя перерегулирования.

Корректировка показателя перерегулирования. Рассмотрим вариант синтеза желаемой передаточной функции на основе желаемого показателя перерегулирования:

$$\sigma_{жел} = \frac{y_{\max, жел} - y_{уст, жел}}{y_{уст, жел}}, \quad (8)$$

где $y_{\max, жел}$ и $y_{уст, жел}$ – желаемые максимальное и установившееся значения переходного процесса системы.

Любая одноканальная система управления может быть описана передаточной функцией вида

$$W(p) = \frac{b_m p^m + b_{m-1} p^{m-1} + \dots + b_1 p + b_0}{p^n + a_{n-1} p^{n-1} + a_{n-2} p^{n-2} + \dots + a_1 p + a_0} = \frac{B(p)}{A(p)}, \quad (9)$$

где a_i, b_j – коэффициенты; p – оператор Лапласа.

Рассмотрим реакцию системы управления на единичное ступенчатое воздействие, поданное на вход системы. Согласно теореме разложения, переходная характеристика будет иметь вид

$$y(t) = y(0) + \sum_{i=1}^n \frac{B(p_i)}{A'(p_i)} e^{p_i t}, \quad (10)$$

где p_i – корни характеристического уравнения системы.

На первом этапе формирования желаемой передаточной функции будем рассматривать произвольную передаточную функцию, имеющую одинаковую структуру с передаточной функцией желаемой системы управления.

Пусть система управления описывается произвольной передаточной функцией второго порядка:

$$W(p) = \frac{b_1 p + b_0}{a_2 p^2 + a_1 p + a_0}. \quad (11)$$

Изображение реакции такой системы на единичное ступенчатое воздействие, поданное на вход системы

$$y(p) = W(p) \frac{1}{p} = \frac{b_1 p + b_0}{a_2 p^3 + a_1 p^2 + a_0 p}. \quad (12)$$

Очевидно, что один из корней характеристического уравнения должен равняться нулю. Чтобы система управления обладала перерегулированием, также необходимо наличие комплексно сопряженных корней характеристического уравнения системы:

$$p_{1,2} = -\delta \pm j\omega_{св}; \quad p_3 = 0. \quad (13)$$

Размер мнимой и действительной части этих корней выбирается либо произвольно, либо из соображения обеспечения желаемого времени регулирования и степени затухания. Коэффициенты полинома знаменателя рассчитываются исходя из заданных корней.

Таблица 1

Коэффициенты и параметры переходной характеристики системы

Порядок передаточной функции	Коэффициенты знаменателя передаточной функции системы					Перерегулирование, %	Нормированное время переходного процесса
	α	β	γ	δ	ε		
2	1,82	–	–	–	–	0,10	4,82
3	1,90	2,20	–	–	–	1,65	4,04
4	2,20	3,50	2,80	–	–	0,89	4,81
5	2,70	4,90	5,40	3,40	–	1,29	5,43
6	3,15	6,50	8,70	7,55	4,05	1,63	6,04

В этом случае теорему разложения можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} y(t) &= \frac{b_0}{a_0} + 2 \operatorname{Re} \left(\frac{B(p_i)}{A'(p_i)} e^{p_i t} \right) = \\ &= \frac{b_0}{a_0} + 2 \operatorname{Re} \left(\frac{c_1 + jd_1}{c_2 + jd_2} e^{(-\delta + j\omega_{\text{св}})t} \right) = \\ &= \frac{b_0}{a_0} + 2 \operatorname{Re} \left(\frac{F_1}{F_2} e^{(\alpha_1 - \alpha_2)} e^{-\delta t} e^{j\omega_{\text{св}} t} \right) = \\ &= \frac{b_0}{a_0} + 2 \frac{F_1}{F_2} e^{-\delta t} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_1 - \alpha_2)); \quad (14) \end{aligned}$$

$$F_1 = \sqrt{c_1^2 + d_1^2}; \quad F_2 = \sqrt{c_2^2 + d_2^2};$$

$$\alpha_1 = \arctg \left(\frac{d_1}{c_1} \right); \quad \alpha_2 = \arctg \left(\frac{d_2}{c_2} \right), \quad (15)$$

где c_1, c_2, d_1, d_2 – результаты вычисления при подстановке одного из корней в выражение $B(p_i) / A'(p_i)$.

Возьмем производную по времени от (14):

$$\begin{aligned} \frac{dy(t)}{dt} &= -\delta \cdot 2 \frac{F_1}{F_2} e^{-\delta t} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_1 - \alpha_2)) + \\ &+ \omega_{\text{св}} \cdot 2 \frac{F_1}{F_2} e^{-\delta t} \sin(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_1 - \alpha_2)). \quad (16) \end{aligned}$$

Для нахождения момента времени достижения первого локального максимума переходной характеристикой (14) приравняем (16) к нулю и найдем решение на отрезке времени $0 < t < 3 / \omega_{\text{св}}$. Подставив найденный момент времени в выражение переходной характеристики, можно определить перерегулирование произвольной системы управления.

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{y_{\max} - y_{\text{уст}}}{y_{\text{уст}}} = \\ &= \frac{\frac{b_0}{a_0} + 2 \frac{F_1}{F_2} e^{-\delta t} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_1 - \alpha_2)) - y_{\text{уст}}}{y_{\text{уст}}}. \quad (17) \end{aligned}$$

Можно заметить, что в (14) слагаемое b_0 / a_0 является выражением для установившегося режима, тогда (17) можно записать в виде

$$\sigma = \frac{2 \frac{F_1}{F_2} e^{-\delta t} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_1 - \alpha_2))}{y_{\text{уст}}}; \quad (18)$$

Зададим желаемое перерегулирование $\sigma_{\text{жел}}$ для искомой передаточной функции $W_{\text{жел}}(p)$. Найдем отношение значений перерегулирования для желаемой и рассматриваемой систем:

$$\frac{\sigma_{\text{жел}}}{\sigma} = \frac{2 \frac{F_{1, \text{жел}}}{F_{2, \text{жел}}} e^{-\delta t} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_{1, \text{жел}} - \alpha_{2, \text{жел}}))}{2 \frac{F_1}{F_2} e^{-\delta t} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_1 - \alpha_2))}. \quad (19)$$

Для условия сохранения одинакового установившегося режима ($y_{\text{уст, жел}} = y_{\text{уст}}$) необходимо обеспечить выполнение соотношения

$$\frac{b_{0, \text{жел}}}{a_{0, \text{жел}}} = \frac{b_0}{a_0}. \quad (20)$$

Из этого выражения следует:

$$\frac{\sigma_{\text{жел}}}{\sigma} = \frac{2 \frac{F_{1, \text{жел}}}{F_{2, \text{жел}}} e^{-\delta t} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_{1, \text{жел}} - \alpha_{2, \text{жел}}))}{2 \frac{F_1}{F_2} e^{-\delta t} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_1 - \alpha_2))}. \quad (21)$$

Если для обеспечения желаемого показателя перерегулирования возможно в новой системе оставить прежний знаменатель, тогда сохраняются корни характеристического уравнения и часть выражения для расчета переходной характеристики:

$$\frac{\sigma_{\text{жел}}}{\sigma} = \frac{F_{1, \text{жел}} \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_{1, \text{жел}} - \alpha_2))}{F_1 \cos(\omega_{\text{св}} t - (\alpha_1 - \alpha_2))}, \quad (22)$$

а при условии сохранения углов $\alpha_{1, \text{жел}} = \alpha_1$ имеем

$$\frac{\sigma_{\text{жел}}}{\sigma} = \frac{F_{1, \text{жел}}}{F_1}; \quad (23)$$

Как видно из (23), желаемое перерегулирование можно обеспечить, изменяя $F_{1, \text{жел}}$:

$$F_{1, \text{жел}} = F_1 \frac{\sigma_{\text{жел}}}{\sigma}, \quad (24)$$

которое, в свою очередь, зависит от знаменателя передаточной функции

$$F_{1, \text{жел}} = \sqrt{c_{1, \text{жел}}^2 + d_{1, \text{жел}}^2}. \quad (25)$$

Рассмотрим переходную характеристику в относительных координатах, а для этого примем $b_{0, \text{жел}} = a_0$:

$$\begin{aligned} c_{1, \text{жел}} + jd_{1, \text{жел}} &= b_{1, \text{жел}} (-\delta + j\omega_{\text{св}}) + b_{0, \text{жел}} = \\ &= -\delta \cdot b_{1, \text{жел}} + b_{0, \text{жел}} + j\omega_{\text{св}} b_{1, \text{жел}}; \quad (26) \end{aligned}$$

$$c_{1, \text{жел}} = -\delta \cdot b_{1, \text{жел}} + a_0; \quad d_{1, \text{жел}} = \omega_{\text{св}} b_{1, \text{жел}}. \quad (27)$$

Подставив полученные выражения в (25), имеем

$$F_{1, \text{жел}} = \sqrt{(-\delta \cdot b_{1, \text{жел}} + a_0)^2 + (\omega_{\text{св}} b_{1, \text{жел}})^2}; \quad (28)$$

$$\begin{aligned}
 F_{1, \text{жел}}^2 &= \delta^2 b_{1, \text{жел}}^2 + a_0^2 - \\
 -2\delta b_{1, \text{жел}} a_0 + \omega_{\text{св}}^2 b_{1, \text{жел}}^2 &= \\
 = b_{1, \text{жел}}^2 (\delta^2 + \omega_{\text{св}}^2) - b_{1, \text{жел}} 2\delta a_0. & \quad (29)
 \end{aligned}$$

Решив квадратное уравнение (29), можно однозначно определить коэффициент передаточной функции $b_{1, \text{жел}}$, обеспечивающий желаемый показатель перерегулирования $\sigma_{\text{жел}}$.

Выбор размерности объекта и порядка разложения. Для выполнимости процедуры вложения необходимо соответствие размерностей исходного объекта и передаточной функции желаемого поведения системы. В случае наличия запаздывания в составе исходного объекта управления, это запаздывание необходимо учитывать при выборе передаточной функции желаемого поведения системы.

Сформировать определенный порядок системы управления можно при разных сочетаниях порядка передаточной функции объекта и порядка аппроксимации запаздывания.

Рассмотрим применение аппроксимации Паде с различным порядком желаемой передаточной функции объекта. Для оценки эффективности использования разложения будем использовать интеграл квадратичного отклонения системы с аппроксимированным запаздыванием и звеном чистого запаздывания. В качестве входного будем использовать единичное ступенчатое воздействие. Величину времени запаздывания зададим в долях от длительности переходного процесса. А так как длительность переходного процесса в нашем случае является нормированной величиной, то и время запаздывания – нормированная величина.

Таблица 2

Значение интеграла квадратичного отклонения

Порядок объекта	2-й	3-й	4-й
Нормированная величина запаздывания	Интеграл квадратичного отклонения		
Аппроксимация Паде второго порядка			
0,01	$1,2 \cdot 10^{-14}$	$1,2 \cdot 10^{-16}$	$6,9 \cdot 10^{-20}$
0,02	$1,8 \cdot 10^{-11}$	$1,4 \cdot 10^{-14}$	$3,2 \cdot 10^{-16}$
0,05	$1,6 \cdot 10^{-8}$	$2,2 \cdot 10^{-11}$	$8,9 \cdot 10^{-13}$
0,10	$5,1 \cdot 10^{-7}$	$2,9 \cdot 10^{-9}$	$4,6 \cdot 10^{-10}$
Аппроксимация Паде четвертого порядка			
0,01	$9,2 \cdot 10^{-12}$	$1,3 \cdot 10^{-19}$	$8,6 \cdot 10^{-27}$
0,02	$9,3 \cdot 10^{-14}$	$4,3 \cdot 10^{-16}$	$1,1 \cdot 10^{-19}$
0,05	$4,5 \cdot 10^{-10}$	$7,3 \cdot 10^{-14}$	$2,9 \cdot 10^{-16}$
0,10	$1,9 \cdot 10^{-8}$	$1,7 \cdot 10^{-11}$	$1,6 \cdot 10^{-13}$

Как видно из табл. 2, увеличение порядка аппроксимации иногда может усиливать отклонение от переходной характеристики звена чистого запаздывания.

Для формирования желаемой передаточной функции шестого порядка можно использовать два варианта:

- 1) порядок объекта равен четырем, а порядок разложения двум;
- 2) порядок объекта равен двум, а порядок разложения четырем.

В данном случае предпочтительнее второй вариант, так как отклонение от переходной характеристики звена чистого запаздывания будет меньше.

Заключение. Рассмотрен алгоритм формирования передаточных функций объекта управления исходя из желаемых показателей качества. Согласно этому алгоритму можно одновременно обеспечить несколько показателей качества при формировании желаемой передаточной функции системы управления.

Проведен выбор структуры математической модели желаемого поведения системы управления, состоящей из передаточной функции и аппроксимации звена запаздывания.

Проведена количественная оценка использования аппроксимации звена запаздывания различного порядка в сочетании с передаточной функцией объекта управления. Величина времени запаздывания в этом случае являлась нормированной величиной (относительно продолжительности переходного процесса), что позволило обобщить результаты на многие модели реальных технологических процессов.

Литература

1. Гурецкий Х. Анализ и синтез систем управления с запаздыванием; пер. с пол. М.: Машиностроение, 1974. 328 с.
2. Янушевский Р. Т. Управление объектами с запаздыванием. М.: Наука, 1978. 416 с.
3. Лапето А. В. Анализ методов синтеза систем автоматического управления с запаздыванием // Труды БГТУ. 2011. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 78–80.
4. Буков В. Н., Горюнов С. В., Рябченко В. Н. Анализ и синтез матричных линейных систем. Сравнение подходов // Автоматика и телемеханика. 2000. Вып. 11. С. 3–43.
5. Кузьмицкий И. Ф., Кулаков Г. Т. Теория автоматического управления. Минск: БГТУ, 2010. 574 с.

Поступила 20.03.2014

УДК 681.3

И. Г. Сухорукова, ассистент (БГТУ); **Д. А. Гринюк**, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);
И. О. Оробей, кандидат технических наук, доцент (БГТУ)

АДАПТАЦИЯ КРИТЕРИЯ СЕРИЙ К ПРИМЕНЕНИЮ В УПРАВЛЕНИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ

Статья посвящена вопросам адаптации критерия серий для использования в алгоритмах управления технологическими процессами. Обосновывается применение данного критерия на программируемых логических контроллерах (ПЛК) малой и средней мощности. В качестве объекта с разнообразными источниками получения информации выступала система регулирования температуры воздуха. Объект обладает нелинейными свойствами, которые усложняют его анализ. В программируемом логическом контроллере были реализованы типовые алгоритмы фильтрации. Запись данных и их обработка осуществлялись с помощью MatLAB. Произведена оценка шумов. Выбор настроек критерия производился с учетом динамики объекта и датчиков. Качество фильтрации и наличие статической ошибки влияют на точность метода. Быстродействие современных ПЛК позволяет использовать небольшую длину серии.

The article is devoted to adaptation criterion series for use in process control algorithms. Criterion series proposed for detecting abrupt changes in trend information and diagnostics of device. Justified the use of this criterion on the programmable logic controllers, small and medium power. As the object acted air temperature control system, which has a variety of sources of information. Object has a non-linear properties, which complicates the analysis. In programmable logic controller was implemented standard algorithms filtration. Data recording and processing was carried out using MatLAB. The estimation of noise that affects the sensors thermal object. Selection criterion settings should be done taking into account the dynamics of the object and the sensor. Quality filtration and static errors affect the accuracy of the method. Speed of modern the programmable logic controllers allows to use a small length of the series or multiple series.

Введение. Наличие автоматизации технологических процессов стало обязательным условием в современной экономической среде. Период экстенсивного пути повышения уровня автоматизации за счет установки измерительных приборов с необходимой точностью и настройкой локальных контуров практически завершился. В настоящее время уже недостаточно просто настроить пропорционально-интегрально-дифференциальный регулятор. Получение конкурентных преимуществ требует применения более сложных алгоритмов, адаптации локальных контуров под действием изменяющихся контуров и оптимизации в реальном времени. В англоязычной литературе возник специальный термин: усовершенствованное управление Advanced Process Control (APC) [1, 2].

На сегодняшний момент основные задачи управления реализуются с помощью программируемых логических контроллеров (ПЛК) для построения распределенных систем управления (PCU). Вычислительные ресурсы разных классов ПЛК существенно отличаются. Контроллеры с высоким уровнем ресурсов, которые могут решать широкий класс задач управления, имеют более высокую стоимость. Это является следствием требования по обеспечению работы ПЛК в режиме реального времени. В то же время основную нагрузку по управлению в промышленности выполняют контроллеры с малой и средней вычислитель-

ной мощностью, в которых имеется ограничение на объем памяти и реализацию алгоритмов теории управления [3].

Основная часть. Из теории управления известно, что настройки системы для оптимального переходного процесса по возмущению и сигналу задания имеют отличия. Однако по причине сложности предугадывания ситуаций на объекте управления наладчики оборудования устанавливают единые настройки. На объектах, в которых наблюдаются взаимовлияния отдельных контуров регулирования, настройки регулятора выбираются с еще большим запасом по устойчивости для обеспечения робастности работы контуров.

Одной из возможностей предсказания смены режимов работы настроек системы регулирования при ограничении на вычислительные мощности является использование критерия серий для выявления изменений трендов. Исследования [4] по критерию серий проводились в условиях воздействия на информационный поток случайного процесса, сгенерированного с помощью программы MatLAB. Известно, что результаты, апробированные на математических моделях, нередко расходятся с данными, полученными на реальных объектах. Чаще всего математический аппарат лучше адаптирован к работе с нормальным распределением случайных величин, которое не всегда выполняется в реальных процессах. Применение критерия

серий позволяет реальные данные преобразовать в промежуточные, для которых соблюдается нормальное распределение.

С целью адаптации критерия серий был проведен ряд экспериментов, базой для которых служил контроллер VIPA 200V. Он относится к серии средних ПЛК и может реализовать алгоритмы ПИД-регулирования и цифровой фильтрации. По производительности, объему памяти и функциональности эти контроллеры стоят в одном ряду с такими системами как Simatic S7-300, Modicon TSX Micro, OMRON CJ1, MELSEC AnAS. Время выполнения операции с битами – 0,25 мкс, со словами – 1,2 мкс. Объем памяти: 48 кбайт рабочей памяти, 80 кбайт загрузочной памяти [3].

Методика исследования. Контроллер подключен к оборудованию с тепловыми нагревателями, которые обдувались потоком воздуха. Скорость потока регулировалась путем изменения частоты вращения двигателя вентилятора. В качестве информативных параметров использовались температуры воздуха на входе и выходе, информация о частоте с привода напрямую и через вторичный преобразователь. Каждый из этих информационных каналов обладает своей особенностью, связанной с источником сигнала и способом попадания во входной регистр контроллера в виде цифровых данных.

Контроллер имеет два вида входных аналоговых модулей. Один из модулей имеет 12-битовый выходной цифровой код с максимальным значением 16 384, но с учетом того, что три младших разряда всегда имеют нулевое значение, то весь диапазон разбивается всего на 2048 уникальных комбинаций цифрового кода. У другого модуля контроллера максимальное значение сигнала 27 648. В нашем случае ко второму модулю подключен термометр сопротивления с градуировкой Pt100 (поток 1) и младшему значащему разряду (МЗР) соответствует температура 0,1°C. Однако, как и в первом случае, часть младших разрядов также заполняется нулями (рис. 1). С точки зрения устойчивости использования результатов подобных данных в контурах регулирования, их обычно сглаживают с помощью фильтров. Наиболее простым решением является использование экспоненциального фильтра или скользящего среднего. Поэтому в контроллере для потока 1 были реализованы различные варианты фильтрации. Время дискретизации настраивалось с помощью встроенного механизма организационного блока OB35, который устанавливает время дискретизации $h = 500$ мс как для экспоненциального фильтра с постоянными времени $T = 10$ с (поток 2) или $T = 100$ с (поток 3), так и для скользящего среднего с длиной 6.

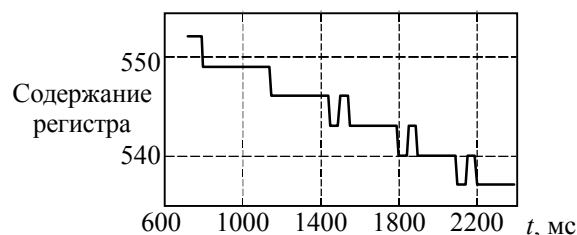


Рис. 1. Изменение во времени t данных потока 1

Для реализации фильтра использовалась формула Эйлера [4]:

$$y_i = \frac{T}{T+h} y_{i-1} + \frac{h}{T+h} x_i, \quad (1)$$

где y_i, y_{i-1} – выход фильтра на данном и предыдущем тактах; x_i – входной сигнал фильтра.

Скользящее среднее реализовано формированием в памяти очереди по принципу FIFO и делением на длину очереди. При этом формировалось два FIFO, в одном случае использовались данные непосредственно с входного регистра в формате integer (поток 4), в другом – в формате real после преобразования с помощью встроенной функции FC105 Step 7 (поток 5).

Термометр сопротивления на входе в объект через интеллектуальный вторичный прибор, настроенный на диапазон 0–150°C, подключался к модулю с 12-битовым АЦП и МЗР $\approx 0,073^\circ\text{C}$ (поток 6). К этому модулю был подключен и сигнал с частотного привода через вторичный прибор с МЗР $\approx 0,024$ Гц (поток 7). Сигнал о частоте напрямую с привода позволял получить МЗР $\approx 0,0018$ Гц (поток 8).

Управление и фиксация данных осуществлялись с помощью MatLAB по структуре обмена данными, приведенной на рис. 2. Опрос данных происходил с частотой 0,1 с. Исходные данные с входных регистров одновременно пропускались через фильтры низкой частоты с постоянными времени 10 и 100 с. Работа критерия оценивалась в условиях ступенчатого изменения сигнала задания по частоте с различным размахом, а также при плавном подъеме и опускании частоты с различной скоростью нарастания. Основные тренды изменения температуры на выходе θ_{out} и входе θ_{in} представлены на рис. 3 и 4.

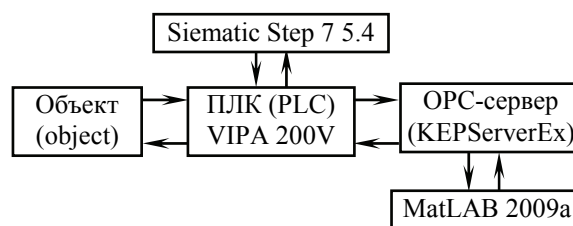


Рис. 2. Структура обмена данными

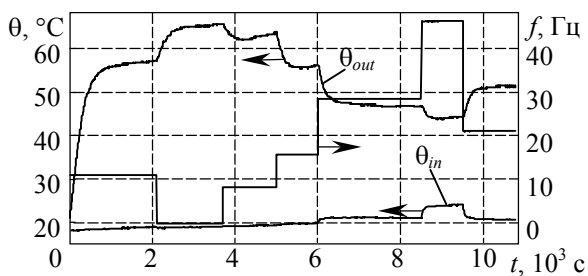


Рис. 3. Переходные процессы на объекте при ступенчатом изменении частоты

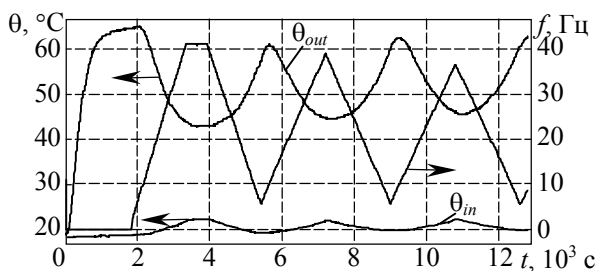


Рис. 4. Переходные процессы на объекте при пилообразном изменении частоты

Контур регулирования $f - \theta_{out}$ характеризуется существенной нелинейностью (рис. 5), которая может меняться под воздействием входной температуры.

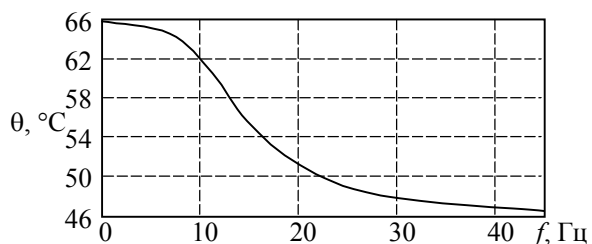


Рис. 5. Статическая характеристика объекта

Результаты и их обсуждение. Данные эксперимента далеки от идеальных условий, которые можно получить в результате имитационного моделирования в MatLAB (рис. 6–7).

Ограничение по разрядности работы входных АЦП, которые являются стандартом для современных контроллеров, существенно «замывают» данные и затрудняют извлечение дополнительной информации из шумовых составляющих измерительных трактов.

Встроенные в MatLAB тесты: Jarque – Bera, Lilliefors, Kolmogorov – Smirnov – указывают на то, что измерительные каналы подвержены влиянию шумов с нормальным распределением. Распределение плотности вероятности для помех измерительных каналов представлены на рис. 8.

Входная температура подвержена влиянию гидродинамики воздушного потока (возможно и температуры двигателя), которые приводят к повышению сигнала измерительного преобразователя θ_{in} с ростом частоты.

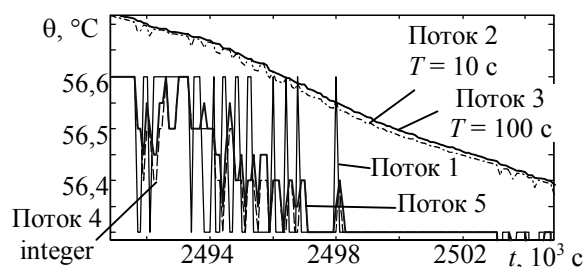


Рис. 6. Фрагмент тренда данных выходной температуры при обработке фильтрами

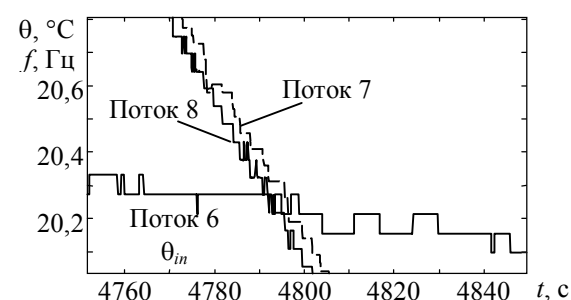


Рис. 7. Фрагмент тренда данных входной температуры и частоты с привода

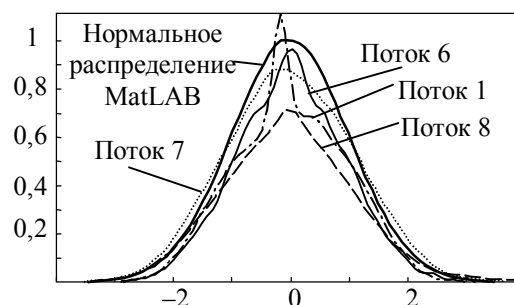


Рис. 8. Распределение плотности вероятности шумов в измерительных каналах и нормальное распределение, сгенерированное функцией random() MatLAB

Некоторые результаты обработки данных относительно среднего значения серий μ отражены на рис. 9–12. Чтобы не утратить преимущество данного критерия, для ПЛК длина серий N не задавалась выше 128. В отличие от математических экспериментов [5], в данном случае присутствует дополнительная настройка времени выборки данных t_i . Выбор t_i зависит от динамических свойств измерительных и регулируемых каналов. Для данного объекта оптимальным является значение в районе 8–12 с.

При $Nt_i = \text{const}$ наблюдается практически полное совпадение (рис. 12). Увеличение длины серии при $Nt_i = \text{const}$ способствует сглаживанию колебаний μ . В случае наличия в работе фильтра существенной статической ошибки относительно исходных данных наблюдается асимметрия реагирования на изменения параметра в сторону повышения или уменьшения.

Графики на рис. 8–11 приведены для фильтра с постоянной времени $T = 100$ с. Для фильтра с меньшей постоянной они более зашумлены и в большей степени нелинейны. Это в первую очередь обусловлено существенной разницей в характеристике между аналоговым фильтром и его цифровой реализацией. При фильтрации данных с помощью MatLAB характеристика получается значительно идеальнее.

Фильтр скользящего среднего не позволил уверенно выявлять тренды ввиду несоизмеримости его длины со скоростями изменения измерительной информации. Формирование FIFO для данного фильтра в MatLAB со значительно большими интервалами позволило обеспечить устойчивую работу критерия серий.

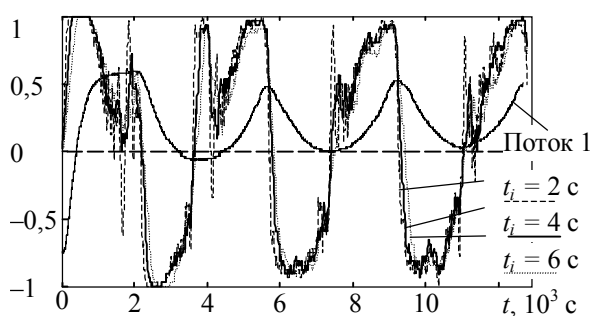


Рис. 9. Относительные изменения θ_{out} и μ при длине серии $N = 48$ и разном времени дискретизации t_i

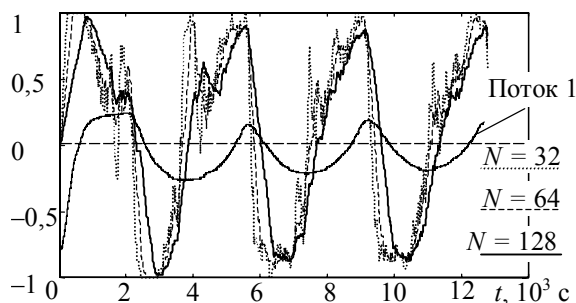


Рис. 10. Относительные изменения θ_{out} и μ при $t_i = 6$ с и разной длине серии

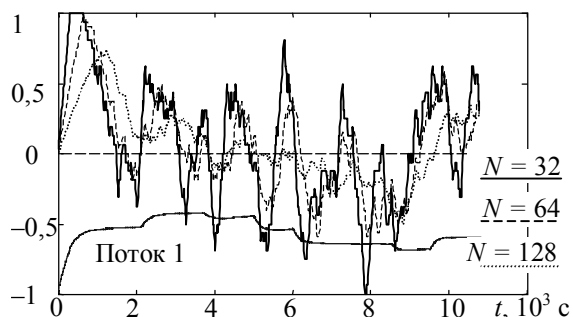


Рис. 11. Относительные изменения θ_{out} и μ при $t_i = 10$ с и разной длине серии

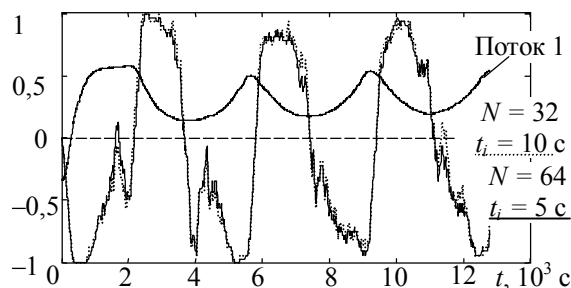


Рис. 12. Относительные изменения θ_{out} и μ при $Nt_i = \text{const}$

Анализ результатов обработки данных с помощью критерия серий по входной температуре не выявил проблем с выявлением нестационарности. Малое проявление дискретизационных эффектов в данном измерительном канале обеспечило устойчивую работу критерия.

Заключение. В целом для задач выявления резких изменений трендов информационных потоков критерий серий проявил себя с наилучшей стороны. Высокое быстродействие ПЛК позволяет ограничиться невысокой длиной серий N для выявления критических явлений. Тщательная настройка N и t_i может позволить производить грубую оценку скорости, особенно, если оценивать μ по нескольким N .

Литература

1. Emerson Process Management [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www2.emersonprocess.com/en-us/brands/deltav/advanced/pages/index.aspx>. Дата доступа: 4.02.2013.
2. Журнал Control Engineering Россия [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://control-engrussia.com/proekty-i-vnedrenija/metody-usovershenstvovannogo-upravlenija-processami>. Дата доступа: 4.02.2013.
3. VIPA GmbH [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.vipa.co.uk/products/system-200v/crus>. Дата доступа: 6.02.2013.
4. Олсон Г., Пиани Д. Цифровые системы автоматизации и управления. СПб.: Невский диалект, 2001. 557 с.
5. Сухорукова И. Г., Оробей И. О., Гринюк Д. А. Эффективность работы адаптации фильтра на критерии серий // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2011. Вып. XIX. С. 107–111.

Поступила 03.03.2014

УДК 621.396

Н. М. Олиферович, ассистент (БГТУ);
Д. А. Гринюк, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);
И. О. Оробей, кандидат технических наук, доцент (БГТУ)

АНАЛИЗ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И ДИНАМИЧЕСКИХ ПОГРЕШНОСТЕЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ВПИТЫВАНИЯ

В статье рассматриваются результаты анализа динамических свойств первичного преобразователя для определения параметров впитывания. При проведении экспериментальных исследований был выполнен ряд опытов по изучению свойств емкостного преобразователя, параметры которого определялись динамикой пропитки фильтровальной бумаги на различных частотах. На основе полученных данных определены зависимости параметров схемы замещения измерительной ячейки от частоты. Установлено, что активная составляющая схемы замещения преобразователя изменяется в широком диапазоне и может осложнять работу классических схем по измерению емкости. Результаты исследования позволяют выбрать схему измерительной цепи параметров преобразователя. Определен оптимальный частотный диапазон работы измерительных преобразователей. Проведен анализ динамических погрешностей измерительных схем.

In the article the results of the analysis of the dynamic properties of sensing device for determine of characteristic of capillary soaking are considered. In carrying out experimental studies a series of experiments was carried out to study the properties of the capacitance transducer. Parameters components of the capacitance transducer determine the dynamics of the soaking of filter paper at different frequencies. Based on these findings have been identified dependencies of the parameters of the equivalent circuit of the measuring cell from the frequency. It has been found that the active component of the equivalent circuit of transducer varies over a wide range and can complicate the conversion of the classical schemes for measuring capacitance. The results of this study allow to select the diagram of measuring circuits of transducer. The optimal frequency range for measuring circuits is identified. Analysed the dynamic errors of measuring circuits.

Введение. Существует ряд приборов, работа которых основана на преобразовании изменения физических величин в изменение емкости: емкостные уровнемеры и манометры, преобразователи влажности и т. д. [1–3].

Измерительные схемы преобразователей могут быть построены на различных принципах, однако наибольшее распространение получили приборы на основе преобразования емкости в частоту (время) за счет мультивибраторов [4] или резонансных контуров [1–2, 5]. Данные подходы к построению измерительных схем в той или иной степени чувствительны к паразитной активной составляющей преобразователей. Учет паразитные составляющие в емкостном преобразователе можно путем использования схем определения полного сопротивления, но такие приборы значительно сложнее в изготовлении и требуют использования микропроцессорных элементов.

Основная часть. Проведенные эксперименты по изучению динамики пропитки фильтровальной бумаги на базе прибора Е7-12 для различных жидкостей показали (таблица) [5], что диапазон изменения параметров схемы замещения (рис. 1, а) измерительного преобразователя достаточно широк. Прибор Е7-12 проводит измерения на частоте 1 МГц. Для оценки динамических свойств на других частотах по-

следовательно с измерительным конденсатором (первичный преобразователь Z_C) включали добавочный резистор R (рис. 1, б). Схему подключали к генератору с переменной частотой, вырабатывающему напряжение U .

Диапазон изменения параметров схемы замещения измерительной ячейки

Среда	Диапазоны сопротивлений, Ом	Диапазоны емкостей, нФ
Вода	163–12 500	0,502–4,73
Вода (замкнутая)	210–5 560	0,575–3,78
Суспензия глины	161–4 170	0,501–4,26
Масло	7140–11 100	0,501–1,46

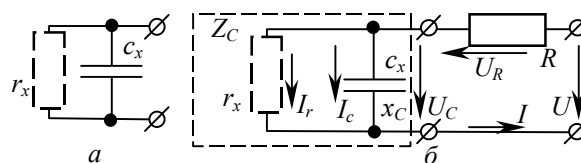


Рис. 1. Схема замещения измерительной ячейки (а) и измерительная схема эксперимента определения частотных характеристик (б)

В процессе измерения на различных частотах контролировали напряжения U_C , U_R и U , после чего производили перерасчет параметров

схемы замещения (рис. 2). Для повышения точности R в процессе измерения подбирались так, чтобы углы α , φ и их сумма была больше 10° , но меньше 80° . Напряжение в измерительной цепи было примерно 10 В, частота изменялась в диапазоне от 10 Гц до 1 МГц.

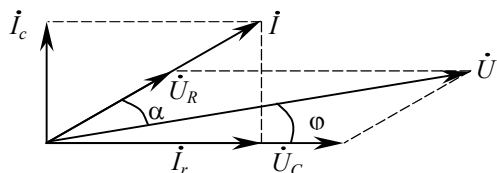


Рис. 2. Векторная диаграмма измерительной схемы

Измерения проводились на сухой и смоченной бумаге, которая получалась добавлением порций по 6 мл с выдержкой времени после полного впитывания. Первичный преобразователь подключался к генератору синусоидальных колебаний, после чего проводились измерения на контрольных частотах. В начале и конце измерения прибором Е7-12 контролировались параметры схемы замещения. Результаты усреднялись по трем сериям измерений.

Результаты эксперимента. Зависимости параметров схемы замещения от частоты представлены на графиках (рис. 3–7).

При проведении измерений контрольные данные с Е7-12 показали, что, несмотря на небольшую продолжительность (не более 6–8 мин) снятия параметров схемы, в бумаге проходят процессы, которые могут изменить параметры схемы замещения до 8%.

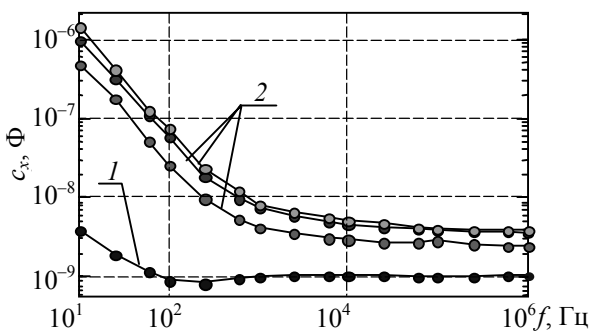


Рис. 3. Зависимость емкости c_x от частоты f для сухой (1) и смоченной (2) бумаги

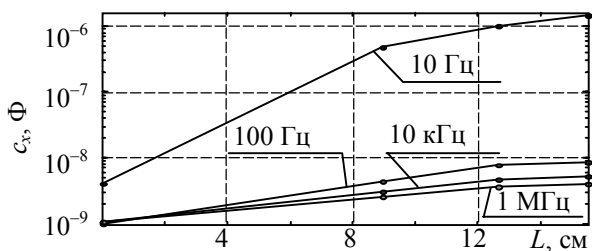


Рис. 4. Зависимость c_x от радиуса L пропитки при различных частотах

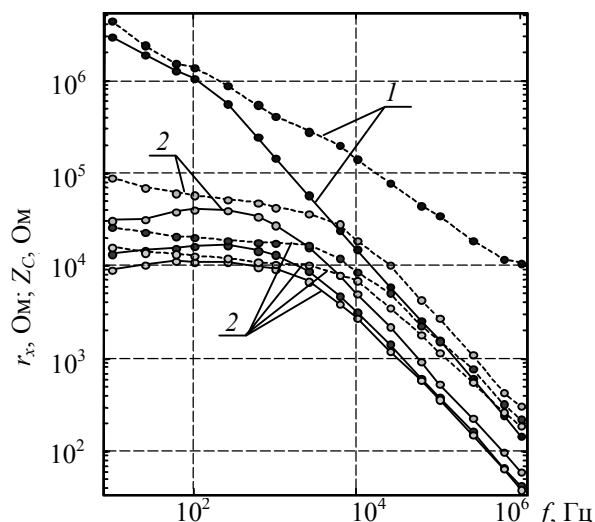


Рис. 5. Зависимость r_x (---) и Z_C (—) от частоты для сухой (1) и смоченной (2) бумаги

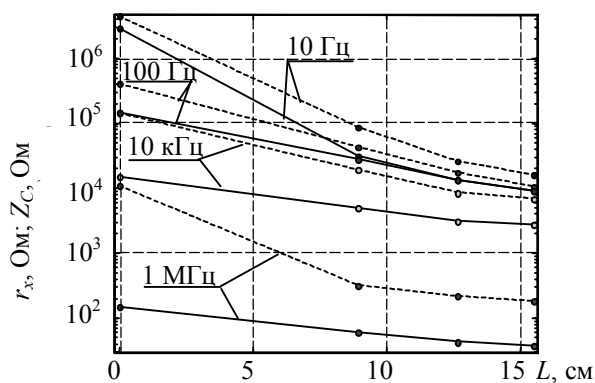


Рис. 6. Зависимость r_x (---) и Z_C (—) от радиуса L пропитки при различных частотах

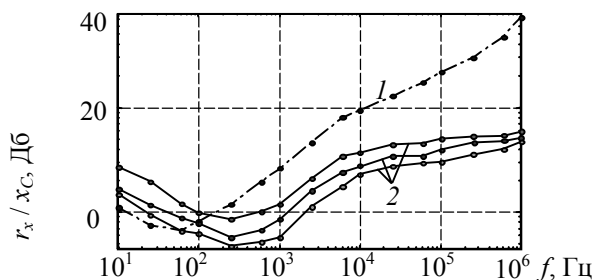


Рис. 7. Зависимость отношения r_x к x_C от частоты для сухой (1) и смоченной (2) бумаги

Сопrotивления r_x и Z_C не могут напрямую использоваться для определения динамики пропитки с помощью резонансной схемы или схемы с мультивибратором, поскольку данные параметры существенно зависят от частоты во всем диапазоне проведенных исследований. По результатам экспериментов кривые зависимости радиуса пропитки от емкости имеют более линейный характер (рис. 4), что указывает на предпочтительное их использование для построения преобразователя измерителя емкости.

Использование c_x для идентификации динамики пропитки может быть положено в основу любого из рассмотренных принципов построения преобразователей. Начиная с 2,5 кГц зависимость емкости от частоты минимальна. Кроме того, увеличивается отношение между сопротивлениями r_x и x_C (рис. 7), уменьшается влияние r_x на точность измерения. Однако сдвиг рабочего диапазона преобразователей в сторону увеличения частоты будет приводить к увеличению измерительных токов, поскольку r_x быстро снижается и уже на частоте 100 кГц становится меньше 1 кОм.

Динамические погрешности измерительных схем. Измерительная схема на 555-м таймере не может быть использована напрямую, так как резкое снижение активного сопротивления r_x после начала впитывания исказит результаты преобразования емкости в частоту колебаний. Дополнительная емкость C , включенная параллельно измерительной ячейке или последовательно с ней (рис. 8), и снижение сопротивления обратной связи R могут расширить диапазон преобразования, но результаты измерений будут получаться с серьезными погрешностями.

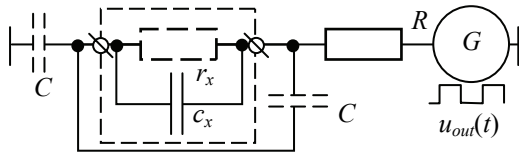


Рис. 8. Схема преобразования c_x во временные параметры

Данный принцип можно реализовать на операционных усилителях, которые имеют меньше ограничений. Изменение напряжения, подведенного к цепи заряда – разряда, и (или) напряжений срабатывания компараторов в зависимости от текущего значения сопротивления r_x может позволить решить задачу устойчивого преобразования c_x во время.

Еще одной проблемой является наличие динамических погрешностей в начале пропитки.

Проявление динамической погрешности оказывает максимальное влияние на начальной стадии пропитки. В простейшем случае функции изменения емкости и сопротивления между моментами измерения можно считать линейными с коэффициентами усиления:

$$c_{i+1} = c_i(1 + k_C t); r_{i+1} = r_i(1 - k_R t), \quad (1)$$

где c_i, c_{i+1} – значения емкости при i -м и $(i + 1)$ -м измерениях; r_i, r_{i+1} – значения сопротивления при i -м и $(i + 1)$ -м измерениях; k_C, k_R – линейные коэффициенты усиления емкости и сопротивления соответственно (их величину в процессе

измерения можно определять по результатам предыдущих измерений).

В общем случае уравнение для заряда последовательно соединенного резистора R и измерительного конденсатора можно записать в виде

$$\frac{du_C}{dt} + \frac{u_C(Rc_i)^{-1} \left(\frac{Rr_i^{-1}}{1 - k_R t} + 1 \right)}{1 + k_C t} = \frac{U(Rc_i)^{-1}}{1 + k_C t}. \quad (2)$$

Решение уравнения (2) напрямую затруднительно. Однако можно принять, что на начальном этапе $R \ll r_i$, и (2) преобразуется к виду

$$\frac{du_C}{dt} + \frac{u_C}{Rc_i(1 + k_C t)} = \frac{U}{Rc_i(1 + k_C t)}. \quad (3)$$

Учесть влияние изменения активной части сопротивления можно путем уменьшения напряжения U , которое можно найти через делитель напряжения R и r_i .

Решив уравнение (3) при условии $t = 0$ и $u_C = 0$, можно получить выражение для расчета динамики заряда емкости:

$$u_C(t) = U \left(1 - (1 + k_C t)^{\frac{-1}{Rc_i k_C}} \right). \quad (4)$$

При условии переключений по уровням от 1/3 до 2/3 от приложенного напряжения для определения времени заряда получаем формулу

$$\Delta t = 3 \frac{1}{Rc_i k_C} k_C^{-1} - 1,5 \frac{1}{Rc_i k_C} k_C^{-1}. \quad (5)$$

При использовании гармонического воздействия возможно формирование сигнала как от источника тока, так и от источника напряжения. Часто можно встретить поочередное формирование разных типов воздействий, а затем обработку результатов с помощью преобразований Фурье. Значительное изменение емкости преобразователя за период сигнала приведет к появлению более высоких гармоник. При воздействии источника напряжения ток на выходе описывается выражением

$$i_C = U \left(\omega c_i(1 + k_C t) \cos(\omega t) + \frac{\sin(\omega t)}{r_i(1 - k_R t)} \right),$$

которое получено из тех же допущений, что и при использовании режима заряда – разряда.

Разложение в ряд Фурье с использованием значений из экспериментов для сухой бумаги на частоте 100 Гц, а также при уменьшении и увеличении r_x на 25% позволяет получить следующие зависимости относительной погрешности γ от влияния искажения формы сигнала на определение r_x и x_C без учета изменения ис-

комых параметров за период гармонического воздействия по отношению к $c_i(r_i)$ и $c_{i+1}(r_{i+1})$ (рис. 9). При построении кривых скорости изменения емкости и сопротивления принимались одинаковыми $k_C = k_R = k$.

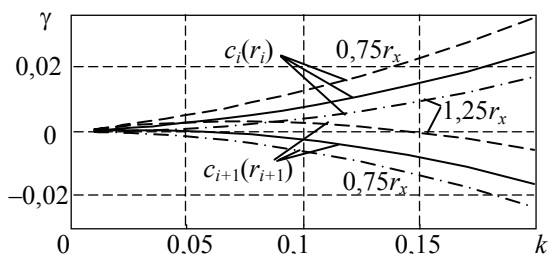


Рис. 9. Зависимость погрешности γ от скорости изменения k при разных соотношении между r_x и x_C

Произведена оценка влияния искажения формы кривой заряда от изменения во времени параметров r_x и x_C при определении емкости по времени между уровнями 2/3 и 1/3 от приложенного напряжения (рис. 10, 11). Значения r_x и x_C корректировали в зависимости от времени заряда Δt в соответствии с экспериментальными данными. Графики получались при изменении сопротивления R , уменьшении и увеличении r_x на 25%.

Выводы. Проведенные исследования показывают, что контроль емкости с целью определения координаты пропитки является наилучшим решением. Активное сопротивление измерительного конденсатора может вносить существенные погрешности в процесс измерения. Лучшими точностными характеристиками будут обладать схемы на гармонических сигналах с постоянной частотой. Схемы преобразования емкости во временные параметры сигнала не должны снижать частоту ниже 5 кГц, где у емкости может наблюдаться зависимость от частоты. Измерительные алгоритмы должны осуществлять проверку на скорость измерения параметров на начальной стадии пропитки и по необходимости вносить корректировку в получаемые результаты из-за искажений формы сигнала от линейной. Меткой времени полученного результата при любом измерительном принципе лучше выбирать окончание измерительного такта.

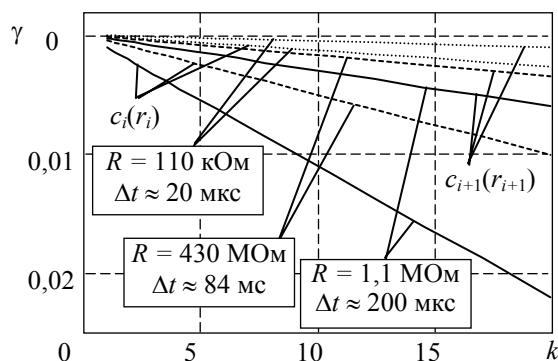


Рис. 10. Зависимость погрешности γ от скорости изменения k при варьировании сопротивления R

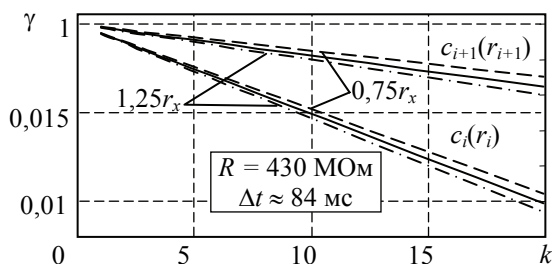


Рис. 11. Зависимость относительной погрешности γ от параметра k при разном соотношении между r_x и x_C

Литература

1. Шишмарев В. Ю. Средства измерений: учебник для студ. учреждений с проф. образованием. 4-е изд., стер. М.: Академия, 2010. 320 с.
2. Khandpur R. S. Handbook of Analytical Instruments. London: McGraw-Hill Professional, 2006. 770 p.
3. Гринюк Д. А., Оробей И. О., Богослав Н. М. Устройство непрерывного измерения процесса смачивания // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2011. Вып. XVIII. С. 108–112.
4. Vladimir Mitrovic. Pico С. // Elektor Electronics. 2011. № 4. P. 24–29.
5. Богослав Н. М., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Экспериментальное исследование динамики круговой пропитки // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 99–103.

Поступила 01.03.2014

УДК 65.011.56

Г. В. Абрамов, доктор технических наук, профессор (ВГУИТ, Россия); **Л. А. Коробова**, кандидат технических наук, доцент (ВГУИТ, Россия); **И. А. Матыцина**, аспирант (ВГУИТ, Россия); **Д. С. Карпович**, кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой (БГТУ); **Р. А. Шуленков**, ассистент-стажер (БГТУ)

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ЗВУКОВЫХ СИГНАЛОВ

В статье рассматривается применение нечеткой логики для распознавания звуковых сигналов. Источником звукового сигнала является астматический, туберкулезный кашли. Производится математический и программный анализ выборок кашлевых звуковых фрагментов. Формируются лингвистические переменные и формулируются функции принадлежности для математических переменных анализа фрагментов данных. В статье детально описывается алгоритм формирования нечетких выводов, а также применение различных алгоритмов нечетких регуляторов (Мамдани). Разработано программное и аппаратное решение для диагностирования и анализа звуковой дорожки кашля пациента с формированием заключения о классификации кашля и дальнейшем (амбулаторном) лечении.

The article discusses the use of fuzzy logic to detect sounds. Sound source is asthmatic, tuberculosis coughs. Made math and analysis software samples cough sound fragments. Formed linguistic variables and the membership functions are formulated for mathematical variables fragment analysis data. The article describes in detail the algorithm for forming fuzzy conclusions as well as the use of various algorithms of fuzzy controllers (Mamdani). Developed software and hardware solution for the diagnosis and analysis track coughing patient with forming an opinion on the classification of cough and further (outpatient) treatment.

Введение. В настоящее время интенсивно развивается автоматизация и информатизация различных процессов. Медицина не является исключением. Наблюдение за астматиками, людьми, болеющими туберкулезом, – длительный и ответственный процесс. В медицине существует необходимость наблюдения за пациентом в течение длительного срока (час, сутки и т. д.). Для этого следует собрать звуковую запись пациента необходимой длины. Затем необходима обработка этой записи [1]. Она длинна и разнопланова. Поэтому медикам для обработки записи необходима помощь математиков и программистов с применением информационных технологий. В результате появилась необходимость разработать систему диагностики состояния больных бронхиальной астмой и туберкулезом по звуковым записям кашлей [2].

Каждый человек имеет индивидуальные особенности голоса (тембр, громкость, различия в зависимости от пола, возраста и т. д.). Все кашли подразделяются на типы – сухой, влажный и продуктивный, которые зависят от вида и тяжести заболевания. Кашли разных людей различны. Кроме того, даже кашли одного человека сильно отличаются друг от друга в зависимости от ситуации. Если говорить о собранной звуковой записи в течение определенного времени, то на нее попадают не только кашель пациента, но и другие шумы. Звук некоторых шумом однозначно отличается от кашля, но есть и похожие на кашель. Поэтому задача отсеивания звуковых сигналов шума и кашлей является актуальной.

Основная часть. При обработке звуковой записи для выделения кашлевых фрагментов были

рассмотрены и проанализированы следующие показатели: коэффициент корреляции Пирсона; коэффициент корреляции Спирмена; среднее квадратическое отклонение; дисперсия; Байесовская оценка; интервальная оценка; преобразование Фурье; вейвлет преобразование; интегральная оценка.

Для получения результата по этим показателям нам необходимо использовать нечеткую логику и сформулировать правила вывода.

Лингвистическая переменная является переменной более высокого порядка, чем нечеткая переменная, в том смысле, что значениями лингвистической переменной являются нечеткие переменные. Лингвистические переменные предназначены в основном для анализа сложных или плохо определенных явлений. Использование словесных описаний типа тех, которыми оперирует человек, делает возможным анализ таких сложных систем, которые недоступны обычному математическому анализу.

Более точно структура лингвистической переменной описывается набором (N, T, X, G, M) , в котором N – название этой переменной; T – термы множества N , т. е. совокупность ее лингвистических значений; X – универсальное множество с базовой переменной x ; G – синтаксическое правило, которое может быть задано в форме бесконтекстной грамматики, порождающей термы множества T ; M – семантическое правило, которое каждому лингвистическому значению t ставит в соответствие его смысл $M(t)$, причем $M(t)$ обозначает нечеткое подмножество множества X [3].

Значениями лингвистической переменной являются нечеткие множества, символами ко-

торых выступают слова и предложения в естественном или формальном языке, служащие, как правило, некоторой элементарной характеристикой явления.

В качестве рассматриваемых функций принадлежности можно использовать Л-функции и трапециевидные функции. Данный выбор обусловлен широким распространением именно этих зависимостей из-за их универсальности и простоты реализации в случае применения аппаратного способа решения поставленной задачи [4–7].

Термы функции принадлежности для лингвистической переменной «Коэффициент корреляции» формируются в виде аналитических зависимостей, представленных в табл. 2. Графическая интерпретация функции принадлежности представлена на рис. 1.

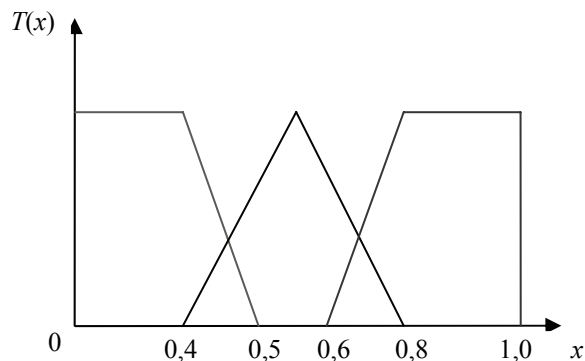


Рис. 1. График функций принадлежности переменной «Коэффициент корреляции»

Расчет функций принадлежности для лингвистической переменной «Отклонение амплитуд» приведен в табл. 3 и на рис. 2.

Таблица 2

Функции принадлежности для переменной «Коэффициент корреляции»

Уровень	Математическое описание термы множества
Высокий	$T(x) = \begin{cases} 1 - \frac{0,8-x}{0,2}; & 0,6 \leq x \leq 0,8, \\ 1; & 0,8 \leq x \leq 1, \\ 1; & c = d = 1, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$
Средний	$T(x) = \begin{cases} 1 - \frac{0,6-x}{0,2}; & 0,4 \leq x \leq 0,6, \\ 1 - \frac{x-0,6}{0,2}; & 0,6 \leq x \leq 0,8, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$
Низкий	$T(x) = \begin{cases} 1; & a = b = 0, \\ 1; & 0 \leq x \leq 0,4, \\ 1 - \frac{x-0,4}{0,1}; & 0,4 \leq x \leq 0,5, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$

Таблица 3

Функции принадлежности для переменной «Отклонение амплитуд»

Уровень	Математическое описание термы множества
Высокий	$T(x) = \begin{cases} 1 - \frac{0,8-x}{0,2}; & 0,6 \leq x \leq 0,8, \\ 1; & 0,8 \leq x \leq 1, \\ 1; & c = d = 1, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$
Средний	$T(x) = \begin{cases} 1 - \frac{0,5-x}{0,3}; & 0,2 \leq x \leq 0,5, \\ 1 - \frac{x-0,5}{0,3}; & 0,5 \leq x \leq 0,8, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$
Низкий	$T(x) = \begin{cases} 1; & a = b = 0, \\ 1; & 0 \leq x \leq 0,2, \\ 1 - \frac{x-0,2}{0,2}; & 0,2 \leq x \leq 0,4, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$

Таблица 1

Описание лингвистических переменных

Переменная из набора	Коэффициент корреляции	Отклонение амплитуд	Среднее значение отрицательной амплитуды	Среднее значение положительной амплитуды
<i>N</i>	Коэффициент корреляции	Отклонение амплитуд	Среднее значение отрицательной амплитуды	Среднее значение положительной амплитуды
<i>T</i>	Высокий, средний, низкий	Высокое, среднее, низкое	Высокое, среднее, низкое	Высокое, среднее, низкое
<i>X</i>	[0; 1]	[0; 1]	[0; 1]	[0; 1]
<i>G</i>	Не, очень, не очень	Не, очень, не очень	Не, очень, не очень	Не, очень, не очень

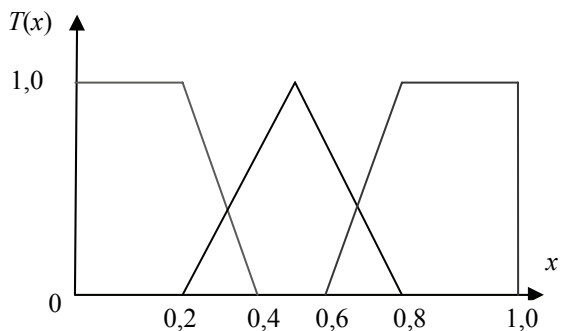


Рис. 2. График функций принадлежности переменной «Отклонение амплитуд»

Расчет функций принадлежности для лингвистической переменной «Среднее значение отрицательной амплитуды» приведен в табл. 4 и на рис. 3.

Таблица 4

Функции принадлежности для переменной «Среднее значение отрицательной амплитуды»

Уровень	Математическое описание термы множества
Высокий	$T(x) = \begin{cases} 1 - \frac{0,6-x}{0,05}; & 0,55 \leq x \leq 0,6, \\ 1; & 0,6 \leq x \leq 1, \\ 1; & c = d = 1, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$
Средний	$T(x) = \begin{cases} 1 - \frac{0,5-x}{0,1}; & 0,4 \leq x \leq 0,5, \\ 1 - \frac{x-0,5}{0,1}; & 0,5 \leq x \leq 0,6, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$
Низкий	$T(x) = \begin{cases} 1; & a = b = 0, \\ 1; & 0 \leq x \leq 0,4, \\ 1 - \frac{x-0,4}{0,05}; & 0,4 \leq x \leq 0,45, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$

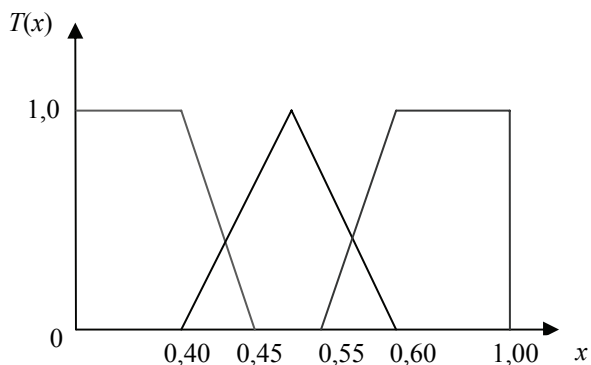


Рис. 3. График функций принадлежности переменной «Среднее значение отрицательной амплитуды»

Расчет функций принадлежности для лингвистической переменной «Среднее значение положительной амплитуды» приведен в табл. 5 и на рис. 4.

Таблица 5

Функции принадлежности для переменной «Среднее значение положительной амплитуды»

Уровень	Математическое описание термы множества
Высокий	$T(x) = \begin{cases} 1 - \frac{0,6-x}{0,05}; & 0,55 \leq x \leq 0,6, \\ 1; & 0,6 \leq x \leq 1, \\ 1; & c = d = 1, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$
Средний	$T(x) = \begin{cases} 1 - \frac{0,5-x}{0,1}; & 0,4 \leq x \leq 0,5, \\ 1 - \frac{x-0,5}{0,1}; & 0,5 \leq x \leq 0,6, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$
Низкий	$T(x) = \begin{cases} 1; & a = b = 0, \\ 1; & 0 \leq x \leq 0,4, \\ 1 - \frac{x-0,4}{0,05}; & 0,4 \leq x \leq 0,45, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях} \end{cases}$

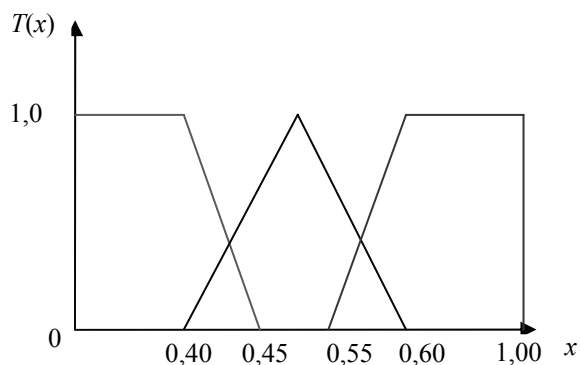


Рис. 4. График функций принадлежности переменной «Среднее значение положительной амплитуды»

В результате сформируем следующие правила нечеткого вывода:

ЕСЛИ все показатели низкие, ТО Шум
ЕСЛИ один из показателей средний, остальные низкие, ТО Шум;

ЕСЛИ один из показателей высокий, остальные низкие, ТО Шум;

ЕСЛИ все показатели средние, ТО возможно Кашель;

ЕСЛИ один из показателей низкий, остальные высокие, ТО возможно Кашель;

ЕСЛИ один из показателей высокий, остальные средние, ТО возможно Кашель;

ЕСЛИ одна половина показателей высокие, а другая низкие, ТО возможно Кашель;

ЕСЛИ один показатель средний, остальные высокие, ТО Кашель;

ЕСЛИ все показатели высокие, ТО Кашель.

По полученным данным была написана программа распознавания и обработки звуковых сигналов.

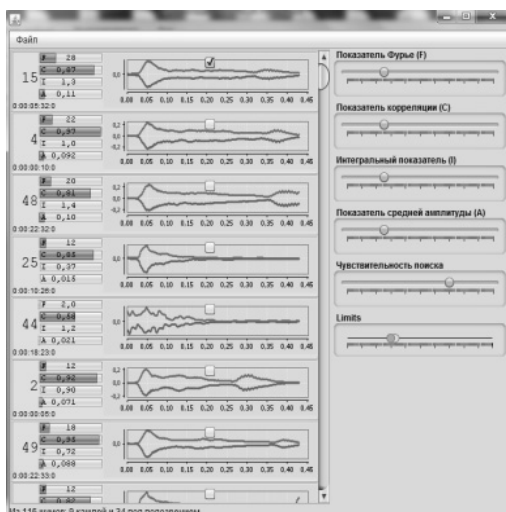


Рис. 5. Графический интерфейс программы распознавания звуковых сигналов

В результате обработки выбранной записи происходит сортировка фрагментов на кашли, близкие к кашлям и шумы по определенному алгоритму. Итогом работы программы являются выделенные по цветам дорожки:

- светло-зеленым цветом выделены звуковые дорожки, которые являются кашлями;
- темно-зеленым цветом – возможно кашли;
- серым – шумы.

Выводы. В итоге получили следующие результаты:

- 1) разработанная программа дает врачу дополнительную информацию, основанную на статистической обработке звукового сигнала;
- 2) программное обеспечение (ПО) позволяет выделять кашли из звуковой записи, что дает больше информации лечащему врачу при принятии решения;
- 3) ПО позволяет проводить анализ записи с целью выделения кашлей разных видов;
- 4) ПО производит выделение шумов, близких к кашлю, с целью их исключения;
- 5) в настоящее время ведется уточнение логики построения алгоритмов и доработка программного продукта с целью повышения достоверности результата.

Литература

1. Исаев Ю., Мойсюк Л. Бронхиальная астма. Конвенциональные и неконвенциональные методы лечения. М.: КУДИЦ-ПРЕСС, 2008. 168 с.
2. McLuckie A. Respiratory disease and its management. New York: Springer, 2009. 51 p.
3. Заде Л. А. Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений. М.: Мир, 1976. 165 с.
4. Kevin M. Passino, Stephen Yurkovich. Fuzzy Control. Menlo Park, CA: Addison Wesley Longman, 1998. 522 p.
5. Kazuo Tanaka, Hua O. Wang. Fuzzy control systems design and analysis: a linear matrix inequality approach. Menlo Park, CA: John Wiley and Sons, 2001. 101 p.
6. Cox E. Fuzzy fundamentals // IEEE. Vol. 29, No. 10. P. 58–61.
7. Cox E. (Feb. 1993) Adaptive fuzzy systems // IEEE. Vol. 30, No. 2. P. 7–31.

Поступила 01.03.2014

УДК 621.391.26

А. А. Дятко, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);
С. М. Костромицкий, доктор технических наук, профессор (КБ «Радар»);
П. Н. Шумский, кандидат технических наук, доцент (КБ «Радар»)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТИПОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ ДЛЯ ПОЛУНАТУРНЫХ ИСПЫТАНИЙ

Рассмотрен метод расчета координат типовых траекторий летательного аппарата в дискретные моменты времени, используемых при моделировании работы радиолокационных станций при полунатурном испытании их работоспособности. Метод заключается в определении координат требуемой траектории, когда ее плоскость параллельна плоскости XU декартовой системы координат XYZ и находится относительно ее на нулевой высоте. Координаты требуемого положения траектории в пространстве могут быть получены путем поворота расчетной траектории вокруг соответствующих координатных осей на заданные углы и смещения ее в нужную область пространства.

Describes the method of calculating the coordinates of typical aircraft trajectories in the discrete moments of time, which used for modelling of work radar stations at seminatural test of their working capacity. The method consists in definition of coordinates of a demanded trajectory when its plane is parallel to a plane XU of the Cartesian system of coordinates XYZ and is rather it at zero height. The coordinates corresponding to demanded position of a trajectory in space, can be received by turn of a settlement trajectory round corresponding coordinate axes on set corners and its displacement in the necessary area of space.

Введение. Как уже отмечалось в статье [1], при разработке и испытаниях РЛС все большее распространение получают полунатурные испытания. В этом случае совокупность сигналов и помех на входе системы моделируется с помощью имитаторов. Для формирования эхосигналов в имитаторах используются математические модели радиолокационных объектов, которые должны обеспечивать адекватное моделирование эхосигнала при минимальных вычислительных затратах [1]. Так, при обработке алгоритмов обнаружения и сопровождения целей в радиолокационных станциях в качестве радиолокационного объекта выступает летательный аппарат, который перемещается в пространстве по некоторой типовой траектории. Для правильного моделирования сигнала, отраженного от такого объекта, необходимо иметь координаты его траектории.

В данной работе рассматривается возможная методика расчета координат двух типовых траекторий движения летательного аппарата: траектории «эллипс» и траектории «отворот».

Основная часть. Траектория «Эллипс». Для формирования координат траектории (рис. 1) рассмотрим алгоритм, суть которого заключается в том, что сначала формируется траектория, лежащая в плоскости XU декартовой системы координат, а затем путем необходимых вращений и смещений вокруг и вдоль координатных осей плоскость траектории помещается в нужную область пространства.

Исходными данными для расчета координат траектории являются: a – длина полуоси эллипса по оси X ; b – длина полуоси эллипса по оси Y ;

φ_1 – начальное значение параметра φ (точка A , рис. 1); φ_2 – конечное значение параметра φ (точка B , рис. 1); Δt – интервал дискретизации во времени при расчете координат точек траектории; v – средняя скорость движения цели по дуге траектории от φ_1 до φ_2 ; $\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z$ – углы для последовательного поворота начальной траектории ($z = 0$) вокруг осей X, Y и Z соответственно; $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ – значения смещений вдоль осей X, Y и Z соответственно для переноса траектории, полученной после вращения.

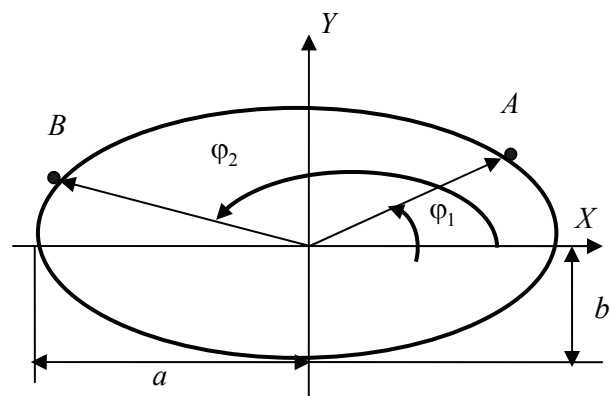


Рис. 1. Исходное расположение траектории «эллипс» в системе координат XYZ

Выражения для расчета координат эллиптической траектории в дискретные моменты времени (при $z = 0$) имеют вид

$$\begin{cases} x_i = a \cos(\varphi_1 + i\Delta\varphi), \\ y_i = b \sin(\varphi_1 + i\Delta\varphi), \quad i = 0, 1, \dots, N-1, \\ z_i = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где $\Delta\varphi = (\varphi_2 - \varphi_1) / (N - 1)$ – интервал дискретизации по параметру φ ; $N = T / \Delta t + 1$ – число отсчетов на траекторию; $T = L / v$ – время полета цели по дуге AB (рис. 1); длина дуги AB

$$L = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \sqrt{\left(\frac{d}{d\varphi}[x(\varphi)]\right)^2 + \left(\frac{d}{d\varphi}[y(\varphi)]\right)^2} \cdot d\varphi. \quad (2)$$

Из наборов координат (1) образуем матрицу:

$$W = \begin{pmatrix} x_0 & x_1 & \dots & x_N \\ y_0 & y_1 & \dots & y_N \\ z_0 & z_1 & \dots & z_N \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 & x_1 & \dots & x_N \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Последовательно повернем траекторию вокруг координатных осей X, Y, Z и переместим ее в заданную точку пространства, выполнив смещения вдоль координатных осей соответственно на $\Delta x, \Delta y$ и Δz .

В результате требуемые координаты траектории «эллипс» в форме (3) будут определяться соотношением [2]

$$M = F_{TZYX}W, \quad (4)$$

где

$$F_{TZYX} = T(\Delta x, \Delta y, \Delta z)R_Z(\varphi_z)R_Y(\varphi_y)R_X(\varphi_x);$$

$R_X(\varphi), R_Y(\varphi)$ и $R_Z(\varphi)$ – матрицы аффинных преобразований координат объекта при его повороте вокруг координатных осей X, Y и Z соответственно против часовой стрелки на угол φ [2]; $T(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ – матрица аффинных преобразований координат объекта при его смещении вдоль координатных осей X, Y и Z на $\Delta x, \Delta y$ и Δz соответственно [2].

Траектория «отворот». Исходное положение траектории «отворот» в пространстве представлено на рис. 2. Прямые AB и CD являются касательными к дуге траектории в точках B и C соответственно и образуют прямые углы с радиус-векторами, проведенными в эти точки ($\angle ABO = 90^\circ$ и $\angle OCD = 90^\circ$). Расчет траектории выполним для координаты $z = 0$.

Запишем исходные данные для расчета траектории (обозначения соответствуют рис. 2): r – радиус кривизны траектории; φ_c – угол для точки $C(x_c, y_c)$ (от оси Y по часовой стрелке); φ_b – угол для точки $B(x_b, y_b)$ (от оси Y против часовой стрелки); L_1 – длина участка AB ; L_2 – длина участка CD ; v_1 – средняя скорость цели на участке AB ; v_2 – средняя скорость цели на участке CD ; v_φ – скорость цели на участке BC ; Δt – интервал дискретизации по времени при расчете точек траектории; $\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z$ – углы для последовательного поворота траек-

тории, построенной в плоскости XY ($z = 0$), вокруг координатных осей X, Y и Z соответственно; $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ – значения смещений вдоль координатных осей X, Y и Z соответственно для переноса траектории, полученной после вращения.

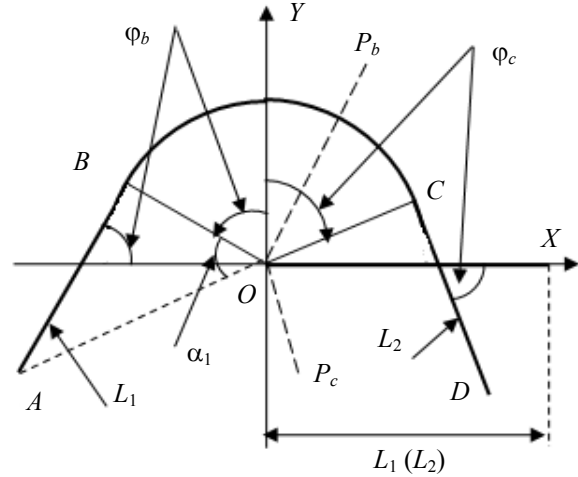


Рис. 2. Исходное расположение траектории «отворот» в системе координат XYZ

Траектория «отворот» может быть составлена из двух фрагментов линейной траектории (AB и CD) и одного фрагмента эллиптической (BC). Алгоритм формирования координат эллиптической траектории рассмотрен выше, а расчет координат линейной траектории проводится по аналогичной методике и не представляет сложности ввиду его простоты. Задача расчета траектории «отворот» заключается в том, чтобы по приведенным выше исходным данным получить параметры, которые необходимы для алгоритмов формирования линейной и эллиптической траекторий. Получим эти параметры, воспользовавшись рис. 2.

I. Определяем координаты точки A :

$$\alpha_1 = \arctg \frac{L_1}{r}; \quad (5)$$

$$\phi_a = \frac{\pi}{2} + \phi_b + \alpha_1; \quad (6)$$

$$\begin{cases} x_a = \sqrt{r^2 + L_1^2} \cos \phi_a, \\ y_a = \sqrt{r^2 + L_1^2} \sin \phi_a. \end{cases} \quad (7)$$

II. Находим координаты точки C :

$$\begin{cases} x_c = r \sin \varphi_c, \\ y_c = r \cos \varphi_c. \end{cases} \quad (8)$$

III. Формируем данные для расчета линейной части траектории AB : вектор вращений

$$\Phi_{AB} = (\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z)^T = (0, 0, \varphi_b)^T \quad (9)$$

и вектор смещений

$$R_{AB} = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)^T = (x_a, y_a, 0)^T. \quad (10)$$

IV. Формируем данные для расчета линейной части траектории CD : вектор вращений

$$\Phi_{CD} = (\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z)^T = (0, 0, -\varphi_c)^T \quad (11)$$

и вектор смещений

$$R_{CD} = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)^T = (x_c, y_c, 0)^T. \quad (12)$$

По исходным и рассчитанным данным формируем линейные и криволинейный участки траектории.

На рис. 2 луч OP_b показывает положение прямой L_1 после вращения на угол φ_b из исходного состояния на оси OX , а луч OP_c показывает положение прямой L_2 после вращения на угол $-\varphi_c$ из исходного состояния на оси OX .

Таким образом, алгоритм формирования массива отсчетов декартовых координат траектории «отворот» можно представить как последовательность следующих этапов: получить массив отсчетов M_1 линейной части траектории на участке AB для координаты $z = 0$; получить массив отсчетов M_3 линейной части траектории на участке CD для координаты $z = 0$; получить массив отсчетов M_2 криволинейной части траектории на участке BC для координаты $z = 0$; образовать массив координат всей траектории (для координаты $z = 0$) M_Σ путем последовательной пристыковки справа матрицы M_2 к матрице M_1 и матрицы M_3

к полученной матрице ($M_\Sigma = M_1 \leftarrow M_2 \leftarrow M_3$); выполнить над массивом координат траектории необходимые аффинные преобразования, $M^1 = F_{TZYX} M_\Sigma$.

Полученный таким образом массив M^1 будет содержать в своих столбцах координаты траектории «отворот».

Замечание. При выполнении операции пристыковки матриц (стыковка соседних участков траектории) следует иметь в виду, что при вышеописанной методике расчета траектории последний столбец матрицы слева и первый столбец матрицы справа определяют одну и ту же координату. Повторяющуюся координату следует удалить.

Заключение. Рассмотрен метод расчета координат типовых траекторий летательного аппарата в дискретные моменты времени. Метод основан на вычислении координат требуемой траектории, когда она расположена в плоскости, параллельной земной поверхности, и на нулевой высоте. Показано, что координаты требуемого положения траектории в пространстве могут быть получены путем поворота расчетной траектории вокруг соответствующих координатных осей на заданные углы и смещения ее в нужную область пространства.

Литература

1. Дятко А. А., Костромицкий С. М., Шумский П. Н. Математическая модель динамики облака дипольных отражателей // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 115–118.
2. Порев В. Н. Компьютерная графика. СПб.: БХВ-Петербург, 2002. 428 с.

Поступила 05.03.2014

УДК 621.391.26

С. Н. Ярмолик, кандидат технических наук, доцент (ВАРБ);
А. А. Дятко, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);
П. Н. Шумский, кандидат технических наук, доцент (КБ «Радар»);
А. С. Храменков, аспирант (ВАРБ)

ОЦЕНКА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕШАЮЩЕЙ СТАТИСТИКИ В ЗАДАЧАХ РАДИОЛОКАЦИОННОГО ОБНАРУЖЕНИЯ И РАСПОЗНАВАНИЯ ОБЪЕКТОВ

В статье произведен анализ способов оценивания плотности вероятности квадратичного функционала (КФ) от комплексных гауссовых отсчетов, характеризующихся заданными корреляционными свойствами. Приведены результаты математического моделирования аппроксимирующих рядов, основанных на системах ортогональных полиномов, показаны их достоинства и недостатки. Проанализирован способ формирования дискретного распределения квадратичного функционала, основанный на преобразовании его характеристической функции (ХФ).

Ways of assessment probability density of normally distributed signal are analyzed in the article. Results of mathematic modeling of approximation lines based on orthogonal polynomials are introduction. The way which used transformation of characteristic function is secure adequate quality of estimation of probability density.

Введение. Задача радиолокационного наблюдения объектов затрудняется наличием шумов и мешающих отражений. Ограниченность времени наблюдения объектов, флуктуации сигналов и наличие радиолокационного фона обуславливают статистический характер решаемых задач [1]. Процесс обнаружения и классификации радиолокационных объектов требует поиска оптимальных методов обработки наблюдаемых реализаций, обеспечивающих выбранный критерий оптимальности, что предполагает формирование и сопоставительный анализ решающей статистики [2].

В большинстве случаев наблюдаемые реализации сигнала (\mathbf{f}) принято характеризовать гауссовскими плотностями вероятностей (ПВ):

$$p(\mathbf{f}) = \frac{1}{(2\pi)^N \det \|\mathbf{R}_{M+H}\|} \exp(-\mathbf{f} \mathbf{Q}_{M+H} \mathbf{f}^{*T}), \quad (1)$$

где $\mathbf{f} = (f_0, \dots, f_{N-1})$ – дискретная выборка сигнала размером N , состоящая из смеси сигнала, отраженного от объекта $\mathbf{m} = (m_0, \dots, m_{N-1})$ и радиолокационного фона $\mathbf{h} = (h_0, \dots, h_{N-1})$; $\mathbf{R}_{M+H} = \mathbf{R}_M + \mathbf{R}_H$ – корреляционная матрица (КМ) принятого сигнала; $\mathbf{Q}_{M+H} = (\mathbf{R}_{M+H})^{-1}$ – обратная КМ; $\mathbf{R}_M = \overline{\mathbf{m}^{*T} \mathbf{m}}$ – КМ сигнала; $\mathbf{R}_H = \overline{\mathbf{h}^{*T} \mathbf{h}}$ – КМ фона; индекс $*$ – комплексное сопряжение; T – операция транспонирования.

При использовании байесовского критерия оптимальности алгоритм обработки принятого сигнала предполагает вычисление КФ [1]:

$$Z = \mathbf{f} \mathbf{R}_{\text{обр}} \mathbf{f}^{*T} + a, \quad (2)$$

где $\mathbf{R}_{\text{обр}} = (\mathbf{R}_H)^{-1} - (\mathbf{R}_{M+H})^{-1}$ – матрица обработки; $a = \ln[\det \mathbf{R}_H / \det \mathbf{R}_{M+H}]$ – смещение.

В статье анализируются особенности способов оценивания распределения КФ (2), определяющего вид решающей статистики в задачах радиолокационного обнаружения и распознавания объектов. На основе результатов моделирования проиллюстрированы достоинства и недостатки рассматриваемых способов.

Основная часть. При анализе решающей статистики в задачах радиолокационного обнаружения и распознавания используется подход, основанный на восстановлении ПВ КФ по известным моментам распределения с помощью системы ортогональных полиномов [2]. В основе метода лежит взаимосвязь между ПВ, ХФ и моментами распределения. При этом плотность распределения решающей статистики представляется рядом n , основанным на выбранном семействе полиномов [2].

$$p(Z) = \phi(Z) \sum_{q=0}^{n-1} c_q Q_q(Z), \quad (3)$$

где $\phi(Z)$ – весовая функция полинома; c_q – коэффициенты разложения в ряд; $Q_q(Z) = \sum_{p=0}^q r_p Z^p$ – ортогональный полином q -й степени; r_p – коэффициенты полинома.

Коэффициенты разложения имеют вид

$$c_q = \sum_{s=0}^q r_s m_s \{Z\},$$

где $m_s \{Z\}$ – момент s -го порядка случайной величины Z .

Исходя из гауссовости закона распределения элементов выборки принятого сигнала \mathbf{f} , зная его функциональное преобразование, несложно определить моменты искомой ПВ [3]:

$$m_s \{Z\} = (-i)^s \frac{\partial^s}{\partial v^s} \Theta_z(\mathbf{v}) \Big|_{v=0},$$

где i – «мнимая» единица; v – вещественная переменная; $\Theta_z(v) = \exp(iva) / \det[\mathbf{I} - iv\chi]$ – характеристическая функция величины Z ; \mathbf{I} – единичная матрица; $\chi = \mathbf{R}_{M+H} \mathbf{R}_{\text{обр}}$ – определяющая матрица.

Идея метода вычисления моментов искомого распределения, основанного на дифференцировании ХФ («метод следа»), изложена в работе [4].

Следует отметить, что для качественной аппроксимации ПВ важно правильно выбирать семейство ортогональных полиномов, что позволяет использовать при расчетах небольшое число членов ряда (n). При этом в большинстве публикаций, рассматривающих вопросы приближенной аппроксимации, ограничиваются разложениями на основе гауссовской весовой функции: ряды Грама – Шарлье, Эджворта, Юнга; разложение Мелера в ряд Эрмита; разложение Корниша – Фишера. В случае значительных отличий анализируемой ПВ от нормальной указанные аппроксимации, как правило, мало эффективны.

На рис. 1 приведены результаты аппроксимации распределения КФ Z , рассчитанного для следующих условий: дисперсия отраженного сигнала $\sigma_c^2 = 25$; экспоненциальная корреляционная функция сигнала характеризуется временем корреляции $\tau_c = 0,1$ с; КМ \mathbf{R}_M и \mathbf{R}_H размером $N = 10$ формируются с шагом $\Delta\tau = 4$ мс; отношение сигнал – шум $\rho = 10$.

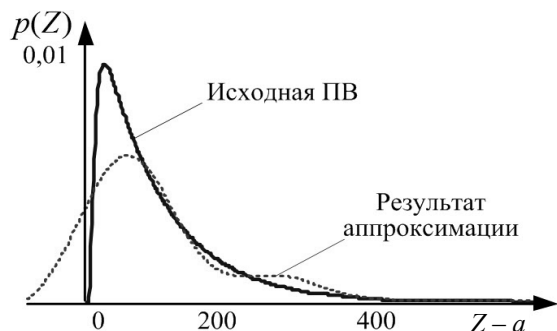


Рис. 1. ПВ КФ и его оценка, полученная с помощью полиномов Эрмита ($n = 4$)

В ряде случаев для аппроксимации распределения КФ используют ряд, основанный на полиномах Лагерра [2]. Эти полиномы характеризуются интервалом ортогональности $[0; +\infty]$. На рис. 2 приведены результаты аппроксимации распределения КФ Z , использующие усеченный ряд Лагерра.

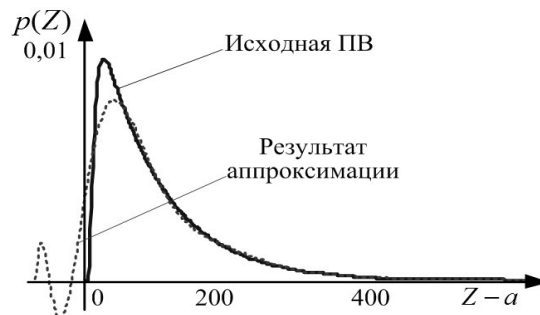


Рис. 2. ПВ КФ и его оценка, полученная с помощью полиномов Лагерра

Очевидно, что для обеспечения качественной аппроксимации усеченным рядом Лагерра требуется большое число членов ряда ($n > 30$), что предполагает использование соответствующего числа моментов исходного распределения. В противном случае рассматриваемый ряд теряет эффективность.

В [4] для аппроксимации ПВ КФ Z предложено использовать усеченный ряд ($n = 1$), основанный на полиномах Поллачека с оптимизированной весовой функцией. Результаты аппроксимации представлены на рис. 3.

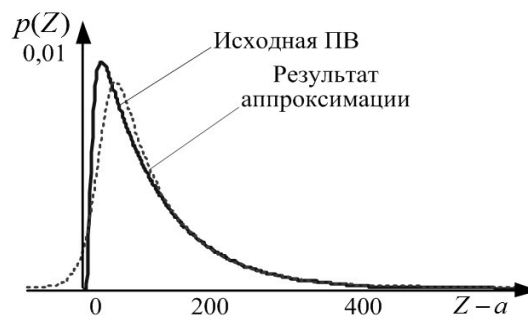


Рис. 3. ПВ КФ и его оценка, полученная с помощью полиномов Поллачека

Рассмотренный способ обеспечивает приемлемое качество аппроксимации, однако предполагает наличие процедуры предварительной оптимизации параметров весовой функции.

Проведенный анализ показал, что использование для аппроксимации усеченных рядов по ортогональным полиномам характеризуется определенными недостатками: учет интервала ортогональности выбранных полиномов; наличие предварительной обработки данных (центрирование, нормировка, оптимизация параметров); выбор количества членов ряда; возможная расходимость ряда и т. п.

Следует отметить, что знание вида распределения статистики $p(Z)$ позволяет при радиолокационном наблюдении объекта решать ряд практически важных задач: обеспечение требуемых показателей качества решаемой задачи; выбор требуемых порогов принятия решения;

управление длительностью процесса принятия решения при использовании последовательных решающих правил и т. п.

Одна из первых попыток получения выражения для распределения КФ от гауссовского процесса предпринята в работе [5]. Предложенная методика, основанная на вычислении значений ХФ в плоскости комплексной переменной с помощью теории вычетов, характеризуется сложностью реализации и не нашла практического применения. Кроме того, предложенный подход ограниченно пригоден в случае наличия близких по величине собственных чисел определяющей матрицы (χ).

Наиболее точный способ определения распределения КФ был предложен в публикации [6]. Авторы разработали методику нахождения непрерывной плотности распределения КФ по его ХФ. Однако в ряде случаев оказывается удобнее работать с дискретными отсчетами искомой плотности. При этом методика определения дискретных отсчетов ПВ предполагает следующие операции:

1) расчет определяющей матрицы $\chi = \mathbf{R}_{M+H} \mathbf{R}_{\text{обр}}$;

2) нахождение ее собственных значений c_j , $j = \overline{0, N-1}$;

3) задание области определения характеристической функции $t_0 = 0$, $t_1 = 2\pi$ и разбиение ее на число интервалов N_t с длительностью $dt = (t_1 - t_0) / N_t$;

4) нахождение комплексных отсчетов обратной характеристической функции $D_m = \prod_{j=0}^{N-1} (1 - ic_j t_m)$, $m = \overline{0, N_t - 1}$;

5) определение действительной $R_m = \text{Re}(D_m)$ и мнимой $I_m = \text{Im}(D_m)$ частей, после чего осуществляется расчет действительной $A_m = R_m / (R_m^2 + I_m^2)$ или мнимой $B_m = -I_m / (R_m^2 + I_m^2)$ частей характеристической функции;

6) с помощью дискретного преобразования Фурье определяются отсчеты искомой ПВ:

$$p_k = \frac{2}{\pi} \sum_{m=0}^{N_t-1} A_m \cos\left(\frac{2\pi k m}{N_t}\right) = \frac{2}{\pi} \sum_{m=0}^{N_t-1} B_m \sin\left(\frac{2\pi k m}{N_t}\right),$$

$$k = \overline{0, N_t / 2}.$$

На рис. 4 приведен график распределения КФ Z , рассчитанный численными методами на основе вышеизложенной методики [6], и его гистограмма для анализируемых условий наблюдения.

Приведенные графики подтверждают высокую точность оценивания распределения квадратичной формы. Рассмотренная методика яв-

ляется практически пригодной и может использоваться в интересах решения задач радиолокационного наблюдения.

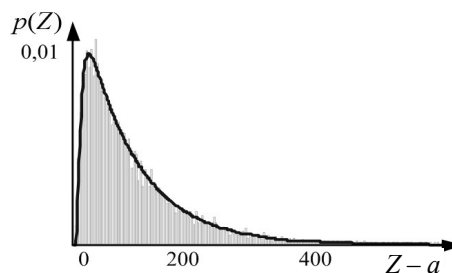


Рис. 4. Оценка ПВ КФ, полученная с помощью ХФ, и гистограмма квадратичной формы Z

Заключение. В статье показано, что усеченные аппроксимирующие ряды, основанные на системах ортогональных полиномов, позволяют в ряде случаев восстанавливать законы распределения квадратичных форм. В общем случае для оценки дискретных отсчетов ПВ квадратичной формы (2) наиболее предпочтительным является способ, основанный на преобразовании ее ХФ. Результаты оценивания ПВ КФ, формируемые на основе рассмотренной методики, целесообразно использовать при решении задач радиолокационного обнаружения и распознавания.

Литература

- Охрименко А. Е. Основы радиолокации и радиоэлектронная борьба. М.: Воениздат, 1983. Ч. 1: Основы радиолокации. 456 с.
- Левин Б. Р. Теоретические основы статистической радиотехники. М.: Радио и связь, 1989. 656 с.
- Ярмолик С. Н., Шалыпин С. В. Методика анализа характеристик систем распознавания на основе полиномиальной аппроксимации многомерной плотности вероятности выходных сигналов // Доклады БГУИР. 2003. Т. 1, № 3. С. 28–32.
- Миддлтон Д. Введение в статистическую теорию связи: в 2 т.; пер. с англ. под ред. Б. Р. Левина. М.: Сов. радио, 1958–1962. Т. 2. 1962. 831 с.
- Проскурин В. И. Распределение вероятностей квадратичного функционала от гауссовского случайного сигнала // Радиотехника и электроника. 1985. Т. 30, № 7. С. 1335–1340.
- Леховицкий Д. И., Флексер П. М., Полишко С. В. О вычислении законов распределения квадратичных форм комплексных нормальных векторов // Прикладная радиоэлектроника. 2011. Т. 10, № 4. С. 456–461.

Поступила 20.03.2014

УДК 531.19

Г. С. Бокун, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);
Д. В. Гапанюк, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ)

АЛГОРИТМ ПРОГОНКИ ДЛЯ РАСЧЕТА ИМПЕДАНСА ТВЕРДОГО ЭЛЕКТРОЛИТА

Предложен новый метод прогонки, пригодный, в отличие от известного, для решения систем линейных алгебраических уравнений с матрицами, имеющими ненулевые элементы на $2n + 1$ диагоналях. Суть метода состоит в том, что выбираются пробные значения n неизвестных и по невязкам последних n уравнений системы находится ее точное решение. Показано, что новый алгоритм решения систем уравнений содержит ряд преимуществ, реализованных на примере построения программы расчета электрического импеданса токопроводящей керамики.

A new method suitable, in contrast to the known, to solve systems of linear algebraic equations with matrices consisting of $2n + 1$ diagonals is suggested. The method consists in that the selected test values of n unknowns are chosen, and discrepancies of the last n equations of the system are used to find the exact solution of the system. It is shown that a new algorithm for solving systems of equations contains a number of advantages realized by constructing the program for calculating the electrical impedance of the conductive ceramics.

Введение. При решении многих задач приходится иметь дело с системами линейных уравнений, матрицы коэффициентов которых имеют ленточную структуру. Хотя методы численного решения линейных уравнений общего вида хорошо развиты [1–3], в некоторых частных случаях можно существенно сократить количество выполняемых математических операций и, соответственно, затраты машинного времени. Например, если матрица системы уравнений трехдиагональная, используется метод прогонки [2], заключающийся в двукратном пересчете коэффициентов матрицы при переходе от предыдущей ее строки к последующей.

Алгоритм прогонки. Здесь предлагается другой вариант прогонки, пригодный не только для случая трех диагоналей, но и пяти-, семи- и т. д. диагональной матрицы A . Суть подхода рассмотрим для случая трехдиагональной матрицы, когда система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} A_{i,i+1}x_{i+1} + A_{i,i}x_i + A_{i,i-1}x_{i-1} &= B_i; \\ i &= 1, \dots, N; \quad A_{1,0} = 0; \quad A_{N,N+1} = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Последовательно положив $x_1 = 0$ и $x_1 = 1$, из (1) находим

$$x_{i+1} = \frac{B_i - A_{i,i}x_i - A_{i,i-1}x_{i-1}}{A_{i,i+1}}, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (2)$$

и величину невязки последнего уравнения системы

$$\Delta(x_1) = B_N - A_{N,N}x_N - A_{N,N-1}x_{N-1}. \quad (3)$$

Полученные по соотношению (3) величины невязок $\Delta(0)$ и $\Delta(1)$ используем для определения значения x_1 , удовлетворяющего исходной системе уравнений. Действительно, из линейности системы уравнений (1) следует, что невязка является линейной функцией x_1 .

$$\Delta(x_1) = ax_1 + b. \quad (4)$$

В уравнении (4) a и b – инварианты, зависящие только от коэффициентов расширенной матрицы системы уравнений. Согласно (4),

$$b = \Delta(0); \quad a = \Delta(1) - \Delta(0). \quad (5)$$

Формулы (5) определяют значение

$$x_1 = \frac{\Delta(0)}{\Delta(0) - \Delta(1)}, \quad (6)$$

обращающее условие (4) в ноль и являющееся соответственно корнем исходной системы уравнений. Найденное значение x_1 используем в итерационном уравнении (2) для расчета остальных корней исходной системы.

Из сказанного следует, что предложенный подход по количеству операций эквивалентен стандартному, но реализуется с помощью очень простого алгоритма, выражаемого формулой (2). Кроме того, очевидно, как предложенный алгоритм переносится на решение задач с большей размерностью матрицы A . Например, в случае матрицы A с пятью диагоналями для реализации метода прогонки необходимо задаваться двумя пробными значениями для x_1 и x_2 . Соответственно два последних уравнения системы при x_1 и x_2 , не являющихся ее корнями, будут приводить к невязкам

$$\begin{aligned} \Delta_1(x_1, x_2) &= a_1x_1 + b_1x_2 + c_1; \\ \Delta_2(x_1, x_2) &= a_2x_1 + b_2x_2 + c_2. \end{aligned} \quad (7)$$

Для определения коэффициентов в системе (7) удобно выполнить три прогонки соответственно, положив $(x_1 = 0, x_2 = 0)$, $(x_1 = 1, x_2 = 0)$, $(x_1 = 0, x_2 = 1)$. В результате находим

$$c_1 = \Delta_1(0, 0); \quad c_2 = \Delta_2(0, 0);$$

$$a_1 = \Delta_1(1, 0) - \Delta_1(0, 0); \quad b_1 = \Delta_1(0, 1) - \Delta_1(0, 0); \quad (8)$$

$$a_2 = \Delta_2(1, 0) - \Delta_2(0, 0); \quad b_2 = \Delta_2(0, 1) - \Delta_2(0, 0).$$

Привлекая (8), из (7) при $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$ находим величины x_1 и x_2 , являющиеся корнями исходной системы с ленточной пятидиагональной матрицей.

Физический пример. Рассмотрим среду, состоящую из частиц двух сортов, совершающих термоактивированные прыжки по узлам соответствующих подрешеток, приводящую к системе линейных уравнений с пятидиагональной матрицей.

Выражение для химического потенциала в единицах kT частиц сорта α ($\alpha = a, b$) в приближении среднего поля с учетом взаимодействия с ближайшими соседями имеет вид [4, 5]

$$\begin{aligned} \mu_i^\alpha = \varepsilon_i^\alpha + \ln \frac{\rho_{li}^\alpha}{\rho_{0i}^\alpha} + J_\beta \times \\ \times (4\rho_i^\beta + \rho_{i+1}^\beta + \rho_{i-1}^\beta) + \sum_{k=1}^{i-1} \Delta\theta_k^\alpha; \end{aligned} \quad (9)$$

$$\Delta\theta_i^\alpha = 2\varphi_q \sum_{k=1}^i (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta).$$

Здесь ε_i^α – глубина одночастичной потенциальной ямы на i -м узле α -подрешетки; $\rho_{li}^\alpha, \rho_{0i}^\alpha$ – средняя концентрация частиц и вакансий на i -м узле; φ_q – коэффициент, переводящий в потенциальную энергию электровзаимодействие заряда частицы со средой,

$$\varphi_q = \frac{q^2}{kT\varepsilon\varepsilon_0 h}, \quad (10)$$

где q – величина эффективного заряда частицы; $\varepsilon, \varepsilon_0$ – величины относительной и абсолютной электрических постоянных; h – параметр решетки.

Для определения равновесного состояния системы необходимо найти величины ρ_i^α из условия равенства химических потенциалов $\mu_i^\alpha = \mu_{eq}^\alpha$ с учетом сохранения числа частиц каждого сорта.

Для решения этой задачи используем разработанный ранее метод «диффузионного» решения системы уравнений [3]. Для этого вводим потоки числа частиц в соответствии с законом Фика:

$$\Delta^* I_i^\alpha = +K_i^\alpha (\mu_{i+1}^\alpha - 2\mu_i^\alpha + \mu_{i-1}^\alpha). \quad (11)$$

В состоянии равновесия в силу равенства химических потенциалов для различных узлов выражение в скобках (11) равно нулю, так что K_i^α при поиске равновесного распределения

выбирается из дополнительных соображений, ускоряющих сходимость к решению.

Для удобства преобразований обозначим

$$\Delta^2 \mu_i^\alpha = (\mu_{i+1}^\alpha - 2\mu_i^\alpha + \mu_{i-1}^\alpha) K_i^\alpha. \quad (12)$$

Далее, разбив, в свою очередь, $\Delta^2 \mu_i^\alpha$ на три слагаемых и приняв для сокращения записей $K_i^\alpha = 1$, запишем

$$\begin{aligned} \Delta^2 \mu_i^\alpha = \Delta^2 \mu_{\varepsilon_i}^\alpha + \Delta^2 \mu_{\rho_i}^\alpha + \\ + \Delta^2 \mu_{\mu_i}^\alpha + \Delta^2 \mu_{\varphi_i}^\alpha, \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\Delta^2 \mu_{\varepsilon_i}^\alpha = (\varepsilon_{i-1}^\alpha - 2\varepsilon_i^\alpha + \varepsilon_{i+1}^\alpha); \quad (14)$$

$$\Delta^2 \mu_{\rho_i}^\alpha = \ln \frac{\rho_{li+1}^\alpha \rho_{li-1}^\alpha (\rho_{0i}^\alpha)^2}{\rho_{0i+1}^\alpha \rho_{0i-1}^\alpha (\rho_{li}^\alpha)}. \quad (15)$$

Найдем последнее выражение

$$\begin{aligned} \Delta^2 \mu_{\rho_i}^\alpha &= \left(\sum_{k=1}^i \Delta\theta_k - \sum_{k=1}^{i-1} \Delta\theta_k - \sum_{k=1}^{i-1} \Delta\theta_k - \sum_{k=1}^{i-2} \Delta\theta_k \right) = \\ &= (\Delta\theta_i - \Delta\theta_{i-1}) = \\ &= 2\varphi_q \left(\sum_{k=1}^i (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta) - \sum_{k=1}^{i-1} (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta) \right) = \\ &= 2\varphi_q (\rho_i^\alpha - \rho_i^\beta). \end{aligned} \quad (16)$$

Для вычисления $\Delta^2 \mu_{\mu_i}^\alpha$ составим диаграмму взаимодействий, в соответствии с которой находим

$$\Delta^2 \mu_{\mu_i}^\alpha = J_\beta (\rho_{i-2}^\beta + 2\rho_{i-1}^\beta - 6\rho_i^\beta + 2\rho_{i+1}^\beta + \rho_{i+2}^\beta). \quad (17)$$

С учетом (11)–(16) запишем уравнения для вычисления изменения плотности $\Delta\rho_{li}^\alpha$ в узле i ($i = 4, \dots, N-3$);

$$\Delta\rho_i^\alpha = +\Delta I_i^\alpha \Delta\tau, \quad (18)$$

где $\Delta\tau$ – шаг по времени.

Для замыкания системы уравнений (18) используем распределение токов, соответствующее случаю блокирующих электродов:

$$\Delta\rho_3^\alpha = -I_3^\alpha; \quad \Delta\rho_{N-3}^\alpha = -I_{N-3}^\alpha. \quad (19)$$

Теперь запишем выражение для величины токов на произвольном узле:

$$\begin{aligned} I_i^\alpha = \mu_i^\alpha - \mu_{i+1}^\alpha = \varepsilon_i^\alpha - \varepsilon_{i+1}^\alpha + \\ + J_\beta (4\rho_i^\beta + \rho_{i+1}^\beta + \rho_{i-1}^\beta - 4\rho_{i+1}^\beta - \rho_{i+2}^\beta - \rho_i^\beta) + \\ + \ln \frac{\rho_{li}^\alpha \rho_{0i+1}^\alpha}{\rho_{0i}^\alpha \rho_{li+1}^\alpha} + \sum_{k=1}^{i-1} \Delta\theta_k - \sum_{k=1}^i \Delta\theta_k, \end{aligned} \quad (20)$$

Таким образом,

$$I_i^\alpha = \varepsilon_i^\alpha - \varepsilon_{i+1}^\alpha + J_\beta^\alpha \left(3\rho_i^\beta - 3\rho_{i+1}^\beta + \rho_{i-1}^\beta - \rho_{i+2}^\beta \right) + \ln \frac{\rho_{1i}^\alpha \rho_{0i+1}^\alpha}{\rho_{0i}^\alpha \rho_{1i+1}^\alpha} - \Delta\theta_i^\alpha - \Delta U_i^\alpha. \quad (21)$$

Входящее в (21) $\Delta\theta_i$ определено в (9) и может быть упрощено путем учета условия электронеutrальности.

Соответственно,

$$\Delta\theta_{N-3}^\alpha = 2\varphi_q \left(\sum_{k=1}^{N-3} (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta) \right). \quad (22)$$

Однако

$$\sum_{k=1}^{N-3} (\rho_k^\alpha - \rho_k^\beta) + (\rho_{N-2}^\alpha - \rho_{N-2}^\beta) = 0. \quad (23)$$

Поэтому

$$\Delta\theta_{N-3}^\alpha = 2\varphi_q (\rho_{N-2}^\beta - \rho_{N-2}^\alpha); \quad (24)$$

$$\Delta\theta_3^\alpha = 2\varphi_q (\rho_3^\alpha - \rho_3^\beta). \quad (25)$$

Для построения модели электрохимического импеданса вычислим вариации выражений, полученных выше.

Варьирование (21) дает

$$\begin{aligned} \delta I_i^\alpha = J_\beta^\alpha \left(3\delta\rho_i^\beta - 3\delta\rho_{i+1}^\beta + \delta\rho_{i-1}^\beta - \delta\rho_{i+2}^\beta \right) + \\ + \frac{\delta\rho_i^\alpha}{\rho_i^\alpha (1 - \rho_i^\alpha)} - \\ - \frac{\delta\rho_{i+1}^\alpha}{\rho_{i+1}^\alpha (1 - \rho_{i+1}^\alpha)} - \delta\Delta\theta_i^\alpha - \delta\Delta U_i^\alpha. \end{aligned} \quad (26)$$

Из (9), в свою очередь, следует

$$\delta\Delta\theta_i^\alpha = 2\varphi_q \sum_{k=1}^i (\delta\rho_k^\alpha - \delta\rho_k^\beta). \quad (27)$$

Уравнения (26) и (27) используем для построения выражений для граничных токов δI_3^α и δI_{N-3}^α , учитывая, что $\delta\rho_1^\alpha = \delta\rho_2^\alpha = 0$. Из условия сохранений зарядов находим, что

$$\delta\Delta\theta_3^\alpha = 2\varphi_q (\rho_3^\alpha - \rho_3^\beta); \quad (28)$$

$$\delta\Delta\theta_3^\alpha = 2\varphi_q (\delta\rho_3^\alpha - \delta\rho_3^\beta);$$

$$\Delta\theta_{N-3}^\alpha = 2\varphi_q (\delta\rho_{N-2}^\beta - \delta\rho_{N-2}^\alpha). \quad (29)$$

В результате получим

$$\bar{j} \omega \delta\rho_3^\alpha = -\delta I_3^\alpha; \quad (30)$$

$$\bar{j} \omega \delta\rho_{N-2}^\alpha = \delta I_{N-3}^\alpha. \quad (31)$$

Соответственно, для $i = 4, \dots, N-3$ уравнения для $\delta\rho_i^\alpha$ записываются в общем виде на основании (18) и (26):

$$\bar{j} \omega \delta\rho_i^\alpha = -\delta\Delta I_i^\alpha \Delta\tau; \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \delta\Delta I_i^\alpha = -K_i^\alpha \left(\frac{\delta\rho_{i+1}^\alpha}{\rho_{i+1}^\alpha (1 - \rho_{i+1}^\alpha)} + \frac{\delta\rho_{i-1}^\alpha}{\rho_{i-1}^\alpha (1 - \rho_{i-1}^\alpha)} - \right. \\ \left. - 2 \frac{\delta\rho_i^\alpha}{\rho_i^\alpha (1 - \rho_i^\alpha)} + 2\varphi_q (\delta\rho_i^\alpha - \delta\rho_i^\beta) + \right. \\ \left. + J_\beta (\delta\rho_{i-2}^\beta + 2\delta\rho_{i-1}^\beta - 6\delta\rho_i^\beta + 2\delta\rho_{i+1}^\beta + \delta\rho_{i+2}^\beta) \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Соотношения (28)–(33) образуют замкнутую систему линейных уравнений относительно неизвестных величин $\delta\rho_i^\alpha$. В свою очередь, из (33) следует, что матрица A – пятидиагональная.

Заключение. Таким образом, как видно из уравнений (30)–(33), для определения вариаций $\delta\rho_i^\alpha$ необходимо решать систему линейных уравнений, в которой матрица коэффициентов при неизвестных содержит пять диагоналей. Коэффициенты матрицы определяются по равновесному профилю распределения концентраций по объему среды. Для решения указанной задачи удобно использовать предложенный в данной работе алгоритм.

Литература

1. Форсфайт Дж., Молер К. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений. М.: Мир, 1969. 168 с.
2. Крылов В. И., Бобков В. В., Моностырный П. И. Вычислительные методы: в 2 т. М.: Наука, 1977. Т. 2. 399 с.
3. Годунов С. К. Решение систем линейных уравнений. М.: Наука, 1980. 177 с.
4. Ласовский Р. Н., Бокун Г. С., Вихренко В. С. Концентрационная кинетика интеркаляционных систем // Электрохимия. 2010. Т. 46, № 4. С. 411–422.
5. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds // Solid State Ionics. 2011. Vol. 188. P. 15–20.

Поступила 01.04.2014

ОБРАБОТКА И ПЕРЕДАЧА ИНФОРМАЦИИ

УДК 004.056.55

Н. В. Пацей, кандидат технических наук, доцент (БГТУ)

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕКТИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ КОНСТРУКЦИЙ ДВОИЧНЫХ КОДОВ С НИЗКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ПРОВЕРОК НА ЧЕТНОСТЬ ОСНОВАННЫХ НА МАТРИЦАХ ПЕРЕСТАНОВОК

В статье рассматриваются некоторые конструкции двоичных кодов с низкой плотностью проверок на четность, построенные на основе проверочных матриц перестановок. Представлены результаты моделирования кодовых конструкций для итеративного декодирования по алгоритму минимальных сумм. Обсуждается влияние увеличения количества перестановок в проверочной матрице на корректирующие способности низкоплотностного кода.

This article discusses some versions of binary low density parity check codes built on the basis of permutation matrices. The results of code designs simulation for iterative min-sum decoding algorithm are presented. The effect of influence increasing permutations number in the code check matrix on correction capabilities discussed.

Введение. Коды с низкой плотностью проверок на четность имеют производительность, близкую к пропускной способности для большинства известных в настоящее время каналов передачи [1]. Впервые код с компонентным кодом – проверкой на четность (НППЧ-код) был предложен Галлагером [2]. Классический алгоритм Галлагера конструирования матрицы кода основан на выборе числа n_0 , которое определяет длину проверочного вектора:

$$H_0 = \underbrace{111\dots 1}_{n_0}. \quad (1)$$

На основе вектора H_0 строится диагональная проверочная матрица H_m

$$H_m = \underbrace{\begin{pmatrix} H_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & H_0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & H_0 \end{pmatrix}}_m \quad (2)$$

с m проверочными матрицами H_0 на главной диагонали. Тогда размер матрицы H_m определяется как $m \times mn_0$. Так как m – достаточно велико, то матрица получается разреженная.

Пусть $\pi(H_m)$ – случайная перестановка столбцов матрицы H_m . В конструкции НППЧ-кода Галлагера необходимо выполнить $l > 2$ независимых случайных перестановок. Полученная матрица имеет размер $lm \times mn_0$;

$$H = \begin{pmatrix} \pi_1(H_m) \\ \pi_2(H_m) \\ \vdots \\ \pi_l(H_m) \end{pmatrix} \quad (3)$$

и определяет НППЧ-код Галлагера длины $n = mn_0$ при условии, что $n \gg n_0$.

Нижняя оценка скорости кода определяется отношением $R \geq 1 - l(1 - R_0)$, где R_0 – скорость кода проверки на четность,

$$R_0 = \frac{n_0 - 1}{n_0}, \quad (4)$$

тогда

$$R \geq 1 - \frac{l}{n_0}. \quad (5)$$

НППЧ-код Галлагера можно обобщить, заменив в проверочной матрице H код проверки на четность на другой линейный блочный код [3]. Такой код будет обобщенным НППЧ-кодом.

Однако со времени появления кода Галлагера было разработано множество различных алгоритмов конструирования НППЧ-кодов [3–5].

Целью настоящей работы является исследование корректирующей способности отдельных конструкций НППЧ-кодов.

Алгоритмы построения проверочных матриц НППЧ-кодов. В настоящее время используются два принципа построения проверочных матриц кода [3–5].

Первый основан на генерации начальной проверочной матрицы с помощью псевдослучайного генератора. Коды, полученные таким методом, называют случайными. Основной недостаток случайных кодов – удаление циклов и нестабильные рабочие характеристики кода.

Второй – использование специальных структурированных методов, основанных на группах, конечных полях и т. п. Они позволяют использовать оптимизацию процедур хранения, кодирования и декодирования, а также получать коды с более предсказуемыми и устойчивыми характеристиками.

В настоящей статье ограничимся исследованием нескольких конструкций проверочных матриц регулярных НППЧ-кодов, основанных на матрицах случайных перестановок [6].

В соответствии с [6] проверочная матрица, основанная на перестановках, может быть представлена в виде

$$H = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots & P_{1n_0} \\ P_{21} & P_{22} & \dots & P_{2n_0} \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ P_{l1} & P_{l2} & \dots & P_{ln_0} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где каждая из матриц перестановок P_{ij} , $i=1, 2, \dots, l$; $j=1, 2, \dots, n_0$ различна (имеет размер $m \times m$). Условно обозначим НППЧ-код, построенный на основе матриц перестановок, E_r .

Вторая конструкция проверочной матрицы может быть получена на основе перестановок-умножений. В этом случае выбираются натуральные случайные b_i , такие, что $(b_i, m)=1$ и $b_i^x = 1 \pmod{m}$, $x \geq l$, а также $b_j \neq b_{j-1} b_i^l \pmod{m}$. На основе множества перестановок-умножений $\sigma_{b_1}, \sigma_{b_2}, \dots, \sigma_{b_l}$ строится матрица

$$H_m = \begin{pmatrix} P_{\sigma_{b_1}} & P_{\sigma_{b_2} b_1} & \dots & P_{\sigma_{b_{n_0}} b_1} \\ P_{\sigma_{b_1}^2} & P_{\sigma_{b_2} b_1^2} & \dots & P_{\sigma_{b_{n_0}} b_1^2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{\sigma_{b_1}^l} & P_{\sigma_{b_2} b_1^l} & \dots & P_{\sigma_{b_{n_0}} b_1^l} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Все матрицы P в каждой строке и в каждом столбце будут различны. H_m определяет НППЧ-код перестановок-умножений, обозначим его E_m .

Третья конструкция регулярной проверочной матрицы строится на основе степеней-перестановок [6]. Проверочная матрица в этом случае может быть представлена на основе перестановочных матриц заданной степени

$$H_w = \begin{pmatrix} P_1 & P_2 & \dots & P_{n_0} \\ P_1^2 & P_2^2 & \dots & P_{n_0}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_1^l & P_2^l & \dots & P_{n_0}^l \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Обозначим НППЧ-код степеней перестановок E_w .

Если к каждому из рассмотренных вариантов добавить h -кратную циклическую перестановку, то можно получить модифицированные конструкции [6].

Алгоритмы декодирования. Алгоритмы декодирования НППЧ-кодов делятся на алгоритмы с жестким входом и алгоритмы с мягким входом [7].

Первый класс алгоритмов, известный также как вероятностное декодирование, в качестве входа получает оценку вероятностного распределения символов. К этому классу относятся алгоритмы с распространением доверия и минимальных сумм (упрощенный алгоритм распространения доверия, обладающий меньшей вычислительной сложностью). Они имеют теоретически лучшую корректирующую способность.

Второй класс включает в себя методы декодирования, работающие непосредственно со значениями символов. Для НППЧ-кодов это мажоритарное декодирование.

НППЧ-декодеры работают с представлением кода в виде фактор-графа (Ганнера) и являются итерационными. Остановка итеративной части алгоритма осуществляется, если все проверки оказались выполнены или достигнуто максимальное число итераций.

Экспериментальные результаты и их обобщение. Для оценки конструкций было выполнено моделирование трех описанных конструкций кодеров с использованием среды MatLab. В качестве алгоритма декодирования был выбран алгоритм минимальных сумм (максимальное число итераций составило 20). В качестве среды передачи использовался двоичный канал с аддитивным белым гауссовским шумом.

Для сравнения корректирующей способности конструкций кодов, основанных на случайных перестановках, был выбран двоичный НППЧ-код длины $n = 3290$, с $n_0 = 14$ и $l = 7$, со скоростью $R = 1/2$. Результаты моделирования представлены на рис. 1.

Согласно графику, коды E_m и E_w при одинаковых параметрах имеют похожее поведение. Меньшее число битовых ошибок (BER) дает код E_r . Поэтому дальнейшие сравнительные характеристики будут приведены для НППЧ-кода E_r .

Исследуем зависимость вероятности ошибки на бит от отношения сигнал – шум для кодов при разном числе перестановок (слоев) $l = 4, 7, 9$ для НППЧ-кода E_r , длины $n = n_0 m = 3290$ и $R = 1/2$. Результаты моделирования представлены на рис. 2.

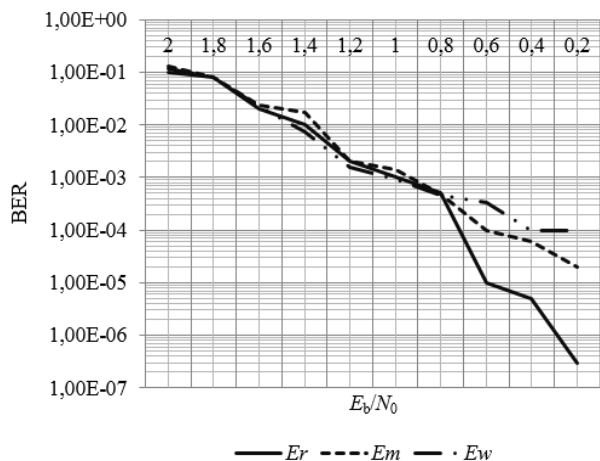


Рис. 1. Зависимость вероятности ошибки на бит от отношения сигнал – шум для НППЧ-кодов с разными конструкциями проверочной матрицы

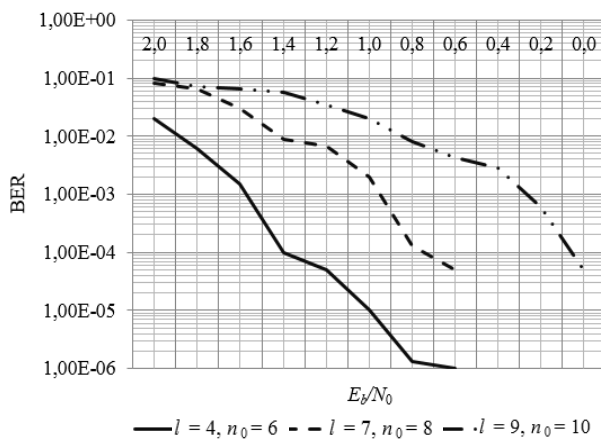


Рис. 2. Зависимость вероятности ошибки на бит от отношения сигнал – шум НППЧ-кодов для разного числа перестановок l и длины проверочного вектора

Как видно, лучшими характеристиками обладают коды, имеющие меньше слоев. Увеличение числа слоев на две-три единицы приводит к проигрышу порядка 0,5–0,6 Дб.

В ходе моделирования менялись длины кодов n и скорости R (в соответствии с таблицей).

Результаты подтверждают известный факт, что лучшими корректирующими способностями обладают коды с большей длиной. Выигрыш при увеличении длины кода в два раза составляет около 0,6 Дб.

Параметры моделируемых кодов для $m = 235$

n	n_0	R		
		$l = 4$	$l = 7$	$l = 9$
1 410	6	0,3	–	–
1 880	8	0,5	0,1	–
2 350	10	0,6	0,3	0,1
3 290	14	0,7	0,5	0,4
5 640	24	0,8	0,7	0,6
12 220	52	0,9	0,9	0,8
19 270	82	–	–	0,9

Выводы. Результаты моделирования показывают, что конструкции, основанные на матрицах перестановок, имеют стабильные корректирующие способности. Регулярные конструкции проверочных матриц НППЧ-кодов, основанных на перестановках-умножениях и степенях перестановок, имеют существенно худшие характеристики. Так же установлено, что декодер, построенный на основе алгоритма минимальных сумм, показывает наилучшие результаты при небольшом числе перестановок проверочной матрицы.

Литература

- Richardson T., Urbanke R. The capacity of low-density parity check codes under message-passing decoding // IEEE Trans. Inform. Theory. 2001. Vol. 47, No. 1, P. 599–618.
- Галлагер Р. Г. Коды с малой плотностью проверок на четность. М.: Мир, 1966. 40 с.
- Miladinovic N., Fossorier M. Generalized LDPC Codes with Reed-Solomon and BCH Codes as Component Codes for Binary Channels // Proc. IEEE Global Conf. on Communication (GLOBECOM). St. Louis, USA, 2005. P. 240–245.
- Gabidulin E., Moinian A., Honary B. Generalized construction of quasi-cyclic regular LDPC codes based on permutation matrices // Proc. IEEE Int. Symp. Inf. Theory. 2006. P. 679–683.
- Fossorier P. C. Quasi-cyclic low-density parity-check codes from circulant permutation matrix // IEEE Trans. Inform. Theory. 2004. Vol. 50, No. 8. P. 1788–1793.
- Зяблов В. В., Иванов Ф. И., Потапов В. Г. Сравнение различных конструкций двоичных МПП-кодов, построенных на основе матриц перестановок // Информационные процессы. 2012. Т. 12, № 1. С. 31–52.
- Kschischang F. R., Frey B. J., Loeliger H. A. Factor graphs and the sum-product algorithm // IEEE Trans. Inform. Theory. 2001. Vol. 47, No. 2. P. 498–519.

Поступила 20.03.2014

УДК 681.3.053

М. Ф. Виткова, аспирант (БГТУ); **Д. М. Романенко**, кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой (БГТУ)

АДАПТИВНАЯ СИСТЕМА КОДИРОВАНИЯ (ДЕКОДИРОВАНИЯ) НА ОСНОВЕ МНОГОМЕРНЫХ ИТЕРАТИВНЫХ КОДОВ И МНОГОПороГОВЫХ ДЕКОДЕРОВ

В статье рассмотрены основные параметры качества бинарного цифрового канала связи, способы их измерения, достоинства и недостатки. Представлена общая структурная схема разработанной системы, схемы блоков кодирования, декодирования и блока анализа. Описан принцип действия адаптивной системы, назначение и особенности каждого из блоков, а также их достоинства и недостатки. Ключевой особенностью разработанной адаптивной системы является возможность расчета параметра BER в режиме передачи реального трафика с последующим выбором наиболее подходящего корректирующего кода.

The article describes main quality parameters of the binary digital communication channel, methods of measurement, advantages and disadvantages. A general structural scheme of the developed adaptive system, schemes of coding, decoding and analysis blocks are presented. The operation principle of the adaptive system action, the purpose and particular of each blocks, and also advantages and disadvantages are described. The main features of the developed adaptive system is the possibility to calculate the BER in the transmission mode of the real traffic with a choice of the most suitable correcting code.

Введение. В современном мире системы передачи информации в целом не могут постоянно гарантировать безошибочность передаваемых данных. Можно отметить, что ключевой составляющей практически любой современной системы передачи информации является цифровой канал, по которому данные передаются в дискретном (как правило, двоичном) виде. По ряду причин под воздействием внутренних и внешних факторов передаваемые по каналу связи данные подвергаются воздействию различных помех. Поэтому нарушается целостность информации, возникают ошибки в передаваемых битовых последовательностях.

Надежность передачи напрямую зависит от качества канала. На сегодняшний день существует большое число параметров, позволяющих оценить качество цифрового бинарного канала, а также способов их измерения.

Основная часть. Измерение параметров качества бинарного канала осуществляется, как правило, в двух режимах: в режиме передачи реального (информационного) трафика и в режиме с отключением связи. Каждый из этих режимов имеет свои возможности и ограничения, подразумевающие в том числе и измерение тех или иных параметров качества канала. Так, например, явным достоинством первого режима является возможность измерять параметры без отключения связи, но точность определения ошибок ограничивается определенным блоком [1]. Наиболее распространенным параметром, измеряемым в данном режиме, является коэффициент ошибок по блокам BLER – block error rate [1]. Возможность локализовать единичную битовую ошибку при определении параметра BIT (bit errors – количество ошибоч-

ных бит) обеспечивается полным или частичным отключением связи и передачей специальной генерируемой тестовой последовательности. Реальная принятая последовательность битов сравнивается с «предсказанной» (на стороне приемника), которая, в свою очередь, точно совпадает с генерируемой последовательностью.

Число ошибочных бит BIT или BIT ERR (bit errors) является одним из основных параметров при измерении цифрового бинарного канала. Также к параметрам, имеющим весьма существенное значение, можно отнести коэффициент BER (bit error rate – параметр ошибки по битам), который является производным от коэффициента BIT и равен отношению числа битовых ошибок к общему числу бит, переданных за время проведения теста по каналу:

$$BER = \frac{BIT}{N_{общ}}, \quad (1)$$

где $N_{общ}$ – общее число передаваемых бит.

С практической точки зрения наибольший интерес представляет режим измерений качества бинарного канала без отключения связи, но при этом целесообразным является определение именно параметра BER.

В ходе исследований установлено, что система кодирования (декодирования) на основе многомерных итеративных кодов и многопорогового декодера позволяет определять коэффициент BER при передаче реального трафика и динамически изменять параметры кодов с целью повышения надежности и производительности системы передачи информации, фактически адаптируясь к изменяющимся условиям передачи и приводящие к изменению вероятности

сти появления ошибок определенного типа. Локализовать единичную битовую ошибку в реальном режиме передачи информации возможно за счет использования алгоритма определения кратности исправляемой ошибки [2] и модифицированного алгоритма выбора пороговых значений [3].

Структурная схема адаптивной системы изображена на рис. 1.

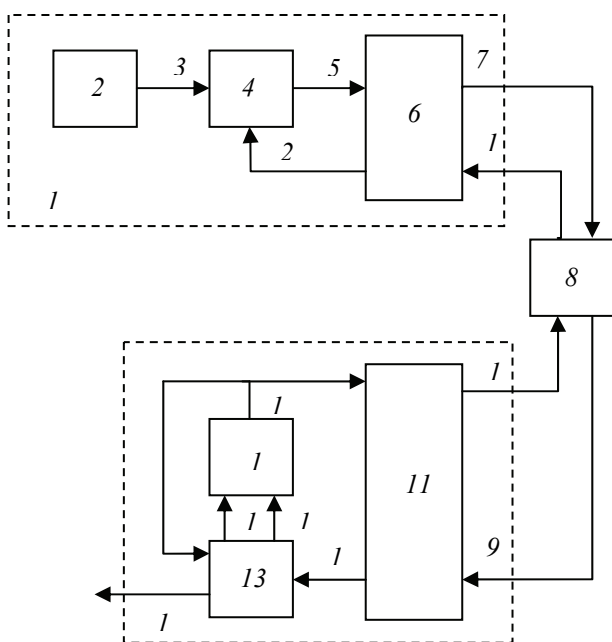


Рис. 1. Структурная схема адаптивной системы кодирования (декодирования):

- 1 – передатчик данных; 2 – источник данных;
- 3, 5, 7, 9, 12, 14, 15, 17, 18, 19, 20 – входы и выходы структурных блоков;
- 4 – блок кодирования;
- 6, 11 – модулятор (демодулятор); 8 – канал связи;
- 10 – приемник данных; 13 – блок декодирования;
- 16 – блок анализа

Разработанная система включает передатчик данных, приемник и бинарный канал связи. На стороне передатчика содержатся следующие блоки: источник данных, блок кодирования, модулятор (демодулятор). На стороне приемника располагаются такие блоки, как модулятор (демодулятор), блок декодирования, блок анализа.

Блок кодирования, структурная схема которого представлена на рис. 2, состоит из кодера и запоминающего устройства (ЗУ), которое хранит проверочные матрицы трехмерных итеративных кодов с числом линейно-независимых паритетов 5, 7, 9, для информационных последовательностей 64, 128, 256, 512 бит, а также с разной скоростью кода (табл. 1). Кодер формирует избыточные символы на основании хранящихся в ЗУ проверочных матриц трехмерных итеративных кодов.

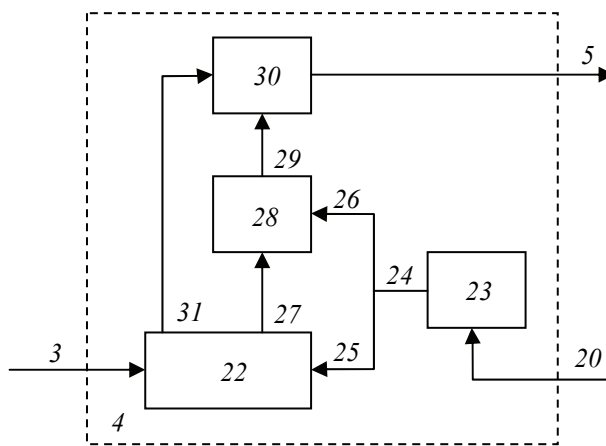


Рис. 2. Структурная схема блока кодирования:

- 3, 5, 20 – входы и выходы блока кодирования;
- 22 – блок деления информационной последовательности (БДИП); 23 – ЗУ;
- 24, 25, 26, 27, 29 – входы и выходы структурных элементов блока кодирования;
- 28 – кодер;
- 30 – блок объединения кодовой последовательности (БОКП)

Таблица 1

Параметры трехмерных итеративных кодов

Скорость кода r	Количество паритетов		
	5	7	9
Длина информационной последовательности k			
4/13			64
4/11		64	
8/21			128
8/19		128	
16/37			256
4/9	64	128	256
16/35		256	
8/17			512
1/2	128	256	
8/15	128	512	
4/7	256		
16/27	256		
8/13	512		

Проверочная матрица H трехмерного итеративного кода состоит из двух подматриц H_v и H_p :

$$H = [H_v | H_p], \tag{2}$$

где H_v – матрица размера $(n - k) \times k$, содержит информационную часть (соответствует информационным символам кодового слова); H_p – диагональная матрица размера $(n - k) \times (n - k)$, содержит проверочную часть (соответствует избыточным символам кодового слова).

Описываемая адаптивная система предполагает динамическое изменение параметров кода, одним из которых является объем

информационной части. Изменять данный параметр позволяют блока деления и объединения битовых последовательностей, которые также входят в состав блока кодирования.

Проверочные матрицы H трехмерных итеративных кодов хранятся в ЗУ в виде двумерных массивов размером $(n - k) \times n$. В информационной части Hv массива размещены единицы в тех позициях, которые соответствуют индексам информационных битов, участвующих в формировании проверочных символов, и нули. В проверочной части Hr отмечены проверочные символы, соответствующие каждой строке подматрицы Hv .

Кодер функционально представляет собой умножитель подматрицы матрицы Hv на информационный вектор v по входу 3:

$$c = Hv \times v. \tag{3}$$

Кодовое слово, получаемое на выходе 5, может быть представлено вектором

$$c = [v | p], \tag{4}$$

где v – входной вектор длины 1, ..., k (информацию, которую надо закодировать); p – вектор проверочных разрядов длины 1, ..., $(n - k)$.

На стороне приемника система содержит блок декодирования (рис. 3), состоящий из многопорогового декодера, БА (рис. 4) и ЗУ, которое хранит тот же класс трехмерных итеративных кодов, что и ЗУ блока кодирования.

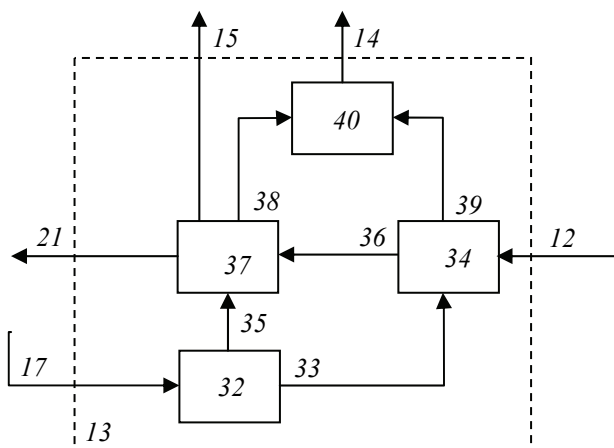


Рис. 3. Структурная схема блока декодирования:

12, 14, 15, 17, 21 – входы и выходы блока декодирования; 32 – ЗУ; 33, 35, 36, 38, 39 – входы и выходы элементов блока кодирования; 34 – блок деления кодовой последовательности (БДКП); 37 – многопороговый декодер; 40 – блок объединения информационной последовательности (БОИП)

В состав блока декодирования входят также блоки деления и объединения битовых последовательностей. БА содержит два блока: блок определения кратности исправляемой ошибки и блок определения качества канала.

Блок определения кратности исправляемой ошибки рассчитывает число ошибочных бит, которые накапливаются и через определенное множество переданных пакетов позволяют рассчитать коэффициент ошибок по битам BER.

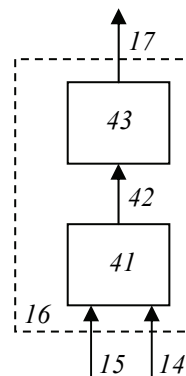


Рис. 4. Структурная схема блока анализа: 14, 15, 17 – входы и выходы блока анализа; 41 – блок определения кратности исправляемой ошибки; 42 – выход блока определения кратности ошибки; 43 – блок определения качества канала

Блок определения качества канала по рассчитанному коэффициенту BER оценивает качество канала по табл. 2 и принимает решение о выборе кода (табл. 1) для следующего передаваемого информационного пакета. В том случае, если нет возможности определить кратность исправляемой ошибки, качество канала предлагается определять по числу пропущенных стадий, как показано в табл. 3. Отметим, что определить число пропущенных стадий позволяет модифицированный алгоритм выбора пороговых значений.

Таблица 2

Определение качества канала по коэффициенту BER

Категория	Значение BER
А (высокое)	BER → 0
В (хорошее)	10 ⁻⁸ < BER < 10 ⁻⁷
С (среднее)	10 ⁻⁷ < BER < 10 ⁻⁵
Д (низкое)	10 ⁻⁴ < BER < 10 ⁻³
Е (деградация)	BER < 10 ⁻³

Таблица 3

Определение качества канала по числу пропущенных стадий

Категория	Количество пропущенных стадий, %	Число паритетов
А (высокое)	>66	5
В (хорошее)	52–66	
С (среднее)	41–52	
Д (низкое)	32–41	
Е (деградация)	24–32	

Окончание табл. 3

Категория	Количество пропущенных стадий, %	Число паритетов
A (высокое)	>75	7
B (хорошее)	66–75	
C (среднее)	58–66	
D (низкое)	51–58	
E (деградация)	44–51	
A (высокое)	>80	9
B (хорошее)	74–80	
C (среднее)	68–74	
D (низкое)	63–68	
E (деградация)	56–63	

Статистические данные, полученные ранее в результате моделирования многопорогового декодирования трехмерных итеративных кодов с модифицированным алгоритмом выбора пороговых значений для следующей стадии, дают возможность сделать вывод о том, что ошибки низкой кратности позволяют декодеру пропустить большее число стадий, ошибки более высокой кратности (4 и более) могут привести к тому, что стадии декодирования не будут пропущены вообще.

Качество канала предлагается условно разделить на пять категорий: А (высокое), В (хорошее), С (среднее), D (низкое) и E (деградация) (табл. 2).

Рассмотрим принцип работы устройства на примере. В начальный момент функционирования устройства в случае отсутствия информации о качестве канала применяется код, подходящий по длине передаваемой информационной последовательности и с наибольшей скоростью. Допустим, на вход блока кодирования поступило информационное сообщение длиной 253 бита, значит, в соответствии с табл. 1 будет использован код (256, 16/27, 5).

На начальном этапе деление информационной последовательности не требуется, поэтому БДИП добавляет в начало передаваемого сообщения три нулевых бита и передает сформированную последовательность на первый вход 27 кодера. На второй вход 26 кодера от ЗУ поступает проверочная матрица. Таким образом, кодовая последовательность с выхода кодера поступает на вход 29 БОКП, который убирает добавленные в начало последовательности нулевые биты и через выход 5 передает кодовую последовательность на первый вход блока модуляции (демодуляции). Блок модуляции (демодуляции) выполняет преобразование и передает информацию в дискретный канал связи.

После передачи информации по каналу связи на стороне приемника выполняется обратное

преобразование блоком модуляции (демодуляции) и полученная кодовая последовательность поступает на вход 12 блока декодирования, а именно на первый вход БДКП, который добавляет в начало кодовой последовательности три недостающих нулевых бита и через выход 36 передает последовательность на первый вход многопорогового декодера, а через выход 39 – на второй вход БОИП количество добавленных бит. На второй вход 35 многопорогового декодера от ЗУ поступает выбранная проверочная матрица, на основании которой многопороговый декодер обнаруживает и исправляет ошибки в принятой последовательности, определяя при этом кратность исправляемой ошибки и число пропущенных стадий, которые поступают на вход 15 блока анализа и накапливаются там. Через выход 38 информационная последовательность поступает на первый вход БОИП, который убирает добавленные нулевые биты и отправляет информационную последовательность через выход 14 на блок анализа.

Блок анализа по возможности рассчитывает значение BER. Через заданное число передаваемых информационных блоков БА получает значение качества канала (табл. 2, 3), например $BER = 2,7 \cdot 10^{-4}$, что соответствует категории D, и формирует выход 17, который поступает на второй вход блока декодирования 13 (необходим для корректной работы декодера при следующей передаче) и на второй вход 20 блока кодирования (через так называемую «обратную связь» – модулятор (демодулятор) передатчика 11, бинарный канал и модулятор (демодулятор) приемника 6).

В ходе передачи при любой категории качества канала за исключением А анализатор уменьшает скорость кода r , а затем увеличивает количество паритетов a в коде. Возможное изменение параметров выбранных кодов в случае постоянного ухудшения качества канала представлено в табл. 4. Так как в рассматриваемом примере качество канала ниже категории А, то анализатор уменьшает скорость кода и соответственно по табл. 1 выбирает новый код (256, 4/7, 5).

Из запоминающих устройств блоков кодирования и декодирования считывается соответствующая проверочная матрица, на основе которой будут работать кодер и многопороговый декодер.

При следующей передаче в случае неудовлетворительного качества канала анализатор повысит число паритетов и будет выбран код (256, 1/2, 7), скорость которого тоже будет снижена. В дальнейшем в зависимости от рассчитанного значения BER может быть переключение кодера (декодера) на трехмерные итеративные коды (256, 16/35, 7), (256, 4/9, 9), (256, 16/37, 9).

Таблица 4

Значения параметров кода

№	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
k	256	256	256	256	256	256	128	128	128	128	128
r	16/37	4/7	1/2	16/35	4/9	16/37	8/15	1/2	4/9	8/19	8/21
a	5	5	7	7	9	9	5	5	7	7	9
Направление изменения параметров	$\uparrow r \uparrow a$	$\downarrow r$	$\downarrow r \uparrow a$	$\downarrow r$	$\downarrow r \uparrow a$	$\downarrow r$	$\uparrow r \downarrow a$	$\downarrow r$	$\downarrow r \uparrow a$	$\downarrow r$	$\downarrow r \uparrow a$

В случае ухудшения, отсутствия изменений или незначительного улучшения блок анализа выбирает код с меньшим объемом информационной части, т. е. k изменяется с 256 на 128 и выбирается код (128, 8/15, 5). Эту возможность дают БДИП и БОКП блоков кодирования и декодирования. Затем весь процесс повторяется снова: уменьшается скорость кода и увеличивается число паритетов, т. е. будут последовательно выбраны следующие коды: (128, 8/15, 5), (128, 1/2, 5), (128, 4/9, 7), (128, 8/19, 7), (128, 8/21, 9). При необходимости можно уменьшить параметр k до 64 бит.

В случае достижения приемлемого качества канала (категории А и В) будет происходить обратный процесс: уменьшение числа паритетов и увеличение скорости кода, т. е. если нет необходимости использовать код с более высокой скоростью, то возможен возврат к коду с более низкой скоростью (движение вниз по табл. 1). Таким образом, в процессе передачи периодически происходит пересчет значения BER и переключение на различные трехмерные итеративные коды.

Функциональность предложенного устройства аналогична адаптивному устройству кодирования (декодирования) данных на основе кодов низкой плотности проверок на четность [4]. Результаты моделирования [5] адаптивного устройства [4] показали, что динамическое изменение параметров кода приводит к повышению производительности предложенного метода кодирования (декодирования) по сравнению с кодированием (декодированием) без изменения параметров. Кроме того, в случае повышения качества канала динамически устанавливается более быстрый код, что увеличит скорость передачи информации.

Заключение. Предлагаемое адаптивное устройство кодирования (декодирования) данных на основе итеративных кодов и многопорогового декодирования позволяет динамически изменять параметры используемых итеративных кодов, что дает возможность

использовать более быстрый код, увеличивая тем самым скорость передачи информации. Также можно использовать несколько кодов для одной передаваемой последовательности и определять количество ошибочных бит, что в свою очередь позволяет оценить качество канала по коэффициенту ошибок по битам BER в режиме без отключения связи.

Литература

1. Канаков В. А. Новые технологии измерения в цифровых каналах передачи информации: учеб.-метод. материал по программе повышения квалификации «Современные системы мобильной цифровой связи, проблемы помехозащищенности и защиты информации». Н. Новгород: НГТУ им. Н. И. Лобачевского, 2006. 91 с.
2. Urbanovich P. P., Vitkova M. F., Romanenko D. M. The algorithm for determining the multiplicity of errors by multithreshold decoding of iterative codes // News electrical and electronic technologies and their industrial implementation: proc. VIII International Conference, Zakopane, Poland, June 18–21, 2013. Zakopane, 2013. P. 148.
3. Виткова М. Ф. Анализ возможности оптимизации многопорогового декодирования многомерных итеративных кодов // Сборник научных работ 63-й научно-технической конференции студентов и магистрантов БГТУ, Минск, 23–28 апр.: в 4 ч. / Белорус. гос. технол. ун-т. Минск, 2012. Ч. 4. С. 332–335.
4. Адаптивное устройство кодирования / декодирования данных на основе кодов низкой плотности проверок на четность: пат. 8296 Респ. Беларусь, Н 03 М 13/11 Н 04 L 1/00 / П. П. Урбанович, Н. В. Пацей, Д. М. Романенко, Д. М. Шиман; заявитель Белорус. гос. технол. ун-т; заявл. 6.10.11; опубл. 30.06.12.
5. Пацей Н. В. Моделирование переменных кодов низкой плотности проверок на четность // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2011. Вып. XIX. С. 132–135.

Поступила 20.03.2014

УДК 003.26+347.78

Н. П. Шутько, аспирант (БГТУ)

ОСОБЕННОСТИ И ФОРМАЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ОСАЖДЕНИЯ СЕКРЕТНОЙ ИНФОРМАЦИИ В ТЕКСТОВЫЕ ДОКУМЕНТЫ НА ОСНОВЕ СТЕГАНОГРАФИИ

Объект исследования данной статьи — текстовые документы, обрабатываемые с помощью известных текстовых процессоров и редакторов, а также коды компьютерных программ и файлы баз данных. Описаны основы математического моделирования процесса осаждения тайной авторской информации в указанные типы документов на основе текстовой стеганографии. Тайная информация предназначена для защиты прав интеллектуальной собственности. Осаждение информации предусматривает изменение цветковых координат символов текста. Основу математической модели составляют пространственные координаты и цветковые параметры пикселей, формирующих растр текста.

The object of the research of this article — text documents that are processed with the help of some word processors and editors, as well as codes of software and database files. The basics of mathematical modeling of the embedding process of the secret author information in these types of documents based on text steganography are described. Secret information is intended to protect intellectual property rights. An Embedding provides changing the color coordinates of characters in the text. The base of mathematical model is the spatial coordinates and color values of pixels forming the raster of the text.

Введение. В настоящее время остро стоит проблема охраны авторского права. Как известно, интеллектуальная собственность — право на результат собственного интеллектуального труда, включая литературный труд, объекты науки, электронные документы и т. д.

Документом, регулирующим взаимоотношения между автором и издателем, является закон Республики Беларусь от 17 мая 2011 г. № 262-З «Об авторском праве и смежных правах».

Авторское право распространяется на произведения науки, литературы и искусства, находящиеся в какой-либо объективной форме:

письменной (рукопись, машинопись, нотная запись);

электронной (компьютерная программа, электронная база данных, текст);

звуко- или видеозаписи (магнитная, оптическая, электронная);

изображения (картина, рисунок, кино-, теле-, видео-, фотокадр);

объемно-пространственной (скульптура, макет, сооружение).

Охрана авторского права на печатное издание регламентируется авторским договором. Издание (переиздание) произведения должно осуществляться с согласия автора. Однако известны многочисленные случаи отступления от этого требования. Тем более, что довольно проблематично отследить использование того или иного электронного документа, его тиражирование. Система защиты авторских прав в Интернете в Беларуси еще на стадии становления.

В контексте рассматриваемой проблемы следует отметить еще одно важное обстоятельство. Цифровые технологии преобразования бумажных документов в электронную форму используются не только в офисном документо-

обороте. Многие учреждения и частные лица сканируют бумажные документы, после чего последние могут храниться, архивироваться и более легко находиться. За последние несколько десятков лет принтеры и ксероксы стали общедоступными, простыми в употреблении и обслуживании и позволяют с помощью соответствующих программных средств производить разнообразные манипуляции с цветковыми параметрами текстов или графики. Это, по существу, нивелирует различие между бумажным и электронным документами и означает, что документы на бумажных носителях могут сканироваться и пересылаться по сетям связи почти также легко, как и изначально созданные электронные документы.

Таким образом, на данный момент угроза информационного пиратства в отношении электронных и бумажных документов приобрела практически одинаковую остроту. Эта особенность связана с возможностями современных компьютерных (цифровых) технологий.

В последнее время активно разрабатываются и исследуются методы обеспечения прав интеллектуальной собственности на основе стеганографии [1, 2]. Нами предложен ряд стеганографических методов, предназначенных для защиты электронных документов [3–6].

Для сравнительной оценки эффективности того или иного разработанного метода по критерию максимального объема осаждаемой информации, или стегостойкости (аналог понятия «криптостойкость»), необходим соответствующий математический аппарат. Общая идея, которую мы используем для решения указанной задачи, основана на формальном описании процедуры осаждения цифрового водяного знака (ЦВЗ) [7].

Далее в статье будут описаны важные, с нашей точки зрения, аспекты, относящиеся к разработке математической модели процесса стеганографической защиты текстовых документов.

Основная часть. Представляем набор приемов для встраивания неразличимых знаков (авторской информации) в отформатированные документы. Формально указанный прием связан с некоторым преобразованием или кодированием символа текста. Или более точно: в нашем случае кодирование символа — это изменение детальной особенности этого символа. Примеры возможных изменений детали включают изменение высоты отдельного знака или его позиции относительно других символов (например, настройка кернинга) или изменение параметров, формирующих цвет символа. Понятно, что для получения идентичной авторской информации в процессе ее извлечения аналогичные параметры какой-то части символов текста должны быть неизменными. Эти символы, таким образом, являются как бы «реперными точками», позволяющими производить сравнительные операции.

Фундаментальной особенностью шрифтов является отделение информации о форме символов от процесса их воспроизведения на растровом выводном устройстве. Если контуры символов шрифта можно описывать самыми разными способами, то задача воспроизведения, в конечном итоге, сводится к активизации некоторых точек (высвечиванию пикселей на экране дисплея или заполнению краской при печати на принтере).

Нетрудно заметить, что при обратном преобразовании (извлечении сообщения) могут возникнуть неоднозначности, обусловленные структурой (гарнитурой) шрифта [8].

Такая неоднозначность может быть вызвана, например, нарушением симметричности некоторых символов текста (к примеру, возникновением разного расстояния между вертикальными штрихами буквы Ш), что резко искажает их форму и затрудняет восстановление авторской информации.

Еще одной особенностью является то, что при воспроизведении символов на устройствах с малой разрешающей способностью (до тысячи пикселей на дюйм), особенно при выводе текста небольшим кеглем (12 и меньше), сильно сказываются ошибки масштабирования. Масштабирование происходит в абсолютных координатах относительно некоторой произвольной точки и всегда приводит к получению целочисленного результата. При этом возникает проблема округления нецелых результатов. Например, если координаты некоторого элемента символа в системе координат описания

контура равны (200; 100), то при уменьшении размера контура в 3 раза они трансформируются в (66,66; 33,33). Поскольку нам нужны целые значения, они превратятся в (67; 33), т. е. значение горизонтальной координаты немного (на треть пикселя) увеличится, а вертикальной — на столько же уменьшится.

Существуют и другие особенности (выпадение точек, нарушение формы округлых букв — В, О, Р, С, б, е и др.). Однако это касается, в первую очередь, таких методов текстовой стеганографии, как *Line Shift Coding* и *Word Shift Coding* [3].

Для дальнейшего анализа в качестве основного элемента символа текста, с помощью которого мы осуществляем упомянутое кодирование, определяется цвет.

Текстовые документы-контейнеры, в которые осаждаются тайная (авторская) информация, создаются, например, в текстовом процессоре MS Word. Будем считать, что исходный или стандартный цвет символов во всем текстовом документе — черный, и отождествлять текст с графическим рисунком.

Графические цветные файлы со схемой смешения RGB кодируют каждую точку рисунка тремя байтами. Данная точка (положим, это пиксель) состоит из трех составляющих: красного, зеленого, синего. Изменение каждого из трех наименее значащих бит (по известному методу LSB) приводит к изменению менее 1% интенсивности точки. Это позволяет скрывать в стандартной графической картинке объемом 800 кбайт около 100 кбайт информации, что не заметно при просмотре текста.

Вся информация, выводимая на экран компьютера, имеет двоичный вид, т. е. представляет собой совокупность «0» и «1». Для примера закодируем «0» и «1» различными цветами. Пусть мы хотим встроить в электронный текстовый документ (первая страница данной статьи) сообщение «Труды БГУ». Данное сообщение в двоичном коде будет иметь вид, показанный на рис. 1.

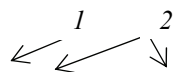
```
001000100000010001000000000001000100001100000
100001101000000010001001011000001000010000000
000000000100010000010000010011000001000010001
0000001000010001100000100
```

Рис. 1. Двоичное представление осаждаемого сообщения

Для наглядности процесса встраивания пусть «0» будет иметь цветные координаты RGB (0; 100; 0), а «1» — (100; 0; 0).

Скрытие данных производится не только в обычных, но и в специальных (мягкий перенос, разрыв строки и др.) символах и пробелах.

Результат встраивания стегосообщения в текстовый документ на основе кодирования цветового параметра соответствующего символа показан на рис. 2. Процесс стегопреобразований выполняется с помощью специального программного средства [9].



Объект исследования данной статьи — текстовые документы, обрабатываемые с помощью известных текстовых процессоров и редакторов, а также коды компьютерных программ и файлы баз данных.

Рис. 2. Текстовый документ с осадненной информацией

Символы маркируются изменением их цветовых координат в большую или меньшую сторону. Соседние символы не маркируются. На последнем рисунке выбор кодируемых символов производился псевдослучайным образом, что составляет один из элементов ключа.

На рисунке некоторые буквы выделились красным (соответствует «1») и зеленым (соответствует «0») цветами. В черно-белом формате данной статьи обнаружить различие цветовых параметров (красный или зеленый) символов достаточно сложно. Поэтому обозначим их: 1 — указывает на символ красного цвета, а 2 — зеленого.

В последующем, чтобы извлечь стегосообщение, необходимо анализировать информацию о цветовых координатах символов в документе, и, таким образом, с помощью известного только автору секретного ключа восстанавливается тайное сообщение.

Существующий подход формального представления процесса прямого и обратного стегопреобразований текстового документа, известный, например, из работы [10], предусматривает анализ так называемых горизонтальных и вертикальных профилей выделенного фрагмента текста. Эти профили основаны на подсчете пикселей в каждом (x) горизонтальном ($x = 1, 2, \dots, L$; L — количество «черных» пикселей в одном горизонтальном ряду черно-белого раstra, формирующего анализируемый фрагмент текста) или в каждом (y) вертикальном ряду ($y = 1, 2, \dots, W$; W — количество «черных» пикселей в одном вертикальном ряду такого раstra). В сравнении с простой такая модель не позволяет напрямую учитывать, например, цветовые параметры символов.

Дальнейшие наши рассуждения будем строить, исходя из нескольких понятных положений:

1) используется трехканальная (RGB) модель формирования раstra (bitmap), соответствующего текстовому документу;

2) анализируемый фрагмент текста представляется в виде матрицы ($W \times L$) пикселей, местоположение каждого из которых определяется параметром $p(x, y)$;

3) влияние упомянутых выше особенностей шрифтов (нарушение симметричности, недостатки масштабирования, выпадение точек, нарушение формы округлых букв и др.) на процесс стегопреобразований текста будем рассматривать как наложение шумовой компоненты $N(x, y)_{rk}$ на соответствующие пиксели, составляющие контуры данного символа (находится в r -й строке и k -м столбце текста);

4) общая структурная схема стеганографической системы соответствует рис. 3.

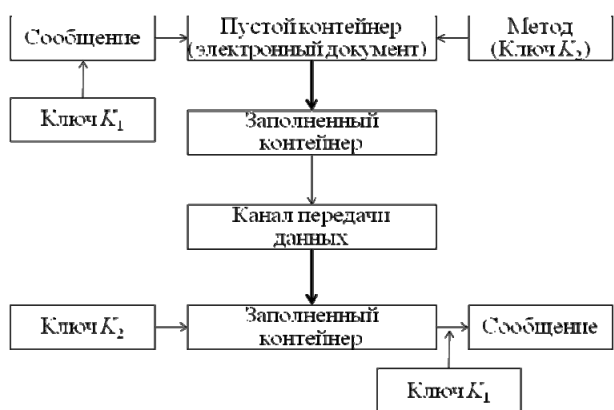


Рис. 3. Структурная схема стеганографической системы

Осаждаемая авторская информация (сообщение) шифруется с использованием какого-либо ключа K_1 . Полученное сообщение осаждается в контейнер с применением ключа K_2 . Такой ключ может быть многопараметрическим (определяется используемым методом стегопреобразования или, например, выбором кодируемых символов на основе псевдослучайности и др.).

Будем считать, что заполненный контейнер не претерпевает изменений в ходе передачи данных. Заключительный этап — извлечение стегосообщения и его дешифрование.

За основу формального описания процесса нами взята методология описания процессов генерации и осаднения ЦВЗ в электронные документы, а также извлечения из них.

Пусть компонентами формального описания являются:

- множество скрываемых (авторских) сообщений M ;
- множество возможных контейнеров (текстовых документов) T ;
- множество возможных ключей (методов генерации авторской информации, например зашифрованной) K_1 ;

– множество возможных ключей (методов осаждения авторской информации) K_2 .

Тогда формально процессы можно описать следующим образом:

– создание стегосообщения M_S :

$$M_S = F(M, K_1);$$

– создание стего (заполненный контейнер) S :

$$S = F(T, M_S, K_2);$$

$$K_2 = \{r \pm k_1, g \pm k_2, b \pm k_3\},$$

где r, g, b — исходные цветовые координаты символов;

– извлечение сообщения M :

$$M = F(S, K_2, K_1).$$

Нашей задачей в дальнейшем исследовании является определение вида F и влияния T, M_S, K_2 (параметров функции) на конечное значение S .

Заключение. В статье приводится формальное описание математической модели процесса формирования секретного сообщения, его осаждения в текст-контейнер и извлечения на основе стеганографических преобразований. Скрываемая информация размещается в цветовых координатах символов текста. Проведена аналогия между битовой картой изображения и символом текста. Основу математической модели составляет описание процесса создания цифрового водяного знака.

Литература

1. Bennett K. Linguistic steganography: Survey, analysis, and robustness concerns for hiding information in text. West Lafayette: Purdue Univ., 2004. 30 p.

2. Коначович Г. Ф., Пузыренко А. Ю. Компьютерная стеганография. Теория и практика. Киев: МК-Пресс, 2006. 288 с.

3. Пласковицкий В. А., Шутько Н. П. Управление защитой информации на основе стегано-

графических методов // Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов: междунар. науч.-техн. конф., Минск, апрель 2012 г. / Белорус. гос. технол. ун-т. Минск: БГТУ, 2012. С. 283–285.

4. Urbanovich N. Development, analysis of efficiency and performance in an electronic textbook methods of text steganography // Printing future days: 4th International Scientific Conference on Printing and Media Technology, Germany, Chemnitz, november 2011. Chemnitz, 2011. P. 189–193.

5. Урбанович Н. П. Исследование эффективности стеганографических методов скрытия информации в тексте // Новые математические методы и компьютерные технологии в проектировании, производстве и научных исследованиях: XIII респ. науч. конф. студентов и аспирантов, Гомель, 21–23 марта 2011 г.: в 2 ч. / Гомел. гос. ун-т им. Ф. Скорины. Гомель, 2011. Ч. 2. С. 27–28.

6. Urbanovich N., Plaskovitsky V. The use of steganographic techniques for protection of intellectual property rights // New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation: 7-th Int. Conf., Zakopane, Poland, June 2011. Zakopane, 2011. P. 147–148.

7. Shutko N. Text steganography as an effective instrument of protection of the copyright on electronic document // New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation: 8-th Int. Conf., Zakopane, Poland, June 18–21, 2013. Zakopane, 2013. P. 147.

8. Филиппович А. Ю. Компьютерные шрифты: форматы, кодировка, растеризация. М.: МГУП, 2012. 12 с.

9. Свидетельство о регистрации компьютерной программы Sword v.1.0 / В. А. Пласковицкий, Н. П. Шутько. № 383 от 04.01.2012 // Реестр Нац. центра интеллектуал. собственности Респ. Беларусь. Минск, 2012.

10. Document Marking and Identification using Both Line and Word Shifting / S. H. Low [et al.]. Boston: Infocom, 1995. 8 p.

Поступила 20.03.2014

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И ОБУЧАЮЩИЕ СИСТЕМЫ

УДК 004.021

В. Л. Колесников, доктор технических наук, профессор (БГТУ);
А. И. Бракович, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);
Я. А. Жук, магистрант (БГТУ)

ФАЗИФИКАЦИЯ И ДЕФАЗИФИКАЦИЯ ДАННЫХ ПРИ РЕШЕНИИ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫХ ЗАДАЧ

В статье представлена математическая основа фазификации и дефазификации данных при решении многокритериальных задач, описана программная реализация анализа наблюдений за производственным комплексом. Разработанное программное средство позволяет формализовать и решать многокритериальные задачи с помощью нечетких множеств и экспоненциальных функций принадлежности.

The article describes the mathematical basis of fuzzification and defuzzification data for solving multiobjective problems and the software implementation analysis of production complex observations. The developed software tool allows to formalize and solve the problem using multi-criteria fuzzy sets and exponential membership functions.

Введение. Самую распространенную в настоящее время формулировку оптимизационных задач, предписывающих вычислить максимальное значение эффективности при заданных условиях, следует уже считать лишь частным случаем нахождения рационального решения. Жизненные обстоятельства на самом деле оказываются значительно сложнее. В реальной обстановке оценка деятельности предприятий производится на основе более десятка критериев: по производительности, себестоимости, рентабельности, загрязнению атмосферы и водоема и т. д. Приходится жить и работать в многокритериальном мире, где цели часто противоречат друг другу. Например, производительность и рентабельность нужно максимизировать, а себестоимость и загрязнение – минимизировать.

Лингвистическая переменная – это переменная, значение которой определяется набором вербальных (т. е. словесных) характеристик некоторого свойства.

Введя понятие лингвистической переменной и допустив, что в качестве ее значений (термов) выступают нечеткие множества, предложен аппарат для описания процессов интеллектуальной деятельности, включая нечеткость и неопределенность выражений. Это позволило создать фундамент теории нечетких множеств и нечеткой логики, а также предпосылки для внедрения методов нечеткого управления в инженерную практику.

Значения лингвистической переменной определяются через так называемые нечеткие

множества, которые, в свою очередь, определены на некотором базовом наборе значений или базовой числовой шкале, имеющей размерность. Каждое значение лингвистической переменной определяется как нечеткое множество (например, нечеткое множество «высокое качество») [1].

Основная часть. Нечеткое множество определяется через некоторую базовую шкалу B и функцию принадлежности нечеткого множества – $\mu(x)$, $x \in B$, принимающую значения на интервале $[0...1]$. Таким образом, нечеткое множество B – это совокупность пар вида $(x, \mu(x))$, где $x \in B$. Либо

$$B = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\mu(x_i)}, \quad (1)$$

где x – i -е значение базовой шкалы.

Функция принадлежности определяет субъективную степень уверенности эксперта в том, что данное конкретное значение базовой шкалы соответствует определяемому нечеткому множеству. Эту функцию нельзя путать с вероятностью, носящей объективный характер и подчиняющейся другим математическим зависимостям.

Элементы теории нечетких множеств, правила импликации и нечетких рассуждений образуют систему нечеткого вывода. В ней можно выделить множество используемых в системе нечетких правил, базу данных, содержащую описание функций принадлежности, а также

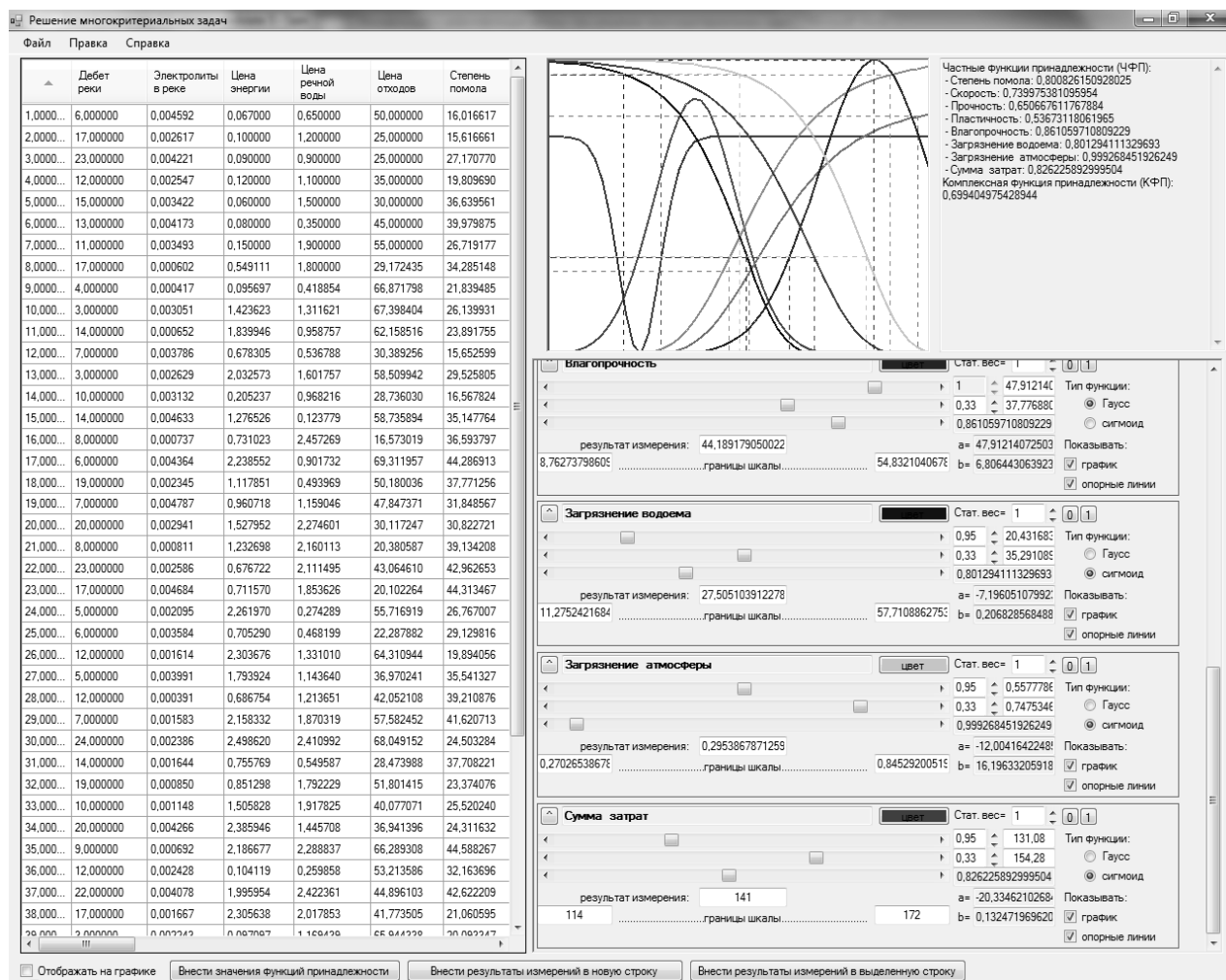
механизм вывода и агрегирования, который формируется применяемыми правилами импликации. Следует упомянуть, что в случае технической реализации в качестве входных и выходных сигналов выступают измеряемые величины, однозначно сопоставляющие входным значениям соответствующие выходные значения. Для обеспечения взаимодействия множеств этих двух видов вводится нечеткая система с так называемым фазификатором (преобразователем множества входных данных в нечеткое множество) на входе и дефазификатором (преобразователем нечетких множеств в конкретное значение выходной переменной) на выходе.

На основании данного подхода разработано программное средство анализа полученной в ходе наблюдений за функционированием производственного комплекса цифровой информации об условиях производства, качестве продукции и эколого-экономической ситуации. Исходные данные импортируются из электронных таблиц Excel при помощи библиотеки Microsoft.Primary.Interop.Excel в элемент управле-

ния DataGridView. Программное средство позволяет в элементе управления PictureBox создать математико-графический образ качества, преобразующий множества требуемых значений показателей (прочности, пластичности, влагопрочности, загрязнения водоема, атмосферы и себестоимости продукции) в нечеткие множества соответствующих функций принадлежности. Под математико-графическим образом в контейнере FlowLayoutPanel располагаются экземпляры разработанного элемента управления функциями принадлежности. Обновление математико-графического образа качества происходит при изменении настроек функций принадлежности в реальном времени.

Колоколообразная частная функция принадлежности для критерия Y с центром c и вариацией σ для обрабатываемого множества рассчитывается по формуле

$$d = \exp \left[- \left(\frac{y - c}{\sigma} \right)^2 \right]. \quad (2)$$



Главное окно интерфейса разработанной программы при построении математико-графического образа качества

S-образная частная функция принадлежности для критерия Y с параметрами $K1$, $D1$, $K2$, $D2$ для обрабатываемого множества рассчитывается по формуле

$$d = e^{-e^{Y(x)}}, \quad (3)$$

$$Y(x) = b_0 + b_1 x_{ij}, \quad (4)$$

$$b_1 = \frac{\ln \ln |D2_j| - \ln \ln |D1_j|}{K2_j - K1_j}; \quad (5)$$

$$b_0 = \ln \ln |D1_j| - b_1 K1_j.$$

где i – номер строки на рисунке ($i = 1, \dots, n$); j – номер столбца целевого атрибута; $K1$, $D1$ и $K2$, $D2$ – попарные координаты двух точек на логистической кривой.

Комплексная оценка (суперкритерий) вычисляется по формуле

$$D_i = \left(\prod_{j=1}^p d_{ij}^{\delta_j} \right)^{1/\sum_{j=1}^p \delta_j}, \quad (6)$$

где δ_j – статистический вес (важность) j -го критерия [2], настраиваемая при помощи разработанного элемента управления для каждой функции принадлежности.

Созданное программное средство позволяет выполнить расчет значений настроенных функций принадлежности и суперкритерия по формулам (2)–(6) для всех наблюдений. Расчеты выполняются для функций принадлежности с ненулевым статистическим весом. Результаты расчетов выводятся в дополнительных столбцах элемента управления DataGridView, содержащего импортированные данные. Дефазификация осуществляется поиском номера строки базы данных с максимальным значением суперкритерия. Для сортировки результатов достаточно нажать на заголовок столбца со значениями суперкритерия.

Фрагмент программного кода, используемого для построения графиков функций принадлежности представлен ниже:

```
//обход всех переменных
for (int g = 0; g < ширина; g++)
{
    try {
        //чтение статистического веса с панели
        регулирования критерия
        статВес=double.Parse(регуляторы[g].
        Controls["статВес"].Text);
    }
    catch (Exception eeeee) {
        //в случае ошибки статистический вес
        считается равным 0
    }
}
```

```
статВес = 0;
}
//если статистический вес переменной равен
0 – переходим к следующей, если не равен –
выполняется дальнейший анализ настроек критерия
if (статВес != 0){
...
//черчение графика
if(((CheckBox)регуляторы[g].Controls["показать"]).Checked == true) {
//начальная точка – левый нижний угол
изображения
старая = new Point(0, график.Size.Height);
int i = 0;
//цикл вычисления значений ФП для 50
точек
for (double x = минX; x <= максX + 2 *
шаг; x += шаг, i++){
    Y = расчетЧФП(x, g);
    //вычисление положения новой точки в
    оконной системе координат
    новая.X = (int)((x - минX) * Kx);
    новая.Y = (int)((Y) * Ky + дУ);
    //соединение старой точки с новой
    e.Graphics.DrawLine(пероГрафик, старая,
    новая);
    //новая точка используется в качестве
    старой на следующем шаге цикла
    старая = новая;
}
i++;}
```

Заключение. В статье представлена математическая основа фазификации и дефазификации данных при решении многокритериальных задач, описана программная реализация анализа наблюдений за производственным комплексом. Разработанное программное средство позволяет формализовать и решать многокритериальные задачи с помощью нечетких множеств и экспоненциальных функций принадлежности.

Литература

1. Brakovich A. Data mining for industrial facilities // New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation – NEET' 2013: proc. of the 8-th Intern. conf., Zakopane, Poland; ed. T. Koltunowicz. Lublin, 2013. P. 145.
2. Brakovich A., Kolesnikov V., Urbanovich P. Mathematical foundations of composite desirability function for evaluation of the product quality in the relationship with anthropogenic impacts on the environment // Informatyka, automatyka, pomiary w gospodarce i ochronie srodowiska. 2012. № 4a. P. 36–39.

Поступила 19.03.2014

УДК 004.021

В. Л. Колесников, доктор технических наук, профессор (БГТУ);
А. И. Бракович, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);
Я. А. Жук, магистрант (БГТУ)

РЕШЕНИЕ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫХ ЗАДАЧ, ОПТИМАЛЬНЫХ ПО ПАРЕТО

В статье представлена математическая и программная реализация процесса построения диаграммы Парето на основании набора технологических режимов и требований к показателям качества, приведена блок-схема алгоритма поиска Парето-оптимальных решений. Разработанное программное средство позволяет выполнить поиск Парето-оптимальных векторов и их оценку для выбора оптимального технологического режима.

The article describes the mathematical and software implementation process of building a Pareto chart based on a set of technological regimes and requirements for quality indicators. In article is shown a block diagram of the Pareto-optimal solutions search. The developed software tool allows to search for Pareto-optimal vectors and their evaluation for the optimal technological regime.

Введение. Множество состояний системы, оптимальных по Парето, называют множеством Парето, множеством альтернатив, оптимальных в смысле Парето, либо множеством Парето-оптимальных альтернатив. Ситуация, когда достигнута эффективность по Парето, – это ситуация, при которой все выгоды от совершенствования исчерпаны.

Само название «принцип Парето» для «принципа 20/80» предложил Джозеф Джуран в 1941 г. Соблюдение принципа очень часто встречается в самых разных областях. Например, в том, что 20% людей обладают 80% капитала, или 80% пользователей посещают 20% сайтов, 20% покупателей или клиентов приносят 80% прибыли. Но следует учитывать, что в этих утверждениях фундаментальными являются не приведенные числовые значения, а сам факт их существенного различия.

Значимых факторов немного, а факторов тривиальных множество – лишь единичные действия приводят к важным результатам. Большинство удачных событий обусловлено действием небольшого числа высокопроизводительных сил; большинство неприятностей связано с действием небольшого числа высокодеструктивных сил.

Несмотря на то что «20% усилий дают 80% результата», часто невозможно организовать деятельность так, чтобы не затрачивать остальные 80% усилий. В качестве примера можно указать на аналогичный принцип в науке, который гласит, что «20% ученых совершают 80% открытий, но это было бы невозможно, если бы не было оставшихся 80% ученых» [1].

Основная часть. Распределение Парето случайной величины X с параметрами x_m и k задается равенством:

$$F_X(x) = P(X < x) = 1, \left(\frac{x_m}{x}\right)^k, \quad \forall x \geq x_m. \quad (1)$$

Плотность распределения Парето имеет вид:

$$f_X(x) = \begin{cases} \frac{kx_m^k}{x^{k+1}}, & x \geq x_m, \\ 0, & x < x_m. \end{cases} \quad (2)$$

Моменты случайной величины, имеющей распределение Парето, задаются формулой

$$E[X] = \frac{kx_m}{k+1}, \quad (3)$$

$$D[X] = \left(\frac{x_m}{k+1}\right)^2 \frac{k}{k+2}.$$

Диаграмму Парето можно применять в сфере контроля качества для классификации возникающих проблем и выявлять среди них многочисленные, но существенно важные, а также многочисленные, но несущественные. В большинстве случаев подавляющее число дефектов и связанных с ними потерь возникают из-за относительно небольшого числа причин.

Диаграмма Парето позволяет распределить усилия для разрешения возникающих проблем и установить основные факторы, с которых нужно начинать действовать с целью преодоления возникающих проблем. Различают два вида диаграмм Парето – по результатам и по причинам.

Разработанное программное средство позволяет импортировать содержание электронной таблицы Excel, включающей наблюдения функционирования производственного комплекса, фиксировать требования к критериям (какие значения критерия соответствуют предельным допустимым условиям – максимальным или минимальным), получать упорядоченную информацию о количестве и процентном содержании плохих (проблемных) условий (векторов), приводящих к нарушению зафиксированных требований по каждому критерию.

Также программа строит диаграмму Парето, из которой видно, на регулирование каких критериев следует направить первоочередные научные, финансовые, организационные и другие усилия. На рис. 1 показан пример диаграммы, отражающей необходимость разработки мероприятий, способствующих повышению прочности и пластичности продукции, а также снижению ее себестоимости, поскольку примерно 75% всех проблем производства вызывают именно эти показатели. На второй вкладке интерфейса программы выполняется удаление неудовлетворяющих заданным требованиям критериев, поиск Парето-оптимальных векторов и их оценка. Вкладка содержит две таблицы для вывода входных и выходных данных при каждой операции, а также кнопку переноса выходных данных в таблицу входных данных для выполнения следующей операции. Блок-схема алгоритма поиска Парето-оптимальных решений представлена на рис. 2.

Чтобы ранжировать Парето-оптимальные векторы по важности проблем, установленных по диаграмме Парето, вычисляется их комплексная оценка.

Комплексная оценка Парето-оптимального вектора M рассчитывается как произведение

частных оценок векторов M_i по оцениваемым критериям:

$$M = \prod_{i=1}^N M_i. \tag{4}$$

Частные оценки M_i рассчитываются в зависимости от типа критерия:

$$M_i = \left(\frac{y_i - B_i}{W_i} \frac{P_i}{20} \right), \tag{5}$$

где y_i – текущее значение i -го оцениваемого вектора; B_i – граница брака для i -го критерия; W_i – ширина диапазона значений i -го критерия; P_i – количество Парето-оптимальных векторов по i -му критерию.

Данная формула используется, если критерий подлежит максимизации:

$$M_i = \left(\frac{B_i - y_i}{W_i} \frac{P_i}{20} \right). \tag{6}$$

Эта формула используется, если критерий подлежит минимизации:

$$M_i = \left(\left(1 - \frac{|y_i - B_i|}{W_i} \right) \frac{P_i}{20} \right). \tag{7}$$

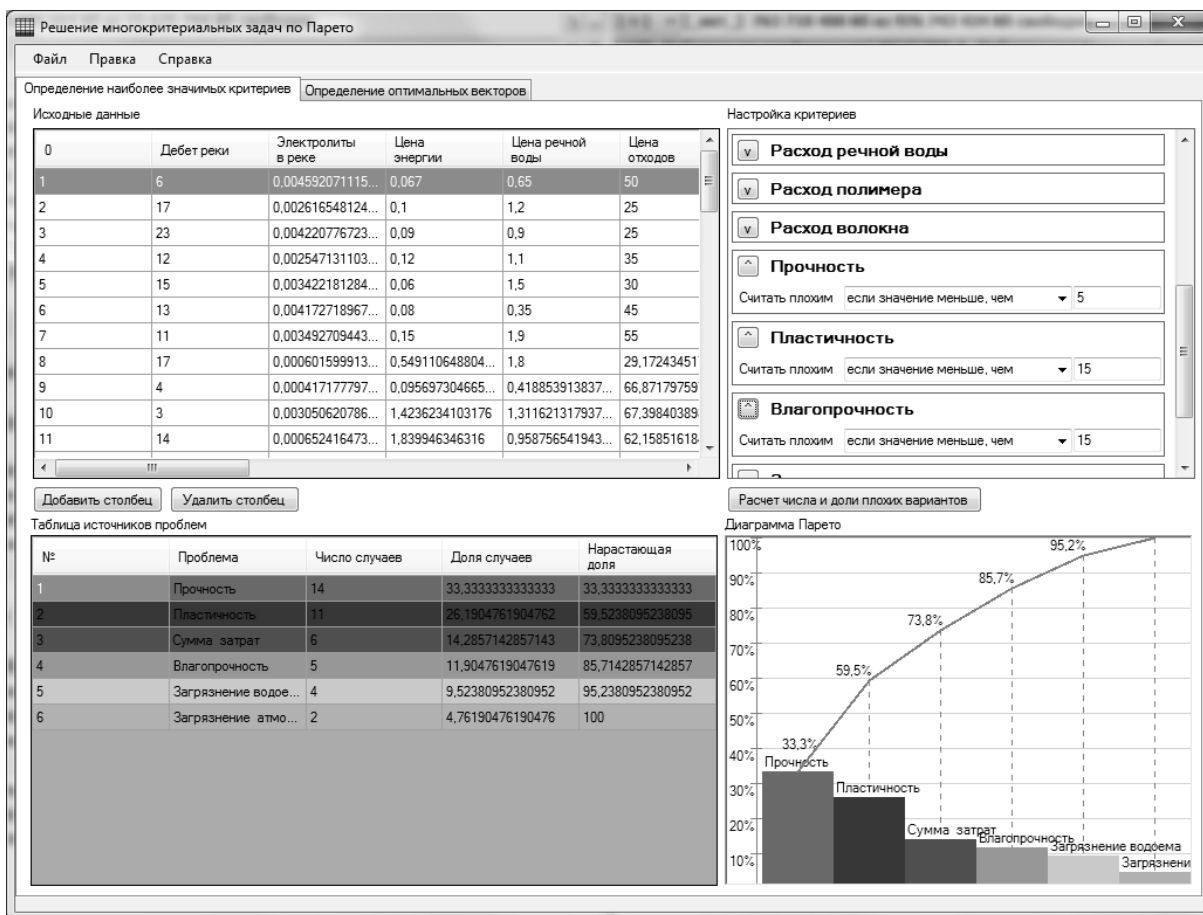


Рис. 1. Главное окно интерфейса разработанной программы

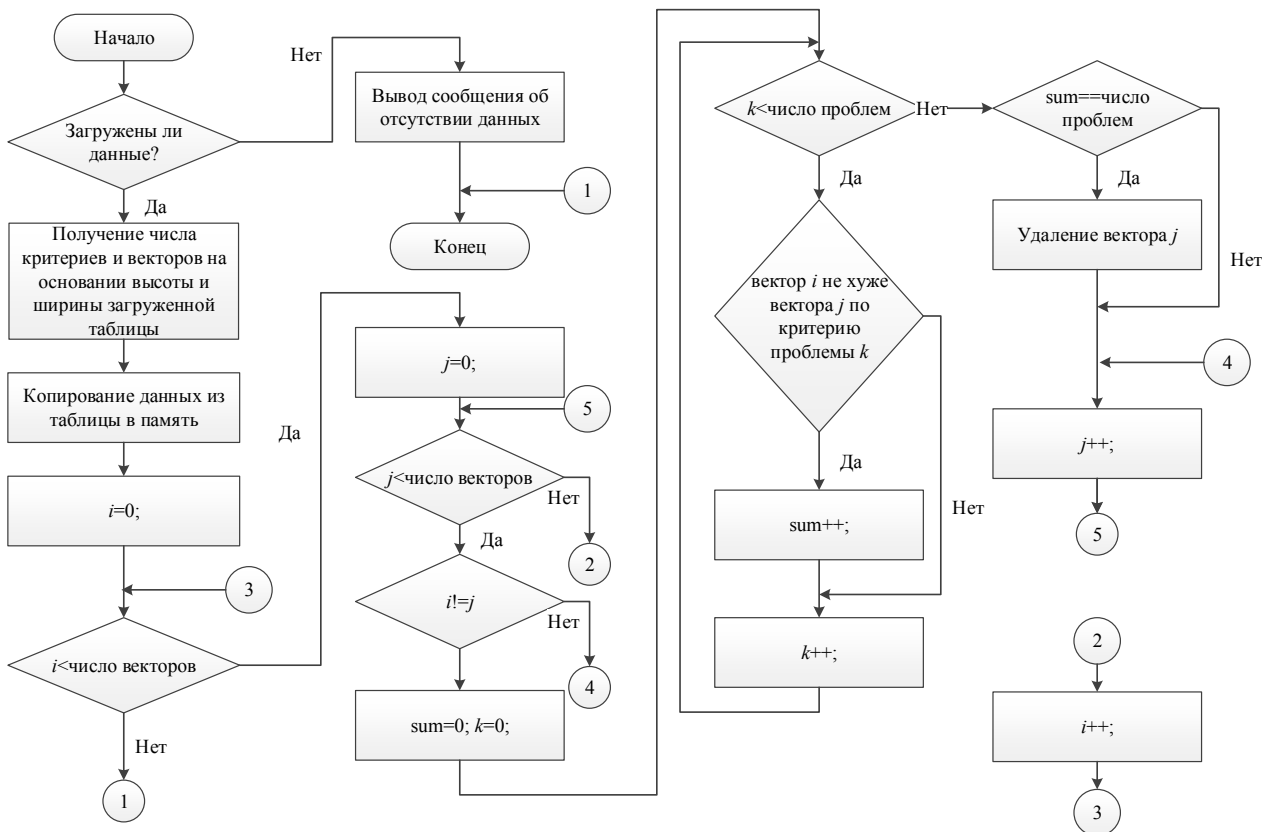


Рис. 2. Блок-схема алгоритма поиска Парето-оптимальных решений

Данная формула используется, если для критерия указаны двусторонние ограничения.

В результате находится один Парето-оптимальный вектор с максимальным значением комплексной оценки, который содержит решение многокритериальной задачи в виде оптимальных значений регулируемых параметров технологического процесса.

Заключение. В статье представлена математическая и программная реализация процесса построения диаграммы Парето на основании набора технологических режимов и требований к показателям качества, приведена блок-схема алгоритма поиска Парето-опти-

мальных решений. Разработанное программное средство позволяет выполнить поиск Парето-оптимальных векторов и их оценку для выбора оптимального технологического режима.

Литература

1. Kolesnikov V., Urbanovich P., Brakovich A. Data mining for industrial facilities // New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation – NEET' 2013: proc. of the 8-th Intern. conf., Zakopane, Poland; ed. T. Koltunowicz. Lublin, 2013. P. 145.

Поступила 19.03.2014

УДК 512.8,681.55

О. В. Герман, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);
О. И. Садовская, преподаватель (ГрГУ); **Ю. О. Герман**, преподаватель (БНТУ)
**СОСТАВЛЕНИЕ ПЛАНА РАБОТ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ ДИЗЬЮНКТОВ
РАЗНОСТНОГО ТИПА**

В статье рассмотрена задача построения расписания выполнения работ на основе формальной модели, представленной системой дизьюнкторов разностного типа. С помощью систем дизьюнкторов разностного типа можно описывать поведение динамических систем, например дискретных систем управления, интеллектуальных роботов, систем планирования работ и др. Временной параметр играет роль временного шага. Представлен общий принцип решения вместе с соответствующей иллюстрацией его применения.

The paper considers a problem of making a time-table for a set of jobs which is based on the formal model represented by a system of difference disjuncts. With the help of difference disjunct systems one can describe a behavior of the dynamic systems, e.g. the discrete type control systems, intelligent robots, job planning systems etc. A time parameter plays a role of the time step. The general principle of solving difference disjunct systems alongside with the corresponding illustration are given.

Введение. В статье [1] был предложен метод синтеза управления дискретной системой с конечным числом состояний на основе техники эквивалентных подстановок. Правила поведения системы задаются в данной публикации в форме дизьюнкторов с переменной времени t , устанавливающей номер шага, выполняемого алгоритмом. Однако рассматриваются только смежные моменты времени, что, разумеется, ограничивает общность подхода. Целью этой статьи является обобщение подхода, изложенного в работе [1] на случай не обязательно смежных моментов времени. Такие случаи имеют место при решении задач составления расписаний, например. Для описания подобных моделей задач мы вводим понятие дизьюнктора разностного типа.

Дизьюнктором разностного типа (разностным дизьюнктором) назовем формулу вида

$$x_1^{\alpha_1}(t+k_1) \vee x_2^{\alpha_2}(t+k_2) \vee \dots \vee x_m^{\alpha_m}(t+k_m), \quad (1)$$

где k_1, k_2, \dots, k_m – целые положительные числа из конечного диапазона;

$$x_i^{\alpha_i} = x_i \quad \text{при } \alpha_i = 1;$$

$$x_i^{\alpha_i} = \bar{x}_i \quad \text{при } \alpha_i = 0;$$

t – временной параметр (номер шага).

В качестве иллюстрации возьмем систему

$$\begin{aligned} &\bar{x}_1(t) \vee \bar{x}_2(t+1); \\ &x_2(t) \vee x_3(t); \\ &x_2(t+1) \vee \bar{x}_3(t+2); \\ &x_1(t) \vee \bar{x}_1(t+1) \vee x_3(t+2). \end{aligned} \quad (2)$$

Интерпретируем $x_i(t')$ как переменные состояния системы в момент (на шаге) t' . Таким образом, поведение (траектория) системы определяется последовательностями переходов вида

$$x(0) \rightarrow x(1) \rightarrow \dots \rightarrow x(k);$$

$$x(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)). \quad (3)$$

Очевидно, значения $x_1(\cdot), x_2(\cdot), x_3(\cdot)$ должны удовлетворять (2), если рассматривать переходы, описываемые этой системой формул. Поведение системы может допускать множество различных траекторий (3). Нас интересует общее решение системы типа (2), позволяющее найти любую допустимую траекторию.

Пример. Рассмотрим задачу составления плана работ. Имеется четыре работы A_1, A_2, A_3, A_4 . Работа A_1 должна выполняться ранее работы A_2 . Работа A_4 должна выполняться ранее работы A_3 . Если работа A_1 выполняется второй, то работа A_4 не может выполняться первой. Найти план выполнения работ, удовлетворяющий указанным условиям. Составим разностную систему:

$$\begin{aligned} &A_2(t+1) \rightarrow A_1(t); \\ &A_2(t+2) \rightarrow A_1(t) \vee A_1(t+1); \\ &A_4(t+1) \rightarrow A_3(t); \\ &A_4(t+2) \rightarrow A_3(t) \vee A_3(t+1); \\ &A_3(t) \rightarrow A_2(t+2); \\ &A_1(t+1) \rightarrow A_4(t); \\ &A_1(t) \vee A_2(t) \vee A_3(t) \vee A_4(t); \\ &\bar{A}_1(t) \vee \bar{A}_2(t); \\ &\bar{A}_1(t) \vee \bar{A}_3(t); \\ &\bar{A}_1(t) \vee \bar{A}_4(t); \\ &\bar{A}_2(t) \vee \bar{A}_3(t); \\ &\bar{A}_2(t) \vee \bar{A}_4(t); \\ &\bar{A}_3(t) \vee \bar{A}_4(t). \end{aligned} \quad (4)$$

Задачи теории расписаний являются удобным вариантом интерпретации и обоснования систем разностных дизъюнктов. Подобные задачи имеют различные применения на практике, например, при планировании вычислительных процессов, управлении конвейерными операциями, процессами в системах коммутации и др.

Внимание к таким задачам было связано также с синтезом поведения в интеллектуальных системах [2, 3].

Определения и преобразования. Систему разностных дизъюнктов назовем определенной, если каждый дизъюнкт «действует» по всей траектории (3).

В определенной системе каждый дизъюнкт связывает значения каких-то переменных в текущий момент со значениями переменных в будущие моменты и (или) в текущем моменте. Если будущий момент не достигим, то это значит, что траектория (3) оборвалась на шаге z , для которого разностная система в момент $z + 1$ несовместна.

Рассмотрим дизъюнкт $x_2(t) \vee x_3(t)$. Очевидно, должны выполняться дизъюнкты:

$$x_2(t+1) \vee x_3(t+1);$$

$$x_2(t+2) \vee x_3(t+2).$$

В действительности в определенной системе такт $z = 2$ достигим, поэтому истинны $x_2(1) \vee x_3(1)$ и $x_2(2) \vee x_3(2)$. Говорим в этом случае, что дизъюнкт $x_2(t) \vee x_3(t)$ порождает ассоциированные дизъюнкты $x_2(t+1) \vee x_3(t+1)$ и $x_2(t+2) \vee x_3(t+2)$.

В то же время дизъюнкт

$$x_1(t) \vee \bar{x}_1(t+1) \vee x_3(t+2)$$

не имеет ассоциированных дизъюнктов. Из сказанного ясно, что дизъюнкт

$$x_2(t+1) \vee \bar{x}_3(t+2)$$

в определенной системе порождает ассоциированный дизъюнкт $x_2(t) \vee \bar{x}_3(t+1)$.

Система разностных дизъюнктов называется приведенной, если, во-первых, она определена (для всех тактов $t = 0, 1, 2, \dots, k$) и, во-вторых, для каждого дизъюнкта в системе содержатся ассоциированные порожденные дизъюнкты (если ассоциированные дизъюнкты могут быть порождены).

Далее имеем дело только с приведенными разностными системами. Систему (2) расширим до приведенной системы следующего вида:

$$\bar{x}_1(t) \vee \bar{x}_2(t+1);$$

$$\bar{x}_1(t+1) \vee \bar{x}_2(t+2);$$

$$x_2(t) \vee x_3(t);$$

$$x_2(t+1) \vee x_3(t+1);$$

$$x_2(t+2) \vee x_3(t+2);$$

$$x_2(t+1) \vee \bar{x}_3(t+2),$$

$$x_2(t) \vee \bar{x}_3(t+1);$$

$$x_1(t) \vee \bar{x}_1(t+1) \vee x_3(t+2). \quad (5)$$

Отыскание общих подстановок. Используем общую технику, изложенную в [1–3]. Сначала избавимся от всех литералов вида $x_i^{ai}(t+k)$, где $k > 1$. Так, избавимся от литерала $x_3(t+2)$ ($\bar{x}_3(t+2)$). С этой целью найдем все возможные нетавтологические резольвенты дизъюнктов (5) с отсекаемой парой литералов $x_3(t+2)$ ($\bar{x}_3(t+2)$). Присоединим порожденные резольвенты к системе, а сами родительские дизъюнкты, участвовавшие в порождении резольвент, исключим. Дизъюнкты, не участвовавшие в порождении резольвент, переносятся в новую систему автоматически. Получим такую систему:

$$\bar{x}_1(t) \vee \bar{x}_2(t+1);$$

$$\bar{x}_1(t+1) \vee \bar{x}_2(t+2);$$

$$x_2(t) \vee x_3(t);$$

$$x_2(t+1) \vee x_3(t+1);$$

$$x_2(t+1) \vee x_2(t+2);$$

$$x_2(t) \vee \bar{x}_3(t+1);$$

$$x_1(t) \vee \bar{x}_1(t+1) \vee x_2(t+1). \quad (6)$$

Теперь избавимся от литерала $x_2(t+2)$ ($\bar{x}_2(t+2)$). Получим новую систему разностных дизъюнктов:

$$\bar{x}_1(t) \vee \bar{x}_2(t+1);$$

$$x_2(t) \vee x_3(t);$$

$$x_2(t+1) \vee x_3(t+1);$$

$$\bar{x}_1(t+1) \vee x_2(t+1);$$

$$x_2(t) \vee \bar{x}_3(t+1). \quad (7)$$

Проведенная операция отсечения литералов обладает следующим свойством: любое решение системы (7) может быть расширено до решения системы (5), а любое решение системы (5) содержит решение системы (7) (разумеется, если система (5) выполнима).

Теперь воспользуемся методом эквивалентных подстановок [3]. Выразим переменную

$$x_2(t+1) = \bar{x}_1(t) \cdot \varepsilon_1(t), \quad (8)$$

где $\varepsilon_1(t)$ – дополнительная переменная. Подстановка (8) и подобные ей, получаемые далее, находится так. Если выражаем литерал $x_m(t+1)$ без отрицания, то ищем все дизъюнкты F_1, F_2, \dots, F_r , где данный литерал входит с отрицанием, и записываем подстановку в общем виде таким образом:

$$x_m(t+1) = f_1 \cdot f_2 \cdot \dots \cdot f_r \cdot \varepsilon_m(t),$$

где $\varepsilon_m(t)$ – новая переменная; f_r – часть дизъюнкта F_r , получаемая отбрасыванием из F_r литерала $\bar{x}_m(t+1)$. Аналогично можно получить подстановку для $\bar{x}_m(t+1)$, при этом надо использовать дизъюнкты, содержащие литерал $x_m(t+1)$ без отрицания.

Подставим (8) в (7) и получим

$$\begin{aligned} &x_2(t) \vee x_3(t); \\ &\bar{x}_1(t) \vee \bar{x}_1(t+1); \\ &\varepsilon_1(t) \vee \bar{x}_1(t+1); \\ &\bar{x}_1(t) \vee x_3(t+1); \\ &\varepsilon_1(t) \vee x_3(t+1); \\ &x_2(t) \vee \bar{x}_3(t+1). \end{aligned} \quad (9)$$

Запишем очередную подстановку:

$$x_3(t+1) = x_2(t) \cdot \varepsilon_2(t). \quad (10)$$

Система (9) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} &x_2(t) \vee x_3(t); \\ &\bar{x}_1(t) \vee \bar{x}_1(t+1); \\ &\varepsilon_1(t) \vee \bar{x}_1(t+1); \\ &\bar{x}_1(t) \vee x_2(t); \\ &\bar{x}_1(t) \vee \varepsilon_2(t); \\ &\varepsilon_1(t) \vee x_2(t); \\ &\varepsilon_1(t) \vee \varepsilon_2(t). \end{aligned} \quad (11)$$

Получаем последнюю подстановку:

$$x_1(t+1) = \bar{x}_1(t) \cdot \varepsilon_1(t) \cdot \varepsilon_2(t). \quad (12)$$

Система (11) принимает следующий итоговый вид:

$$\begin{aligned} &x_2(t) \vee x_3(t); \\ &\bar{x}_1(t) \vee x_2(t); \\ &\bar{x}_1(t) \vee \varepsilon_2(t); \\ &\varepsilon_1(t) \vee x_2(t); \\ &\varepsilon_1(t) \vee \varepsilon_2(t). \end{aligned} \quad (13)$$

Итак, цель достигнута: система (13) вместе с подстановками (8), (10), (12) определяет все

допустимые траектории исходной системы (5). В качестве иллюстрации построим какую-нибудь траекторию. Зададим начальное состояние, удовлетворяющее (13), например:

$$x_1(0) = x_2(0) = x_3(0) = \varepsilon_1(0) = \varepsilon_2(0) = 1.$$

Тогда подстановки (8), (10), (12) дают

$$x_1(1) = 0, \quad x_2(1) = 0, \quad x_3(1) = 1.$$

Подставим эти значения в (13), получим

$$\begin{aligned} &\varepsilon_1(1); \\ &\varepsilon_1(1) \vee \varepsilon_2(1). \end{aligned} \quad (14)$$

Положим, например, $\varepsilon_1(1) = \varepsilon_2(1) = 1$. Теперь найдем

$$x_1(2) = 1, \quad x_2(2) = 1, \quad x_3(2) = 0. \quad (15)$$

Эти значения дадут, например,

$$\varepsilon_1(2) = \varepsilon_2(2) = 1;$$

$$x_1(3) = 0, \quad x_2(3) = 0, \quad x_3(3) = 1.$$

Получим траекторию вида

$$(1, 1, 1) \rightarrow (0, 0, 1) \rightarrow (1, 1, 0) \rightarrow (0, 0, 1).$$

Решение примера о расписании. Опустив все промежуточные выкладки, приводим итоговую систему подстановок для примера о расписании. Заметим, что если переменная $A_i(t) = 0$, то на такте t работа A_i не выполняется. При составлении дизъюнктов ограничиваемся первыми тремя тактами, поскольку последний шаг однозначно определяется из предыдущих:

$$\begin{aligned} A_2(t+1) &\equiv A_1(t) \cdot \bar{A}_1(t+1) \cdot \bar{A}_3(t+1) \cdot \bar{A}_4(t+1); \\ A_3(t+1) &\equiv A_4(t) \cdot \bar{A}_4(t+1) \cdot \bar{A}_1(t+1); \\ A_1(t+1) &\equiv A_4(t) \cdot \bar{A}_4(t+1); \\ A_4(t+1) &\equiv (A_1(t) \vee \bar{A}_4(t)) \cdot (\bar{A}_1(t) \vee A_4(t)). \end{aligned} \quad (16)$$

Заметим, что подстановки (16) не используют вспомогательных переменных, поскольку нас интересует любое (одно) допустимое решение. Задавая состояние

$$A_1(0) = A_2(0) = A_3(0) = 0, \quad A_4(0) = 1,$$

удовлетворяющим начальным условиям, получим интересующее нас решение в форме переходов на множестве состояний системы

$$(0, 0, 0, 1) \rightarrow (1, 0, 0, 0) \rightarrow (0, 1, 0, 0) \rightarrow (0, 0, 1, 0).$$

Заключение. Условие, связанное с приведением системы к определенному виду, не является обязательным. Процесс синтеза может быть адаптирован к ситуации в общем случае. При этом необходимо составлять систему дизъюнктов, «актуальных» на рассматриваемом шаге. В этом случае необходимо учитывать новые переменные $\varepsilon(t)$, вводимые в подстановках. Получаемые решения интегрируются в последующие шаги, так что ни одно решение потеряно быть не может.

Литература

1. Герман О. В., Садовская О. И. Метод синтеза поведения интеллектуальной системы // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.- мат. науки и информатика. С. 139–142.
2. Герман О. В., Семерюк Д. В. Одна полиномиально разрешимая задача синтеза поведения интеллектуального робота // Автоматика и телемеханика. 2001. № 2. С. 15–24.
3. Бохманн Д., Постхоф Х. Двоичные динамические системы. М.: Энергоатомиздат, 1966. 396 с.

Поступила 04.03.2014

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ

УДК 004.786:519.711.3

А. С. Кобайло, кандидат технических наук, доцент (БГТУ)

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ СИНТЕЗА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ПРИМЕРЕ РАДИОСИГНАЛОВ

Рассмотрены возможности использования элементов теории синтеза вычислительных систем реального времени (ТСВСРВ) для моделирования физических процессов. Применение положений теории показано на примере синтеза специализированного вычислительного устройства для формирования радиосигналов в составе автоматизированной системы полунатурных испытаний радиотехнических средств или тренажеров радиооператоров. При этом использована математическая модель радиосигналов, приведенная к виду, допускающему графовое представление.

The possibilities of using the elements of the theory of synthesis of computing systems real-time for modeling physical processes. Application of the theory illustrated by the synthesis of a specialized computing device for generating radio signals in the automated system of HIL testing radio equipment or simulators radio operators. The author used a mathematical model of the radio, reduced to mean admitting graph representation.

Введение. Проблемы обучения, научного эксперимента, обеспечения требуемых эксплуатационных показателей вновь создаваемого оборудования различного назначения неразрывно связаны с задачей моделирования физических процессов. При этом эффективность исследований или обучения, как правило, достигается моделированием физической среды эксплуатации оборудования или деятельности обучаемого специалиста в реальном масштабе времени. Решение проблемы формирования условий, адекватных реальным, становится возможным с использованием специализированных вычислительных средств – автоматизированных систем полунатурных испытаний, позволяющих в лабораторных условиях создавать (моделировать) воздействия на объект исследований, адекватные реальным условиям эксплуатации исследуемого оборудования. Неотъемлемыми компонентами таких систем являются специализированные аппаратные средства для формирования различных воздействий на объект исследований. Опыт разработки таких систем и участия в их создании позволил выработать некоторые единые подходы к решению проблемы, нашедшие отражение в основных положениях теории синтеза вычислительных систем реального времени (ТСВСРВ) [1]. Рассмотрим возможности использования элементов ТСВСРВ для моделирования физических процессов на примере разработки специализированных вычислительных устройств (СВУ) для формирования радиосигналов (в частности, отраженных сигналов).

Основная часть. Исходными данными для синтеза вычислительной системы реального времени являются: аналитическое выражение модели вычислительного процесса или алгоритм его реализации; требования реального времени; характеристики функциональных устройств (ФУ), способных в совокупности реализовать все операции алгоритма в соответствии с моделью, заданные в виде $\{\tau_i^j\}, \{\xi_m\}$, где τ_i^j – время выполнения j -м ФУ операции, соответствующей i -й вершине графа реализации; ξ_{ib} – p -й технический параметр j -го ФУ (стоимость, мощность и т. д.); критерии оптимальности $\xi_b \rightarrow \min, \xi_c \rightarrow \max, b, c \in \{p\}$. Теория синтеза ВСРВ подразумевает выполнение последовательности процедур, основанных на выделении временной иерархии для вершин графа алгоритма и на условии реализуемости путей алгоритма в реальном времени (подробно см. в работе [1]). В качестве исходной математической модели будем использовать базовую модель вычислительного процесса формирования «полезной» составляющей радиотехнических сигналов по совокупности объектов и периодов обращения к ним с учетом динамики обстановки. Данная модель получена из известного аналитического выражения математической модели для пачки импульсов одиночного объекта путем суммирования по совокупности объектов и периодов обращения и введения единичных функций временных преобразований процессов на базе функций Хевисайда [2]:

$$\begin{aligned}
y_i(t - \tau_3, \alpha, \beta) = & \\
= E_0 \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^{N_m} \sum_{k=1}^{K_p^{(m,n,k)}} \sum_{j=1}^{S_k^{(m,n,k)}} & F_{\text{дн}}(\Delta\alpha^{(m,n,k)}, \Delta\beta^{(m,n,k)}) F'_{\text{дн}}(\Delta\alpha'^{(m,n,k)}, \Delta\beta'^{(m,n,k)}) \times \\
\times Z_{\phi(j)}^{(m,n,k)}(t) K_{E(j)}^{(m,n,k)} F_{\text{зр}} \left[U^{(m,n,k)}(t), \chi_3(\tau_{3(i,j)}^{(m,n,k)}, \tau_{3(j)}'^{(m,n,k)}), K_{d(j)}^{(m,n,k)} \right] \times & \\
\times F_{\text{зр}} \left\{ \left[\chi_p(t_{\text{и}}^{(m,n)}, \Delta T^{(m,n)}) \chi_p(t_{\text{и}}^{(m,n,k)}, \tau_{\text{и}}^{(m,n,k)}) \right] \chi_3(\tau_{3(i,j)}^{(m,n,k)}, \tau_{3(j)}'^{(m,n,k)}), K_{d(j)}^{(m,n,k)} \right\} \times & \\
\times F_3 \left\{ F_{\cos} \left[(\omega_0^{(m,n,k)} + \Delta\omega_{(j)}^{(m,n,k)}), \Psi_{(j)}^{(m,n,k)} + \Phi_{p(j)}^{(m,n,k)}(t) \right], \chi_3(\tau_{3(i,j)}^{(m,n,k)}, \tau_{3(j)}'^{(m,n,k)}) \right\}, &
\end{aligned}$$

где $y_i(\cdot)$ – сигнал, принятый i -м каналом фазированной антенной решетки; t – текущее время; τ_3 – задержка принятого сигнала; α, β – угловые координаты (азимут и угол места) объекта; $E_0 = \sqrt{E_x}, E_x$ – мощность зондирующего сигнала в направлении максимального излучения; M – количество циклов обращения к объектам; N_m – количество пачек m -го цикла; $K_p^{(m,n,k)}$ – количество импульсов в n -й пачке m -го цикла; $J^{(m,n,k)}$ – количество объектов на k -м направлении в n -й пачке m -го цикла; $F_{\text{дн}}(\cdot)$ – нормированная функция диаграммы направленности передающей антенны; $\Delta\alpha^{(m,n,k)}, \Delta\beta^{(m,n,k)}$ – функции изменения разности между угловыми координатами объектов и направлением максимального излучения диаграммы направленности (ДН) передающей антенны; $F'_{\text{дн}(i)}(\cdot)$ – функция ДН антенны i -го приемного канала; $\Delta\alpha'^{(m,n,k)}, \Delta\beta'^{(m,n,k)}$ – законы изменения разностей между угловыми координатами объектов и направлением максимума ДН i -го канала приемной антенны; $Z_{\phi(j)}^{(m,n,k)}$ – закон флуктуации j -го объекта на k -м направлении в n -й пачке m -го цикла; $K_{E(j)}^{(m,n,k)} = \sqrt{E_j^{(m,n,k)} / E_x}$ – коэффициент затухания k -го импульса n -й пачки m -го цикла j -го объекта; $U^{(m,n,k)}(t)$ – функция свертки k -го импульса n -й пачки m -го цикла; $\tau_{3(i,j)}^{(m,n,k)}$ – детерминированная составляющая длительности задержки импульса j -го объекта на входе i -го приемного канала относительно k -го выходного импульса системы n -й пачки m -го цикла; $\tau_{3(i,j)}'^{(m,n,k)}$ – случайная составляющая задержки k -го импульса n -й пачки m -го цикла j -го объекта; $K_{d(j)}^{(m,n,k)}$ – коэффициент радиальной протяженности j -го объекта на k -м направлении n -й пачки m -го цикла; $t_{\text{и}}^{(m,n)}, \Delta T^{(m,n)}$ – момент начала формирования и длительности соответственно n -ой пачки m -го цикла; $t_{\text{и}}^{(m,n,k)}, \tau_{\text{и}}^{(m,n,k)}$ –

момент начала формирования и длительность соответственно k -го импульса n -ой пачки m -го цикла; $\omega_0^{(m,n,k)}$ – несущая частота k -го импульса n -й пачки m -го цикла; $\Psi_{(i,j)}^{(m,n,k)}$ – фаза принятого i -м каналом сигнала j -го объекта для k -го импульса n -й пачки m -го цикла; $\Phi_{p(i)}^{(m,n,k)}(t)$ – результирующий закон модуляции фазы принятого сигнала с индексами m, n, k, j ; $F_{\text{зр}}(\cdot), F_3(\cdot), F_{\cos}(\cdot), \chi_3(\cdot), \chi_p(\cdot)$ – специальные функции.

Используя метод синтеза математических моделей с требуемыми свойствами [3], преобразуем данную модель, представив ее в виде двух квадратурных составляющих. Преобразования исходного графа алгоритма реализации полученной модели в соответствии с методикой синтеза ВСРВ [1] позволяют получить следующие результаты.

1. Граф вычислительной структуры (ГВС), приведенный на рисунке.

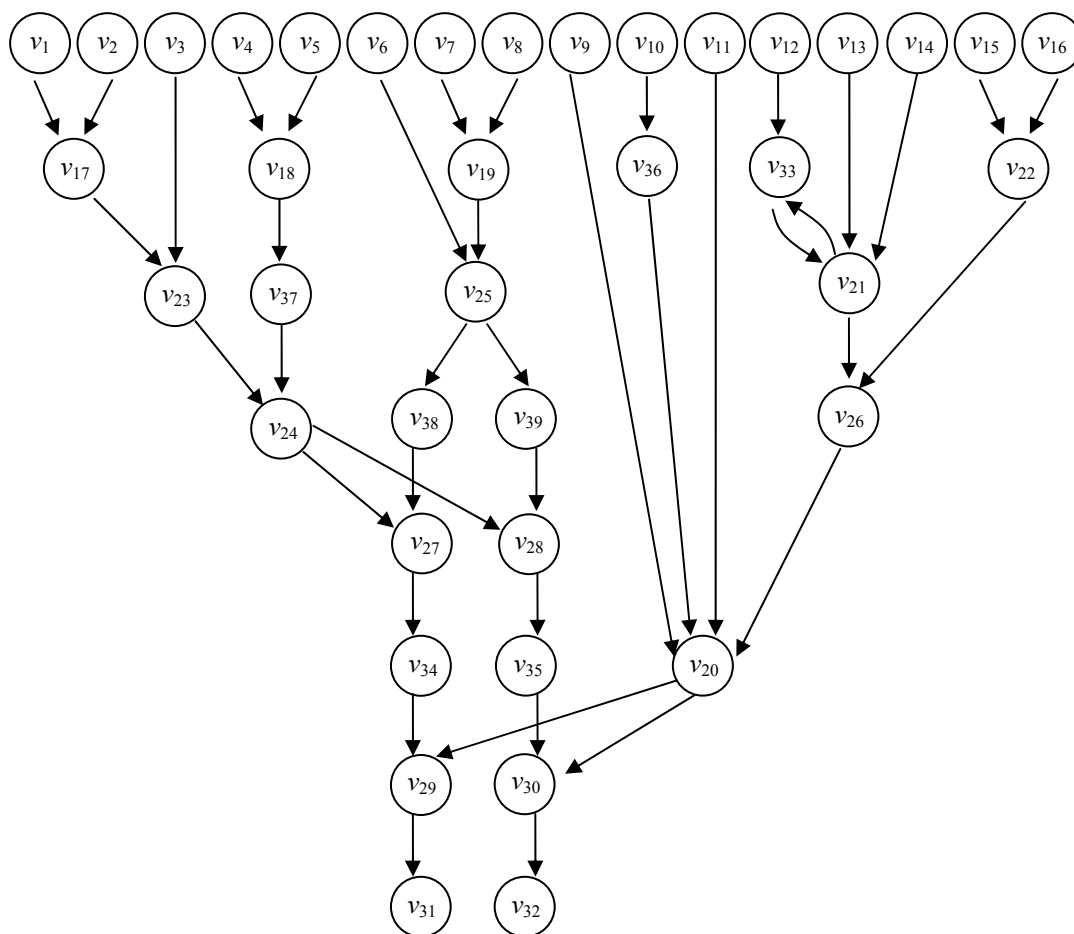
2. Вектор спецификации вершин ГВС:

$\Phi = (\text{Вв. } E_0, \text{ Ген. } Z_{\phi}, \text{ Вв. } K_E, \text{ Вв. } \Delta\alpha, \text{ Вв. } \Delta\beta, \text{ Вв. } \omega, \text{ Вв. } \Delta\omega, \text{ Вв. } \Psi, \text{ Вв. } \tau_3, \text{ Вв. } \tau'_3, \text{ Вв. } K_d, \text{ Вв. } t'_{\text{и}}, \text{ Вв. } \Delta T', \text{ Вв. } \Delta T, \text{ Вв. } t_{\text{и}}, \text{ Вв. } \tau_{\text{и}}, *, F_{\text{дн}}, +, \chi_3, t^*, \chi_3, *, \chi_p, *, F_{\cos}, *, F_{\sin}, *, F_{\text{зр}}, *, *, *, \text{ Выв. } y_1, \text{ Выв. } y_2)$.
Здесь Вв. – ввод, Ген. – генерация, Выв. – вывод, * – умножение.

3. Вектор назначения, i -й элемент которого указывает на функциональное устройство из заданного набора, назначенное i -й вершиной ГВС.

Формируется также информация, необходимая для управления операционной частью СВУ [1].

Синтезированное СВУ отличается следующими показателями: широкие функциональные возможности, обуславливающие многообразие областей применения; высокая точность моделирования временных характеристик процесса, определяемая быстродействием элементной базы, на которой реализованы ФУ для временных преобразований; высокая степень адекватности моделируемых сигналов реальным благодаря использованию математической модели со свойствами, наиболее полно характеризующими реальные радиосигналы; управление в реальном масштабе времени статическими и динамическими характеристиками путем прямого цифрового управления ФУ.



Граф вычислительной структуры СВУ для моделирования радиосигналов

Заключение. Использование специализированных вычислительных средств в составе автоматизированных систем управления, контроля, испытаний, моделирования, обучения и других содействует обеспечению выполнения этими системами своих функций в реальном масштабе времени, повышает точность обработки данных и формирования воздействий на объект исследования, снижает себестоимость систем.

Литература

1. Кобайло А. С. Теория синтеза вычислительных систем реального времени. Минск: БГТУ, 2010. 256 с.

2. Кобайло А. С. Особенности представления математических моделей для автоматизации проектирования вычислительных систем реального времени // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2009. Вып. XVII. С. 111–114.

3. Кобайло А. С., Пешков А. Т., Фецкович Д. А. Булева алгебра в решении оптимизационных задач. Синтез математических моделей с требуемыми свойствами // Доклады БГУИР. Т. 9, № 7 (53). Минск, 2010. С. 76–82.

Поступила 19.03.2014

УДК 681.325.3

Д. В. Шиман, кандидат технических наук, доцент,
декан факультета информационных технологий (БГТУ); Ю. О. Булова, ассистент (БГТУ)

ПРОГРАММНОЕ СРЕДСТВО ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК КОДОВ, НАПРАВЛЕННЫХ НА ИСПРАВЛЕНИЕ ОШИБОК ТИПА «СТИРАНИЕ»

В статье описывается функциональная часть программного средства для исследования корректирующей способности LT- и разработанных авторами ранее LTM- и P-кодов для исправления ошибок типа «стирание». Программное средство рассчитывает избыточность выбранных кодов для испытания и отображает полученные результаты в графической форме. Экспериментально рассчитывается средняя избыточность для моделируемых кодов стираний.

This paper describes the functional part of a software tool for the error-correcting capability investigation of LT- and LTM- and P-codes developed by the authors previously. This codes are applied for error correction of the "erasure". Software tool calculates the redundancy for the selected code and displays the results in graphical form. Experimentally calculated average redundancy for simulated erasure codes.

Введение. Современный человек не представляет своей жизни без мобильных систем и компьютерных сетей. С каждым годом возрастают требования к скорости и надежности передаваемой информации. Такие системы передачи данных подвержены воздействию различных помех и шумов, что приводит к искажению или исчезновению части информации. Для устранения этой проблемы используются различные методы, основанные на помехоустойчивом кодировании информации. В данной статье рассматриваются кодовые методы, используемые в каналах с ошибками типа «стирание», получившими название «фонтанные коды» (Digital Fountain Codes) [1]. Главной особенностью является то, что кодами из этого класса можно закодировать сообщение конечного размера потенциально-неограниченным потоком (фонтаном) независимых пакетов [2].

Эффективность преобразования информации на основе таких кодов не может быть оценена с помощью известных специализированных программных продуктов, таких как MathCAD и MatLAB, которые позволяют реализовывать компьютерные модели только классической теории помехоустойчивого кодирования. Поэтому разработка компьютерного средства для исследования характеристик известных и предлагаемых фонтанных кодов является актуальной задачей.

Основная часть. Основными функциями программного средства, реализованного на языке C#, являются:

- 1) генерация исходного двоичного сообщения;
- 2) реализация кодирования согласно известному LT- [3] и предлагаемым LTM- и P-кодам [4];
- 3) имитация пакетной передачи сообщения с появлением заданного количества стираний;

- 4) расшифровка сообщения с помощью соответствующих декодеров;

- 5) сбор статистики и графическое отображение полученных результатов.

Ниже будут рассмотрены способы реализации данных функций.

На рис. 1 представлен внешний вид приложения.

Для задания размера исходного сообщения K используется поле «Количество исходных бит». В соответствии с введенным значением происходит генерация случайных бит с помощью метода Random. Так как предусмотрена пакетная передача данных, на форме указывается количество символов в пакете L .

Процесс кодирования у LT- и LTM-кодов различается.

1. С использованием робастного распределения вероятностей степеней $p(d)$ (1) выбирается количество исходных символов d_i (степень кодового символа), вовлеченных в операцию кодирования для генерации кодового символа x_i .

$$p(d) = \frac{\mu(d) + \tau(d)}{Z}, \quad (1)$$

где Z – нормирующий множитель вероятностного распределения; $\mu(d)$ – вероятностное распределение, при котором после каждой итерации декодирования в пакете оставался бы один кодовый символ со степенью 1 (2); $\tau(d)$ – вероятностное распределение, при котором исходный символ входит в большинство кодированных символов (3).

$$\mu(d) = \begin{cases} \frac{1}{K} & \text{при } d = 1, \\ \frac{1}{d(d-1)} & \text{при } d = 2, 3, \dots, K. \end{cases} \quad (2)$$

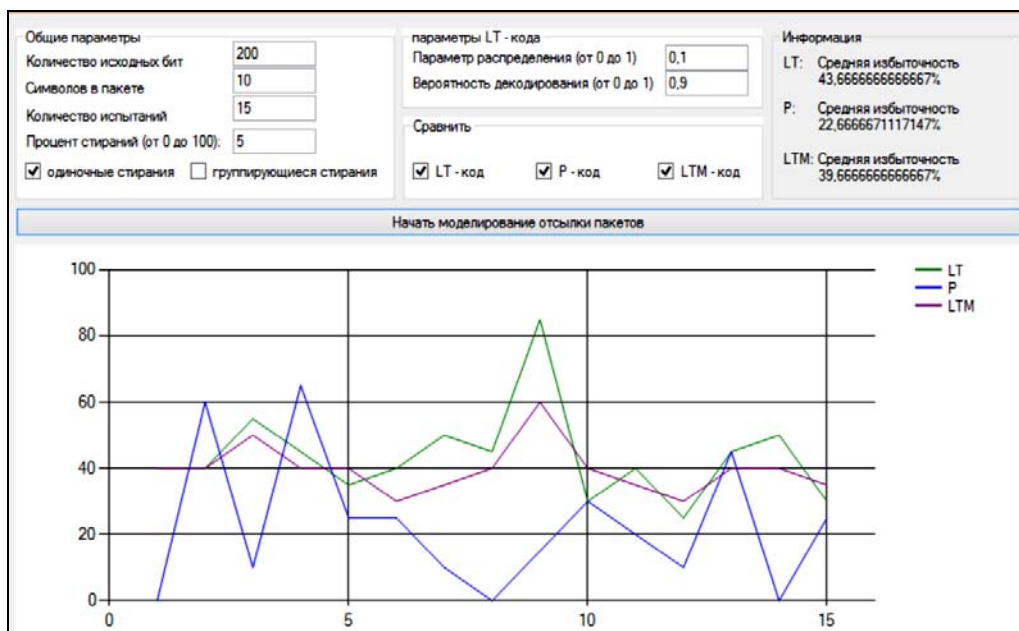


Рис. 1. Внешний вид программного средства

$$\tau(d) = \begin{cases} \frac{S}{Kd} & \text{при } d = 1, 2, \dots, \frac{K}{S}, \\ \frac{S}{K} \cdot \ln\left(\frac{S}{\delta}\right) & \text{при } d = \frac{K}{S}, \\ 0 & \text{при } d > \frac{K}{S}, \end{cases} \quad (3)$$

где $S = c \cdot \ln(K/\delta) \cdot \sqrt{K}$ – число исходных символов, хоть один раз входящих в кодовые символы степени $d = K/S$; c – параметр, величина которого $0 \leq c \leq 1$ (задается в поле «Параметр распределения»); δ – вероятность неудачного декодирования (задается в поле «Вероятность декодирования» как $1 - \delta$).

2. Из исходного сообщения случайным образом выбираются d_i исходных символов s_j .

3. Сложением бит этих исходных символов по модулю 2 (операция XOR) формируется кодовый символ x_i .

Таким образом формируется необходимое количество (соответствующее размеру пакета) кодовых символов x_i (рис. 2).

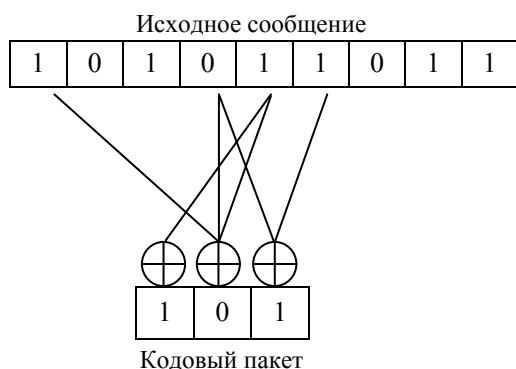


Рис. 2. Пример кодирования LT- и LTM-кодов

Процесс формирования кодовых пакетов продолжается до тех пор, пока не будет получено сообщение от приемника о достоверном приеме сообщения. Поскольку декодеру не важен порядок передачи кодовых символов и время формирования каждого пакета постоянно, кодер такого класса по запросу всегда может добавить «на лету» небольшое число кодовых пакетов [1].

Процесс кодирования P-кода состоит из нескольких этапов.

1. Пока выполняется условие $0 \leq j \leq K-1$, из сообщения последовательно выбираются по 2 исходных символа s_j с шагом $h = 2$ и суммируются по модулю 2, образуя новый кодовый символ x_j (4). Причем каждый следующий кодовый символ включает в себя исходные символы, следующие за предыдущими, вовлеченными в операцию кодирования, через 1 бит (рис. 3).

$$x_i = s_j \oplus s_{j+h}. \quad (4)$$

2. Кодирование на втором этапе происходит согласно формуле (4), однако начинается со смещения на один исходный символ.

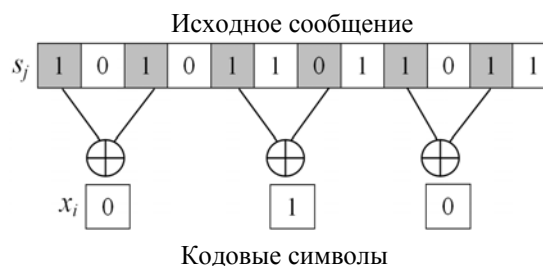


Рис. 3. Схематическое представление первого этапа кодирования P-кода

3. Третий этап кодирования (рис. 4) выполняется при $0 \leq j \leq K - 1$ и заключается в формировании кодовых символов со степенью 3 путем последовательного суммирования трех соседних символов исходного сообщения по модулю 2 (5).

$$x_i = s_j \oplus s_{j+h/2} \oplus s_{j+h}. \quad (5)$$

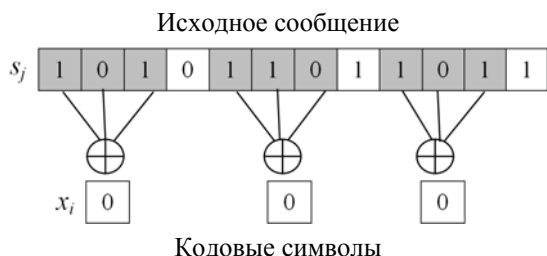


Рис. 4. Схематическое представление третьего этапа кодирования Р-кода

4. Четвертый этап кодирования аналогичен третьему, но происходит со смещением на 1 исходный символ согласно условию $1 \leq j \leq K - 1$.

Сформированные кодовые символы образуют кодовые пакеты из L бит. Для уменьшения степени группирования ошибок типа «стирание» используется W -циклический перемежитель [5]. После перемежения сообщение передается получателю, где осуществляется деперемежение и декодирование полученного сообщения.

Таким образом, формирование кодовых пакетов продолжается до тех пор, пока на принимающей стороне не будет полностью декодировано сообщение. Если сообщение не было расшифровано в течение четырех этапов – процесс кодирования возвращается к первому этапу, при этом шаг h увеличивается в 2 раза.

Результат кодирования каждого из кодов записывается в соответствующую бинарную матрицу, номер строки которой соответствует индексу кодового символа, а позиции единиц в строке – номерам исходных бит, входящих в данный кодовый символ. Пример бинарной матрицы представлен на рис. 5.

После операции кодирования разработанное программное средство имитирует передачу кодовых пакетов по каналу. При этом используются параметры, которые указаны на форме: количество стираний в процентах, а также характер распределения ошибок.

Далее происходит операция декодирования. Для Р-кода сначала необходимо произвести операцию деперемежения полученного кодового пакета.

Декодеры LT-, LTM- и Р-кодов используют такую же бинарную матрицу, как и кодер на стороне отправителя. Таким образом, декодеру известна информация о степени d_i каждого ко-

дового символа x_i и номерах исходных бит, входящих в этот символ, за исключением символов, которые были стерты при передаче сообщения.

	K								
	0	1	0	1	0	0	0	0	...
	1	0	0	0	0	1	0	1	...
	0	0	1	0	1	0	0	0	...
	0	0	0	0	0	0	1	0	...
L	0	1	1	1	0	0	0	0	...
	1	0	0	0	0	1	1	1	...
	1	0	1	1	1	0	0	0	...
	0	0	0	0	0	0	1	1	...

Рис. 5. Бинарная матрица кодирования

Процесс декодирования происходит в несколько этапов.

1. Определяется степень кодового символа d_i .
2. Если степень кодового символа $d_i = 1$ – устанавливается $s_j = x_i$, тем самым находится j -й символ (рис. 6).
3. Удаляются копии j -го символа (6):

$$x_i = x_i \oplus s_j. \quad (6)$$

Из всех списков номеров кодовых символов удаляется номер i : строка бинарной матрицы суммируется по модулю 2 с бинарной строкой, содержащей единицу в позиции i , что приводит к понижению степеней соответствующих кодовых символов (рис. 7). Если в матрице не осталось кодовых символов со степенью 1 ($d_i \neq 1$) LT-декодер отказывается от декодирования и ожидает нового пакета кодовых символов от LT-кодера. Однако LTM- и Р-декодеры способны сформировать новый кодовый символ из имеющихся, для этого используется четвертый этап декодирования.

Бинарная матрица

0	1	0	1	0	0	0	0	...
1	0	0	0	0	1	0	1	...
0	0	1	0	1	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	1	0	...
0	1	1	1	0	0	0	0	...
1	0	0	0	0	1	1	1	...
1	0	1	1	1	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	1	1	...
...

Декодированное сообщение

					0		...
--	--	--	--	--	---	--	-----

Рис. 6. Второй этап декодирования LT-, LTM- и Р-кодов

Бинарная матрица

0	1	0	1	0	0	0	0	...
1	0	0	0	0	1	0	1	...
0	0	1	0	1	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	0	0	...
0	1	1	1	0	0	0	0	...
1	0	0	0	0	1	0	1	...
1	0	1	1	1	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	0	1	...
...

Рис. 7. Третий этап декодирования LT-, LTM- и P-кодов

Строка бинарной матрицы, соответствующая анализируемому кодовому символу x_i , поочередно суммируется по модулю 2 с бинарными строками всех кодовых символов, в формировании которых участвовал первый исходный символ из x_i . Таким образом получают новые кодовые символы, и процесс декодирования переходит к этапу 1 (рис. 8).

Бинарная матрица

0	1	0	1	0	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	0	0	...
0	0	1	0	1	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	0	0	...
0	1	1	1	0	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	0	0	...
1	0	1	1	1	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	0	0	...
...

Новое кодовое слово

0	0	1	0	0	0	0	0	...
---	---	---	---	---	---	---	---	-----

Рис. 8. Процесс декодирования

Так как в описанных выше кодерах и декодерах используются случайные вероятностные распределения, сбор статистики необходимо со-

вершать на основе нескольких опытов. Число испытаний можно указать на форме в соответствующем поле. Также реализована возможность выбора кодов, по которым нужно провести сравнительный анализ.

Программное средство рассчитывает избыточность для выбранных кодов на каждом испытании и отображает полученные результаты в виде графика (рис. 1). После всех опытов подсчитывается средняя избыточность, что позволяет оценить эффективность описанных выше кодов.

Заключение. Разработанное программное средство позволяет оценить эффективность преобразования информации на основе фонтанных кодов. В нем реализован алгоритм генерации бинарной последовательности, кодирование (декодирование) согласно известному LT- и предлагаемому LTM- и P-кодам, имитация пакетной передачи сообщения с появлением заданного количества стираний, сбор статистики и графическое отображение полученных результатов.

Литература

1. Варгаузин В. Помехоустойчивое кодирование в пакетных сетях // ТелеМультиМедиа. 2005. № 3. С. 10–16.
2. Булова Ю. О. Кодовые методы нейтрализации ошибок типа «стирание» в каналах передачи двоичной информации // Труды БГТУ. 2012. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 142–145.
3. Luby M. LT codes // Proc. 43rd Ann. IEEE Symp. on Foundations of Computer Science, Vancouver, November 16–19, 2002. С. 271–282.
4. Булова Ю. О. Анализ исправления ошибок типа «стирание» П-кодом в каналах передачи данных // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 123–126.
5. Gorbunova Yu., Urbanovich P. W-cyclic method interleaving of data for communication system // NEET'2011: proc. VII International Conference, Zakopane, Poland, June 28 – July 1, 2011. P. 149.

Поступила 19.03.2014

УДК 681.391

В. А. Пласковицкий, аспирант (БГТУ);**П. П. Урбанович**, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой (БГТУ)**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АБСТРАКТНЫХ СИНТАКСИЧЕСКИХ ДЕРЕВЬЕВ
ДЛЯ ОБФУСКАЦИИ КОДА**

Рассмотрено практическое использование абстрактных синтаксических деревьев для обфускации программного кода на примере языка Python. Проанализированы возможности изменения строк, чисел, функций, имен объектов, операторов. Проведен анализ механизма обработки кода с замером скорости выполнения преобразования в зависимости от типа обрабатываемых конструкций. Исследован этап обратной сборки программы на основе полученного дерева. Рассмотрена интеграция полученного обработчика с авторскими алгоритмами обфускации кода.

This paper considers the practical application of abstract syntax trees to obfuscate the example code in Python. The possibility of changing strings, numbers, functions, names of objects, operators are studied. The analysis of the mechanism for handling code execution speed measurements are made, depending on the type of processed structures. Studied reassembly step program based on the resulting tree. Considered integration with the author obtained handler code obfuscation algorithms.

Введение. Из-за хранения кода программных продуктов в сравнительно удобочитаемом виде несанкционированное применение их значительно упрощается. При этом зачастую обфускация является единственным механизмом защиты, поскольку сохраняет работоспособность программы без необходимости применения дополнительных узлов выполнения, но при этом делает чтение кода более трудоемким.

Однако помимо сложности создания алгоритмов обфускации и их оценки, возникает нетривиальная задача и при получении самих данных, которыми эти алгоритмы будут манипулировать. Синтаксис современных программных языков значительно расширился (лямбда выражения, списковые включения, декораторы, стрелочные функции и многое другое), а архитектура составляемых приложений стала сложнее (`mvс`, `mvvm`, `mvр` и др.). Синтаксис языков программирования часто неоднозначен по своей природе. Для того чтобы избежать этой неоднозначности он часто задается в виде контекстно-свободной грамматики (CFG) [1]. Тем не менее есть аспекты языков программирования, которые не могут быть выражены через CFG, но являются частью языка и задокументированы в его спецификации. В этом случае необходим контекст, чтобы определить их обоснованность и поведение. Например, CFG не может предсказать ни имена новых типов, объявленных в программе, ни то, каким образом они должны быть использованы. Даже если в языке есть predetermined набор типов, для обеспечения надлежащего использования, как правило, требуется некоторый контекст. Другим примером является «утиная» типизация, где тип элемента может меняться в зависимости от контекста. Перегрузка операторов – еще один случай, когда правильное использование и

окончательная функция определяются в зависимости от контекста. Например, оператор «+» является и численным сложением, и конкатенацией строк.

Все это делает неприемлемым непосредственную работу с текстовым представлением кода. В данной статье рассмотрен способ обфускации кода, представленного в виде абстрактного синтаксического дерева, а также способы его преобразования к такому виду и обратно.

Основная часть. В абстрактных синтаксических деревьях (АСД) в качестве внутренних вершин выступают операторы языка программирования, а в качестве листьев – передаваемые в них операнды. При этом в отличие от дерева разбора в АСД не входят элементы, которые не влияют на семантику программы, например скобки, точки с запятой и т. п., поскольку информация о разделении несет сама организация узлов в дереве.

Например, для описания выражения $x = 3 \times (y - z)$ можно построить АСД, представленное на рис. 1.

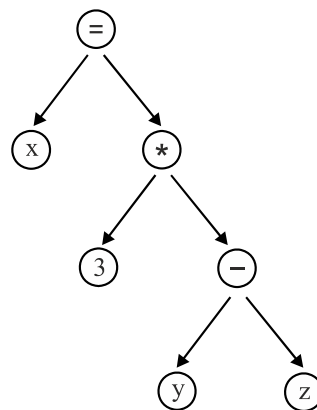


Рис. 1. Пример АСД

Это весьма упрощенное представление, поскольку описывает математическое выражение. В случае работы с программным кодом, необходимо учитывать еще множество других параметров: типы переменных, условия перехода и т. д. Например, даже для описания весьма простой php-конструкции:

```
<?php
    $x = 5;
    if($x == 5){
        echo "yes";
    }
    else{
        echo "no";
    }
?>
```

строится довольно громоздкое АСД (рис. 2) [2].

Графическое представление АСД упрощает его восприятие для человека, но не подходит для использования при программной обработке кода, поэтому для этой цели эффек-

тивнее работать с ним, как с ассоциативным массивом.

Пример:

```
var x = "ISiT";
console.log(x);
function test(){
    x = "BSTU";
    var y = 2
}
```

Преобразуется к виду [3]:

```
[VarDecls(
  [VarDeclInit("x", String("ISiT"))],
  Call(PropAccess(Var("console"), "log"),
  [Var("x")]),]
Function("test",
  [],
  [Assign(Var("x"),
  String("BSTU")),
  VarDecls([VarDeclInit
  ("y", Num("2"))])])])]
```

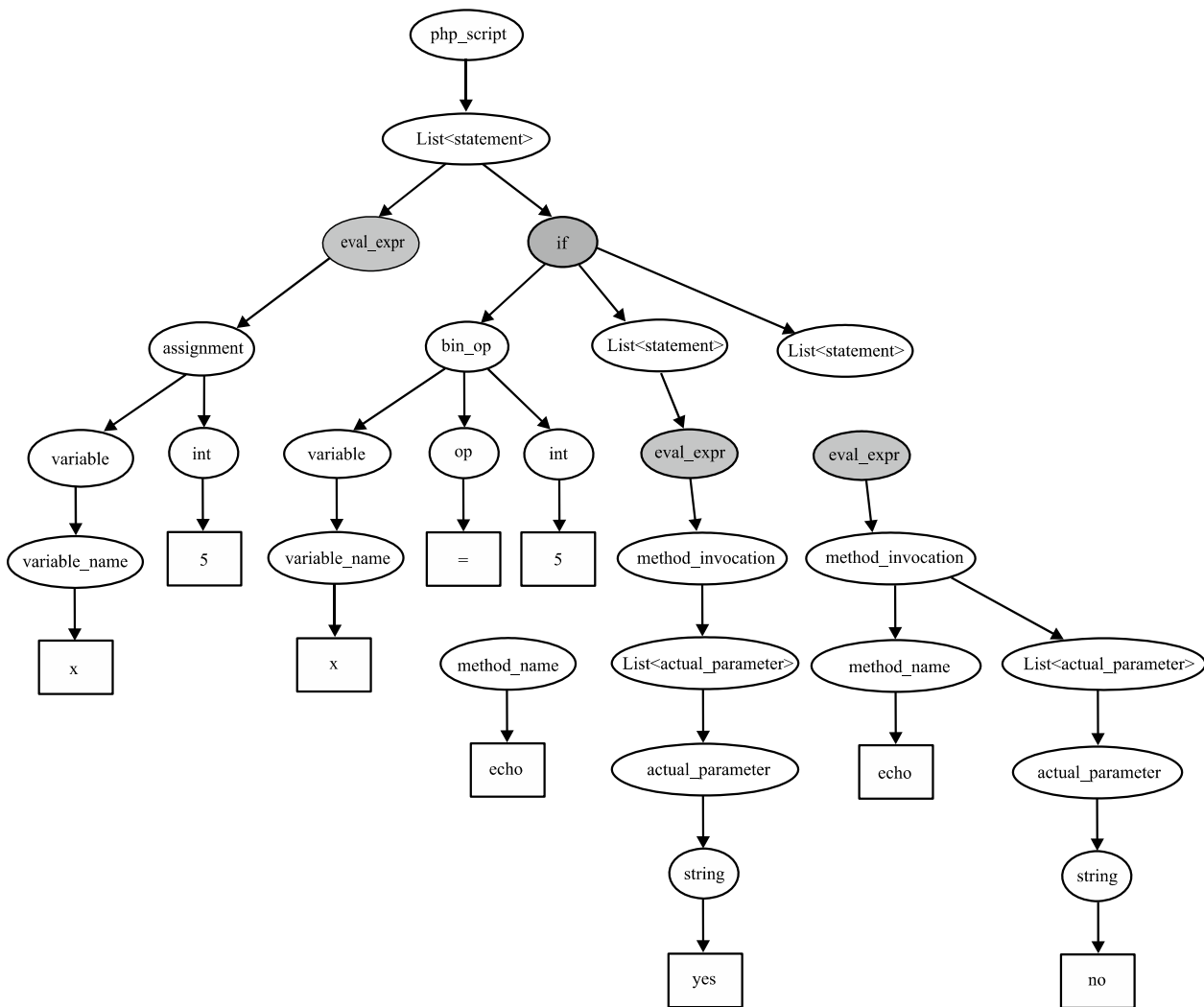


Рис. 2. АСД для php-конструкции

Однако при этом возникает необходимость разрабатывать алгоритм обхода такой структуры. Поэтому более простое решение заключается в использовании паттерна Visitor (рис. 3), позволяющего разработать отдельные методы обработки для нужных сущностей.

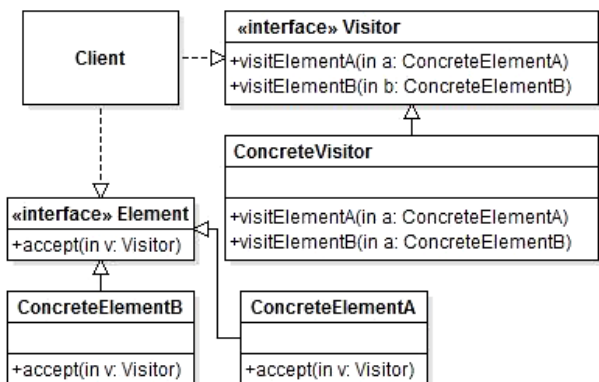


Рис. 3. Схема паттерна Visitor

Рассмотрим реализацию АСД в Python. Благодаря системному модулю ast [3] нет необходимости подключать стороннюю реализацию. Достаточно создать класс, наследуемый от класса NodeTransformer и реализовать в нем соответствующие методы.

Например, для обработки чисел в коде, можно реализовать обфускатор следующего вида:

```

from ast import NodeTransformer, BinOp, Num, Add
class Obfuscator(NodeTransformer):
    def __init__(self):
        ast.NodeTransformer.__init__(self)
    def visit_Num(self, node):
        value = node.n
        value_left = value_right = value / 2
        if value % 2:
            value_right += 1
        return BinOp(left=BinOp(Num(value_left)),
            op=Add(), right=Num(value_right))
  
```

Результат обработки:

```

1 = 0 + 1;
2 = 1 + 1;
5 = 2 + 3;
10 = 5 + 5.
  
```

Более сложным является обработка таких сущностей, как функции. В этом случае реализация может выглядеть так:

```

def visit_FunctionDef(self, node):
    node.name =
self.obfuscate_function_name(node.name)
    node.body = [self.visit(x) for x in
node.body]
    return node
  
```

Здесь obfuscate_function_name – метод, инкапсулирующий какой-то набор действий по обработке строки, учитывающий ограничения, налагаемые на имя функции.

Обработка условного оператора может быть реализована так:

```

def visit_If(self, node):
    node.test = BoolOp(op=And(),
        values=[node.test,
            Compare(left=Num(1),
                ops=[Gt()],
                comparators=[Num(0)])])
    node.test = self.visit(node.test)
    return node
  
```

Для примера обработки строк были использованы две операции – расщепление строки на две составляющие и реверс строки [4] с последующим считыванием в обратном порядке:

```

def visit_Str(self, node):
    def rev(x):
        return Subscript(value=Str(s=x[::-1]),
            slice=Slice(lower=None,
                upper=None,
                step=Num(n=-1)),
            ctx=Load())
    return BinOp(left=rev(node.s[:len(node.s)/2]),
        op=Add(),
        right=rev(node.s[len(node.s)/2:]))
  
```

Чтобы просмотреть все уникальные типы узлов, присутствующие в коде, можно реализовать класс с обобщенным методом generic_visit:

```

class LookNodes(ast.NodeVisitor):
    ... def generic_visit(self, node):
    ...     print type(node).__name__
    ...     ast.NodeVisitor.generic_visit(self, node)
  
```

и применять его следующим образом:

```

look = LookNodes()
tree = ast.parse(str_code)
look.visit(tree)
  
```

При этом, если в коде встречаются одинаковые по типу узлы, в консоль будет выведен каждый из них. Для того чтобы выводились только уникальные значения, можно заносить их в общий список типа set:

```

def __init__(self):
    self.names = set()
def generic_visit(self, node):
    self.names.add(type(node).__name__)
  
```

Вывести все дерево можно с помощью метода ast.dump.

Для того чтобы видоизменить операцию подключения модулей, можно получить данные о их названиях, перекрыв метод visit_Import, а

затем, добавить их в условном операторе, проверяющем наличие точки выхода.

Пример обработки строк с использованием двух операций – расщепление строки на составляющие и реверс строки с последующим считыванием в обратном порядке:

```
def visit_Str(self, node):
    def rev(x):
        return Subscript(value=Str(s=x[::-1]),
                           slice=Slice(lower=None,
                                       upper=None,
                                       step=Num(n=-1)),
                           ctx=Load())
    return BinOp(left=rev(node.s[:len(node.s)/2]),
                 op=Add(),
                 right=rev(node.s[len(node.s)/2:]))
```

Аналогичным образом можно обрабатывать и другие сущности: названия объектов (Name), классы (ClassDef), кортеджи (Tuple), циклы (For, While) и другие [3].

Общий вид преобразования кода с помощью АСД:

```
code = open(path, 'rb').read()
ast = ast.parse(code)
obf = Obfuscator()
ast2 = obf.visit(ast)
result = codegen.to_source(ast2)
open(path, 'w').write(result)
```

Для обратного преобразования АСД используется библиотека codegen, изменяющая узлы дерева в соответствующие фрагменты кода [5].

Чтобы оценить затраты на обработку кода с помощью АСД, был проведен ряд тестов на кодах, содержащих от 100 до 100 000 узлов определенных типов. Результаты отображены в табл. 1–4.

Таблица 1

Время обработки узлов Num

Количество узлов	ast	visit	codegen
100	0,006	0,003	0,005
1 000	0,016	0,022	0,041
10 000	0,037	0,227	0,413
100 000	0,409	3,838	4,947

Таблица 2

Время обработки узлов Name

Количество узлов	ast	visit	codegen
100	0,001	0,009	0,004
10 00	0,007	0,083	0,045
10 000	0,080	0,806	0,450
100 000	1,167	8,046	4,490

Таблица 3

Время обработки узлов Str

Количество узлов	ast	visit	codegen
100	0,000	0,004	0,018
1 000	0,002	0,035	0,126
10 000	0,031	0,432	1,237
100 000	0,263	4,927	12,327

Таблица 4

Время обработки узлов If

Количество узлов	ast	visit	codegen
100	0,002	0,002	0,018
1 000	0,020	0,022	0,187
10 000	0,273	0,312	2,305
100 000	3,086	4,019	18,463

Наибольшее время уходит на генерацию кода на основе АСД, это объясняется тем, что модуль codegen является сторонней разработкой на чистом Python, в то время как модуль ast – внутренний с оптимизацией на Си. Вместо формирования кода из АСД с помощью codegen, можно использовать непосредственную компиляцию через метод compile:

```
s = compile(tree, filename="<ast>",
            mode="eval")
```

либо при задаче непосредственного выполнения:

```
exec(compile(tree, filename="<ast>"
            mode="exec"))
```

Время выполнения обфускации сильно зависит от заложенных в нее алгоритмов, но сами затраты на выполнение обработки соответствующих узлов (visit) не значительны.

Используемые тесты:

```
def generate_num(count):
    return [10 for _ in xrange(0, count)]
def generate_if(count):
    code = ["x = 1"]
    for _ in xrange(count):
        code.append("\nif x > 0:\n x += 1")
    return "\n".join(code)
def generate_str(count):
    return str(["abcd" for _ in xrange(count)])
def generate_name(count):
    code = []
    for i in xrange(count):
        code.append("x {0}={0}".format(i))
    return "\n".join(code)
```

Для простых алгоритмов преобразования не сложно разработать алгоритм деобфускации, использующий то же самое АСД. Например,

можно получить результат сложения строк или чисел, перекрыв оператор BinOp:

```
def visit_BinOp(self, node):
    node = self.generic_visit(node)
    if isinstance(node.left, _ast.Num) and \
        isinstance(node.right, _ast.Num):
        return self.do_eval(node, ast.Num)
    if isinstance(node.left, _ast.Str) and \
        isinstance(node.right, _ast.Str):
        return self.do_eval(node, ast.Str)
    return node
```

Подобное действие вернет в исходное состояние код:

```
x = 1 + 2 + 3
x = "1" + "2" + "3"
```

Чтобы нейтрализовать переворачивание строки, можно анализировать вызываемые функции и в случае соответствия операции reversed производить обратное действие

```
def visit_Call(self, node):
    node = self.generic_visit(node)
    if isinstance(node.func, _ast.Name) and
        node.func.id == 'reversed':
        if len(node.args) == 1 and
            isinstance(node.args[0], _ast.Str) and
            not node.keywords and
            not node.starargs and not node.kwargs:
            return ast.Str(node.args[0].s[::-1],
                lineno=0, col_offset=0)
```

Для того чтобы препятствовать такой деобфускации, можно использовать проход значения через дополнительную функцию:

```
def f(x):
    return x

x = f(1)+f(2)+f(3)
x = f("1")+f("2")+f("3")
```

Для этого достаточно преобразовать аргументы, передаваемые в BinOp к следующему виду:

```
value1 = Call(func=Name(id='f', ctx=Load()),
args=[Str(x)])
value2 = Call(func=Name(id='f', ctx=Load()),
args=[Str(y)])
```

АСД также можно использовать для подсчета метрик программного обеспечения [5]. Например, вести подсчет всех встречающихся

блоков с помощью глобального словаря, задав веса в соответствии со сложностью объекта (строковые узлы и числа – 1, операторы – 2, функции – 5). Оценку глубины вложенности функций можно производить за счет рекурсивного вызова visit для содержимого функции.

Заключение. Обфускация кода, представленного в виде АСД, значительно упрощается при реализации обхода узлов через паттерн Visitor. Недостатком при этом является строго заданная схема обхода, что позволяет реализовать только определенные алгоритмы защиты. Возможен обратный процесс восстановления кода с помощью АСД за счет динамического выполнения обходных узлов. Затруднить деобфускацию можно используя более сложные преобразования с вынесением участков кода в отдельные функции, не позволяя тем самым заменять их статическим результатом.

Помимо внедрения алгоритмов обфускации, АСД является удобным инструментом для вычисления метрик программного обеспечения [6] особенно количественного типа.

Литература

1. Russell J., Cohn R. Context-free grammar. М.: VSD, 2013. 120 p.
2. PHP Documentation [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.phpcompiler.org/doc/phpc-0.2.0/devintro.html>. Дата доступа: 20.02.2014.
3. Python Abstract Syntax Trees [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://docs.python.org/2/library/ast>. Дата доступа: 20.02.2014.
4. Python Source Obfuscation using ASTs [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://jbremer.org/python-source-obfuscation-using-asts>. Дата доступа: 20.02.2014.
5. Extension to ast that allow ast python code generation [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://github.com/andreif/codegen>. Дата доступа: 20.02.2014.
6. Пласковицкий В. А., Урбанович П. П. Защита программного обеспечения от несанкционированного использования и модификации методами обфускации // Труды БГТУ. 2011. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. Вып. XIX. С. 173–176.

Поступила 20.03.2014

УДК 004.3

Н. А. Жилияк, кандидат технических наук, доцент (БГТУ);**Н. П. Цыганенко**, студент (БГТУ)**ШИФРОВАНИЕ XML-ДОКУМЕНТА СРЕДСТВАМИ .NET**

В статье приводятся результаты исследования средств для шифрования XML-документа, предоставляемых компанией Microsoft в рамках платформы .Net Framework. Данное исследование позволяет сформировать на основании выявленных преимуществ и недостатков требования к собственному программному продукту для шифрования XML-данных. Также приводится структура проектируемого приложения и результаты патентных исследований в данной области.

In article results of research tools for encrypting XML document provided by Microsoft as part of the .Net Framework platform. This research allows to generate the requirements for their own software products for encrypting XML data based on the identified strengths and weaknesses. Also shows the structure of the designed application and the results of patent research in this field.

Введение. В современном мире формат представления данных Extensible Markup Language (XML) становится одним из стандартов при передаче данных по сети Интернет. Главным преимуществом XML по сравнению с другими форматами электронных документов является то, что в нем описание внешнего представления документа отделено от структуры документа и его содержания. XML является гибким языком, который можно использовать для различных целей, при этом он способен обеспечить взаимодействие со многими системами и базами данных.

Формат представления данных XML имеет широкий круг применения. Например, среди наиболее типичных примеров можно выделить конфигурационные файлы (в .Net Framework – web.config, app.config, machine.config), отчетную документацию (с использованием технологии XSLT), новостные ленты (технология RSS), web-сервисы (протокол SOAP, язык описания сервисов WSDL), приложения WPF и Silverlight (язык XAML).

Среди основных технологий, обладающих огромным потенциалом и использующих XML-формат, выделяют web-сервисы, использование которых с каждым днем растет. В связи с этим возникает естественная необходимость в шифровании информации от злоумышленников.

Структура XML-документа позволяет одинаково легко зашифровать его как целиком, так и частично. Например, в целях экономии ресурсов и времени можно зашифровать только конфиденциальные данные документа.

Шифрование XML-файла имеет некоторые отличительные особенности от других механизмов обеспечения безопасности передаваемых данных (таких как IPSec, TLS, SSL и прочие):

- обеспечивает безопасность данных, а не сеанса;
- данные могут быть частично зашифрованы, что позволяет в рамках одного документа разграничивать доступ между разными лицами [1].

В консорциуме W3C была создана рабочая группа, которая специально занималась вопросами шифрования XML-данных. В 2001 г. выпущена первая спецификация, носящая название XML Encryption Syntax and Processing (синтаксис и выполнение шифрования XML). Последние изменения сделаны 24 января 2013 г.

Спецификация носит рекомендательный характер. Она определяет основные правила шифрования и дешифрования XML-документов, синтаксис шифрования, пространство имен XML Encryption, элементы шифрования и используемые классы XML Encryption.

Рассматриваемая спецификация W3C определяет три возможных варианта шифрования: весь файл, тег или содержимое тега.

Частичное шифрование XML-документа может использоваться как с целью разграничения доступа между пользователями с разными ключами, так и для уменьшения количества передаваемой информации. При шифровании, как правило, объем данных на выходе превышает объем данных на входе. Поэтому целесообразным видится шифрование только той части файла, которая носит конфиденциальный характер [2].

Компания Microsoft создала пространство имен System Security Cryptography XML в рамках .Net Framework. Пространство реализует спецификацию W3C, но не обеспечивает высокоуровневую поддержку работы с XML-документами. Т. е. при необходимости программист сам должен проектировать и реализовывать обертку необходимой части файла, .Net предоставляет только общие классы.

Основная часть. Для осуществления шифрования и дешифрования средствами System Security Cryptography XML платформы .Net требуется наличие сертификата, соответствующего стандарту X.509.

X.509 – стандарт, определяющий форматы данных и процедуры распределения открытых ключей с помощью сертификатов с цифровыми

подписями, которые предоставляются сертификационными органами (CA). RFC 1422 создает основу для PKI на базе X.509.

В RFC 5280 определен сертификат X.509 версии 3 и список отзыва сертификатов (CRL) версии 2.

Для технологии открытых ключей необходимо, чтобы пользователь открытого ключа был уверен, что этот ключ принадлежит именно тому удаленному субъекту (пользователю или системе), который будет использовать средства шифрования или цифровой подписи [3]. Такую уверенность дают сертификаты открытых ключей, т. е. структуры данных, которые связывают величины открытых ключей с субъектами. Эта связь достигается цифровой подписью доверенного CA под каждым сертификатом. Сертификат имеет ограниченный срок действия, указанный в его подписанном содержании. Поскольку пользователь сертификата может самостоятельно проверить его подпись и срок действия, сертификаты могут распространяться через незащищенные каналы связи и серверные системы, а также храниться в кэш-памяти незащищенных пользовательских систем. Содержание сертификата должно быть одинаковым в пределах всего PKI. В настоящее время в этой области предлагается общий стандарт для Интернета с использованием формата X.509 v3: номер версии; серийный номер; эмитент; субъект; открытый ключ субъекта (алгоритм, ключ); период действия; дополнительные (необязательные) значения; алгоритм подписи сертификата; значение подписи сертификата. X.509-сертификаты хранятся, как правило, в виде DER- (стандартное расширение .cer) или PEM-файлов.

Создание тестового сертификата осуществляется через утилиту `makecert.exe` – инструмент для создания сертификатов, генерирует сертификаты X.509, предназначенные исключительно для тестирования. Этот инструмент создает пару из открытого и закрытого ключей для цифровой подписи и помещает ее в файл сертификата. Он также привязывает пару ключей к указанному имени издателя и создает сертификат X.509, который связывает заданное пользователем имя с открытым ключом пары.

Для работы с сертификатами стандарта X.509 в .Net используется пространство имен `System.Security.Cryptography.X509Certificates`. Процесс получения экземпляра сертификата состоит из открытия для чтения локального хранилища, получения набора сертификатов и взятия первого сертификата, имеющего заданное имя.

Процесс шифрования XML-файла состоит из нескольких этапов. Первым делом проверяется корректность ввода полного пути к файлу (т. е. существование файла) и выдача преду-

ждения в случае ошибки. Далее вызывается функция для получения сертификата. Также осуществляется проверка на существование сертификата с указанным именем и в случае ошибки выдается предупреждение. Следующим шагом является загрузка XML-данных из файла в специальный класс `XmlDocument` [4]. Затем создается экземпляр класса `EncryptedXml`. Через него осуществляются все операции по шифрованию и дешифрованию XML-данных. Потом получается коллекция всех тегов с заданным именем. Далее выполняется цикл, который шифрует каждый найденный тег. Первым шагом цикла получается тег и приводится к типу `XmlElement`, вторым шагом тег шифруется с использованием сертификата, и третьим шагом зашифрованный тег заменяет собой исходный. После шифрования XML-данных файл сохраняется.

Дешифрование происходит практически в автономном режиме, так как при шифровании в специальные теги была записана служебная информация. Создается объект класса `EncryptedXml` на основании переданного объекта класса `XmlDocument` и для него вызывается стандартная функция дешифрования, которая находит нужный сертификат и дешифрует зашифрованные теги.

Суммируя результаты изучения средств присутствующих в пространстве имен `System.Security.Cryptography.Xml`, можно отметить, что данные средства не совсем удобны для конечного пользователя (программиста). Процесс шифрования запутан, децентрализован и не стандартизирован. Плюс ко всему реализация шифрования и дешифрования является закрытой, что не дает 100%-й гарантии надежности использования функций. Конечно, необходимо четко выявить ряд достоинств и недостатков средств для шифрования XML-документов, предоставляемых .Net Framework:

- достоинства: полное следование стандарту; легкий для понимания процесс дешифрования;
- недостатки: нет высокоуровневой поддержки процессов шифрования и дешифрования; нет возможности выбора алгоритма шифрования; изначальная избыточная информация, вносимая стандартом; коды, реализующие шифрование и дешифрование, являются закрытыми, что не может дать полной уверенности в конфиденциальности шифруемых данных.

Для устранения недостатков предлагается разработать программное средство, лишенное их. Для этого необходимо:

- проанализировать стандарт W3C для нахождения и устранения избыточности;
- обеспечить высокоуровневую поддержку шифрования документа или его частей путем

проектирования и разработки специализированного класса;

- обеспечить поддержку различных алгоритмов шифрования, таких как DES, AES, RSA;
- разработать программное средство, демонстрирующее возможности реализованного класса;
- распространить реализованное программное средство с открытым исходным кодом.

Выводы. Центром планируемого программного продукта должна стать иерархия классов, которая через программный интерфейс или набор интерфейсов обрабатывает запросы клиентского (вызывающего) приложения.

В целях демонстрации возможности и удобства использования вышеописанной иерархии классов для шифрования XML-документов необходимо создать разнообразные типы клиентских (по отношению к иерархии классов) приложений. Типичными клиентскими приложениями для платформы .Net Framework являются консольное приложение, оконное приложение, веб-приложение и веб-сервис. Примерная схема работы с проектируемой иерархией классов:

- создается экземпляр интерфейса для работы с классами шифрования XML;
- интерфейсу передаются данные для шифрования, желаемый алгоритм и необходимые ключи; вызывается метод, который шифрует указанный тип тегов (для шифрования нескольких различных типов тегов можно сделать несколько вызовов функции шифрования или передать в метод список типов тегов);
- данные готовы для пересылки, хранения.

Для дешифрования необходимо будет повторно создать экземпляр интерфейса с теми же параметрами, которые использовались при шифровании, только вместо открытого XML-текста

в экземпляр заносится закрытый текст. Далее дешифрование происходит в автоматическом режиме.

При исследовании актуальности и необходимости разработки описанного выше программного средства был проведен патентный поиск. Он осуществлялся с помощью базы данных, предоставляемой сайтом федерального института промышленной собственности (ФИПС – <http://www.fips.ru>).

Поиск по ключевым словам «шифрование xml» выдал три результата.

1. Повышение уровня автоматизации при инициализации компьютерной системы для доступа к сети.

2. Устройство и способ поддержки обмена содержимым между доменами с отличающимися DRM.

3. Система и способ, обеспечивающие распределенную архитектуру сварки.

Результат изучения документации по найденным патентам показал, что ни один из них не является специализированным средством для шифрования XML-данных. В связи с этим логично, что в настоящее время актуальность и необходимость в таком программном продукте высока.

Литература

1. Неволин А. О. Защита XML-данных. М.: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011. 124 с.
2. Петцольд Ч. Код. М.: Русская Редакция, 2006. 512 с.
3. Аршинов М. Н., Садовский А. Е. Коды и математика (Рассказы о кодировании). М.: Наука, 1999. 144 с.
4. C# для профессионалов / С. Робинсон [и др.]. М.: Лори, 2008. 1002 с.

Поступила 19.03.2014

РЕФЕРАТЫ

.....

УДК 517.935.2+519.71

Марченко В. М., Борковская И. М., Пыжкова О. Н. **Метод пространства состояний в дискретно-непрерывных и дифференциально-разностных системах** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 3–6.

Приводится пример экономической задачи, математическая модель которой представляет гибридную дискретно-непрерывную систему, сводящуюся к гибридной дифференциально-разностной системе. Для таких систем обсуждается подход к исследованию качественной теории управления на основе метода пространства состояний. Формулируются игровые задачи управляемости.

Ил. 2. Библиогр. – 17 назв.

УДК 532.517

Волк А. М. **Гидродинамика жидкой пленки на цилиндрической поверхности** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 7–9.

Математическое моделирование процессов взаимодействия фаз при пленочном движении жидкости на цилиндрических поверхностях в процессах разделения фаз и тепломассообмене позволяет определить оптимальные режимы, соотношение между геометрическими параметрами и нагрузками по фазам. Теоретически исследовано пленочное движение жидкой фазы под воздействием массовых сил поля тяжести и закрученного газового потока на поверхности цилиндра. Получены дифференциальные уравнения движения пленки под воздействием закрученного газового потока, а также точные решения для составляющих скорости при условии прилипания пленки на поверхности проницаемого цилиндра и равенстве касательных напряжений на границе раздела фаз. Найдены толщина пленки, скорость на границе раздела фаз и градиент скорости на поверхности цилиндра. Полученная математическая модель позволяет определить режим движения пленки и учитывать ее гидродинамику при исследовании процессов сепарации и тепломассообмена.

Ил. 1. Библиогр. – 6 назв.

УДК 519.624

Соловьева И. Ф. **Влияние пограничного слоя на решение нелинейных граничных задач с малым параметром при старшей производной** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 10–12.

Работа посвящена изучению нелинейных граничных задач с малым параметром при старшей производной и возникающими при этом пограничными слоями. Для решения таких задач предлагаются модификации методов пристрелки. Если пограничный слой находится на левом конце заданного отрезка, то применяется метод обратной пристрелки, если на правом, то метод прямой множественной пристрелки. В случае когда пограничный слой имеет место на обоих концах отрезка, предлагается метод множественной двусторонней пристрелки. Выполнено сравнение этих методов и показано преимущество последнего из них для решения граничных задач с пограничным слоем. Приведен пример решения такой задачи с занесением результатов решения в таблицу основных значений.

Библиогр. – 2 назв.

УДК 514.76

Можей Н. П. **Когомологии трехмерных однородных пространств** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 13–18.

Публикация посвящена изучению трехмерных однородных многообразий и описанию их когомологий. Локальная классификация однородных пространств эквивалентна описанию эффективных пар алгебр Ли. Приведены инвариантные невырожденные симметрические билинейные формы на таких однородных пространствах. Также изучена секционная кривизна римановых (псевдоримановых) трехмерных однородных пространств. Рассмотрен случай нетривиальной стационарной подгруппы, поскольку остальные однородные пространства в этой размерности – трехмерные группы Ли. В работе использован алгебраический подход для описания многообразий, методы теории групп и алгебр Ли, однородных пространств.

Библиогр. – 6 назв.

УДК 517.977

Якименко А. А. **Предельное запаздывание в одном уравнении нейтрального типа** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 19–21.

В статье рассматривается задача нахождения предельного запаздывания в одном скалярном уравнении нейтрального типа. Исследуется вопрос об устойчивости такого уравнения в зависимости от его параметров, в том числе и от запаздывания. Найдено предельное значение запаздывания, при котором теряется свойство устойчивости. Полученные результаты могут быть применены при исследовании устойчивости систем нейтрального типа.

Библиогр. – 11 назв.

УДК 531.19

Бокун Г. С., Вихренко В. С., Шалкус Т. **Оценка частотной зависимости электросопротивления в межзеренных и внутризеренных областях токопроводящей керамики** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 22–25.

Модель решеточного флюида используется для описания процессов переноса в керамических твердых телах, характеризующихся пространственной неоднородностью, обусловленной их зернистым строением. Получены соотношения, позволяющие изучать равновесное распределение концентрации частиц в области межзеренных границ. Сформулированы кинетические уравнения, описывающие диффузионные потоки при наличии неоднородности распределения концентрации. Используя преобразование Лапласа по времени, получена частотная зависимость электросопротивления в межзеренных и внутризеренных областях керамики.

Библиогр. – 3 назв.

УДК 531.19

Ласовский Р. Н., Вихренко В. С. **Распределение концентрации лабильных частиц в области межзеренных границ в твердых электролитах** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 26–28.

В рамках теории решеточных систем получена система уравнений для распределения концентрации лабильных частиц в области межзеренных границ электропроводящих керамик. Исследованы профили плотности заряда, получаемые при ступенчатом и экспоненциальном распределениях кристаллического потенциала. Отмечено появление двух конденсаторных слоев, а также идентичность их амплитуд в обоих случаях. Показано, что при ступенчатом распределении кристаллического потенциала ширина конденсаторных слоев не зависит от вида ступеньки.

Ил. 5. Библиогр. – 7 назв.

УДК 531.19

Грода Я. Г. **Определение коэффициента диффузии решеточного флюида с взаимодействием в седловой точке на объемноцентрированной кубической решетке в рамках суперпозиционного приближения** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 29–31.

Рассмотрен процесс диффузии решеточного флюида с дополнительным взаимодействием в седловой точке на объемноцентрированной кубической решетке. Предложена методика получения аналитического выражения для оценки кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида. Определен кинетический коэффициент диффузии решеточного флюида с притяжением (отталкиванием) ближайших соседей и равным ему взаимодействием в седловой точке. Результаты аналитических расчетов сопоставлены с данными компьютерного моделирования диффузионного процесса в исследуемой системе по методу Монте-Карло.

Ил. 2. Библиогр. – 8 назв.

УДК 531.19

Бокун Г. С. **Асимптотическое решение уравнений Нернста – Планка – Пуассона для ионного кристалла** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 32–34.

Рассмотрен процесс диффузии в системе, состоящей из двух твердых фаз с разной концентрацией носителей заряда. Для решения задачи использованы интегральное преобразование Лапласа по времени и пространственное преобразование Фурье. В итоге получено асимптотическое решение, позволяющее исследовать характер изменения со временем разности потенциалов в двух фазах, образующейся из-за возникновения динамического диффузионного переходного слоя. Показано, что по мере увеличения размеров слоя и выравнивания концентраций в фазах исходной системы разность потенциалов стремится к постоянному предельному значению.

Библиогр. – 9 назв.

УДК 531.19

Ласовский Р. Н. **Наноструктуризация интеркаляционных систем во внешнем поле** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 37–37.

Получена замкнутая система дифференциально-разностных уравнений для описания эволюции поля концентрации решеточной системы при наличии внешнего поля. Исследована кинетика двух- и трехмерных решеточных систем с симметричным расположением «затравочных» областей. Показано, что вначале возникает ряд узких конденсированных центральных зон, поглощаемых с течением времени широкой конденсированной

зоной, образующейся в направлении действия внешнего поля. Возникновение центральных полос и скорость их исчезновения зависят от величины внешнего поля.

Ил. 2. Библиогр. – 9 назв.

УДК 539.12

Кленицкий Д. В. **Влияние размера частиц на скорость звука в адронном резонансном газе** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 38–40.

В работе изучается влияние размера частиц на скорость звука в адронном резонансном газе, состоящем из адронных резонансов, имеющих массы $M < 2$ ГэВ. Вычислено давление, плотность энергии и энтропии в адронном резонансном газе с учетом исключенного объема (объема, занимаемого частицами). Исключенный объем учитывается при использовании процедуры, предложенной Ван-дер-Ваальсом и обобщенной на случай переменного числа частиц в системе. Используя термодинамические величины, вычисленные с учетом исключенного объема, мы определили скорость звука в газе и полученные результаты сравнили со скоростью звука в состоящем из точечных частиц газе. При высоких температурах учет размера частиц приводит к существенному увеличению скорости звука в газе.

Ил. 2. Библиогр. – 7 назв.

УДК 531.19; 539.682

Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Клышко В. Б. **Полная система уравнений для расчета свободной энергии системы с учетом неоднородного распределения молекул в микроячейках метода условных распределений** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 41–43.

В рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода разработана методика расчета средней энергии взаимодействия выделенной молекулы среды со всеми остальными молекулами изучаемой молекулярной системы, которая предполагает выполнение аналитических расчетов для учета взаимодействия с молекулами на достаточно больших расстояниях и численных расчетов для ближайших соседей (первых и вторых). В результате составлена полная система интегральных и алгебраических уравнений, решение которой позволяет рассчитать свободную энергию молекулярной системы.

Ил. 1. Библиогр. – 3 назв.

УДК 535.37+541.65+543.4

Кленицкий Д. В., Крук Н. Н. **Анализ неплоскостных искажений макроцикла свободного основания коррола** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 44–46.

Выполнен анализ характера неплоскостных искажений двух NH-таутомеров свободного основания коррола. Найдены среднеквадратичные отклонения атомов тетрапиррольного макроцикла от средней плоскости макроцикла, которая определена как плоскость с минимальными среднеквадратичными отклонениями атомов C1, C4, C5, C6, C9, C16 и C19. Показано, что оба NH-таутомера характеризуются неплоскостными искажениями волнообразного типа, однако амплитуда отклонений для них существенно различается. Из-за наличия стерических препятствий в ядре тетрапиррольного макроцикла пиррольные и пирролениновые кольца наклонены относительно средней плоскости макроцикла, а для пиррольных атомов азота выражена тенденция к пирамидализации.

Ил. 1. Библиогр. – 7 назв.

УДК 535.34

Корниенко Т. А., Миксюк Ю. И., Саечников К. А. **Распространение и взаимодействие световых пучков в фоторефрактивных кристаллах титаната висмута** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 47–49.

Экспериментально исследованы процессы самофокусировки гауссовых световых полей и образования экранирующих солитоноподобных структур в фоторефрактивном кристалле $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (ВТО) сечения $[111]$, $[11-2]$, $[1-10]$. Продемонстрирован основной сценарий преобразования поперечного профиля светового пучка и определена необходимая экспозиция для формирования устойчивой солитоноподобной структуры. Представлен пример и подобраны оптимальные параметры для некогерентного взаимодействия двух гауссовых световых пучков при ортогональной геометрии их распространения в кубическом фоторефрактивном кристалле титаната висмута, помещенном во внешнее электрическое поле.

Ил. 4. Библиогр. – 3 назв.

УДК 621.391

Никитенок В. И., Ветохин С. С. **Сверхбыстрый непараметрический двухканальный обнаружитель слабых оптических сигналов** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 50–52.

Рассматривается непараметрический двухканальный обнаружитель слабых оптических сигналов, основанный на тесте Вальда – Вольфовица, и его показатели качества. Обнаружитель обеспечивает постоянство

условной вероятности ложной тревоги к изменениям интенсивности помех. Обосновано принятие решения об обнаружении на минимальном интервале времени, когда один из простейших пуассоновских потоков еще продолжается (отсюда термин «сверхбыстрый»). Представлена структурная схема обнаружителя.

Ил. 1. Библиогр. – 6 назв.

УДК 621.378.325

Рудик К. И., Чернявский В. А. **Амплитудная и фазовая анизотропия растворов сложных молекул при лазерном возбуждении** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 53–55.

Экспериментально исследована амплитудная и фазовая анизотропия растворов красителей, наведенная линейно поляризованным излучением, методом зондирующего излучения. Установлено, что раствор красителя в этом случае представляет собой отрицательный кристалл, оптическая ось которого направлена вдоль вектора напряженности электрического поля возбуждающей волны. С помощью параметров Стокса получены данные об эллипсе поляризации зондирующего излучения, которые позволили рассчитать разность показателей преломления обыкновенного и необыкновенного лучей: $\Delta n = 10^{-5}$.

Ил. 3. Библиогр. – 7 назв.

УДК 539.19

Кузьмицкий В. А. **Точный алгебраический метод в обратной задаче для сложного резонанса Ферми или его вибронного аналога** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 56–58.

Найдено точное решение задачи о восстановлении матричных элементов связи «светлого» и «темных» состояний b_i и энергии невозмущенных уровней a_i ($i = 1, 2, \dots, n - 1$); предполагается, что известны наблюдаемые энергии e_k и интенсивности переходов I_k ($k = 1, 2, \dots, n$) в результирующие «перемешанные» состояния. Алгоритм использует алгебраические методы, базирующиеся на нахождении собственных векторов матриц гамильтониана частного вида, а его модифицированный вариант – на элементарных вращениях Якоби. Для случая проявления неадиабатического вибронного взаимодействия у трех порфириновых соединений в области электронного 0–0-перехода $S_0 \rightarrow S_2$ найдены энергии возбужденного электронного состояния S_2 и колебательных подуровней a_i состояния S_1 , а также матричные элементы вибронного взаимодействия b_i между этими состояниями.

Ил. 2. Библиогр. – 5 назв.

УДК 539.19

Волкович Д. И., Кузьмицкий В. А., Соловьев К. Н. **Электронно-возбужденные состояния тетрапиррольных соединений: квантово-химические расчеты методом INDO/Sm** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 59–61.

Отмечено, что точность квантово-химических расчетов энергии возбужденных электронных состояний молекул класса тетрапирролов на уровне *ab initio* и DFT/TDDFT не превосходит точность полуэмпирических методов. В этой связи методом INDO/S при варьировании параметров и одноэлектронных, и двухэлектронных интегралов проведены расчеты родоначальников ряда тетрапирролов – молекул порфина и Mg-порфина, на основании чего предложена модифицированная параметризация, INDO/Sm. Показано, что экспериментальное положение Q- и B-переходов в электронных спектрах в расчетах INDO/Sm воспроизводится с точностью $\sim 300 \text{ см}^{-1}$. Методом INDO/Sm рассчитаны электронные спектры фундаментальных тетрапиррольных структур, включая хлорин, бактериохлорин, тетраазапорфин; результаты для энергии Q-уровней согласуются с экспериментальными данными с погрешностью $\sim 300\text{--}700 \text{ см}^{-1}$, в то время как погрешность расчетов INDO/S составляет не менее 3000 см^{-1} . Методом INDO/Sm выполнены обширные расчеты нескольких рядов тетрапиррольных соединений, в том числе аналогов фталоцианина с пятичленными гетероароматическими циклами, фенилзамещенных порфиразинов, аналогов бактериохлорофилла и др. Полученные результаты совместно с экспериментальными данными позволили установить существенные спектрально-структурные корреляции.

Библиогр. – 7 назв.

УДК 535.36;535.37;584.4;537.26

Шишонок Е. М., Лугин В. Г. **Рентгеноструктурный анализ и исследования прочностных свойств синтетического алмаза** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 62–64.

С использованием рентгеновской дифрактометрии исследованы порошки синтетического алмаза (СА) с различной зернистостью, содержанием примесей и прочностью, полученные в едином цикле синтеза, в сравнении с эталонным образцом натурального алмаза. Выявлена тонкая структура линий рентгеновских дифрактограмм спектров порошков СА, свидетельствующая об искажениях его кристаллической решетки. Установлена связь характера искажений с прочностью и морфологией зерен порошков.

Ил. 5. Библиогр. – 1 назв.

УДК 674.055:621.934(043.3)

Чаевский В. В., Гришкевич А. А., Гаранин В. Н., Углов В. В., Кулешов А. К. **Влияние ZrN- и Mo-N-покрытий на износ лезвия ножа фрезерного инструмента при резании ДСтП** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 65–67.

В работе представлены результаты высокоэнергетической обработки методом КИБ лезвий ножей фрезерного инструмента. Установлено, что сформированные ионно-плазменные ZrN-, Mo-N-покрытия на лезвиях ножей из твердых сплавов увеличивают период стойкости модифицированного инструмента до 70% при фрезеровании ламинированных ДСтП. Определен вид износа необработанного лезвия ножа фрезерного инструмента как абразивный. Mo-N-покрытия изменяют вид износа лезвия с механического диспергирования в сочетании с абразивным на окислительный износ при резании ламинированных ДСтП.

Табл. 1. Ил. 3. Библиогр. – 5 назв.

УДК 539.213.2

Долгий В. К., Почтенный А. Е. **Моделирование адсорбционно-резистивного отклика в сенсорных слоях органических полупроводников** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 68–70.

Предложенная теоретическая модель адсорбционно-резистивного отклика примесного органического полупроводника при сопоставлении с экспериментальными данными позволила установить механизм сенсорного отклика на диоксид азота пленок ионно-легированного фталоцианина меди. Показано, что ионно-имплантированная примесь увеличивает сенсорный отклик, если электронные состояния этой примеси располагаются по шкале энергий ниже собственных, а состояния регистрируемого газа – между собственными и состояниями ионно-имплантированной примеси. Установлено, что максимальный сенсорный отклик наблюдается при концентрации ионно-имплантированной примеси, соответствующей переходу от собственной к примесной проводимости примесного органического полупроводника.

Ил. 5. Библиогр. – 3 назв.

УДК 537.633.2

Мадьяров В. Р. **СВЧ-диагностика полупроводников на основе кинетической модели переноса носителей заряда** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 71–73.

На основе решения кинетического уравнения Больцмана получено выражение для холловской подвижности в СВЧ-области через параметры зонной структуры полупроводника. Показано, что независимо от поперечных размеров образца холловскую подвижность можно определить, измерив проводимости плоского полупроводникового образца в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Экспериментальная проверка дала удовлетворительное соответствие результатов расчета диэлектрической проницаемости по кинетической модели и значений, определенных по измерению фазового сдвига зондирующего излучения в области частот 30–80 ГГц.

Ил. 3. Библиогр. – 5 назв.

УДК 539.1.06:539.23.234

Бобрович О. Г., Ташлыков И. С., Тульев В. В. **Влияние параметров ионно-ассистируемого осаждения на формирование Me/Si-структур** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 74–76.

Методом РОР изучен элементный состав металлических (Co, Mo, W) покрытий, осажденных на (100)Si в условиях ионного (Co^+ , Mo^+ , W^+) ассистирования. Толщина покрытия увеличивается с уменьшением ускоряющего напряжения для ассистирующих ионов Co^+ , Mo^+ , W^+ от 20 до 7 кВ и зависит как от отношения плотности потока ионов J_i к плотности потока нанесенных атомов J_A (J_i / J_A), так и типа осаждаемого на Si металла. Установлено, что оптимальное отношение J_i / J_A , при котором достигается наибольшая толщина Co- и Mo-покрытий составляет 0,06, а для W-покрытия – 0,04.

Ил. 3. Библиогр. – 8 назв.

УДК 539.1.06:539.23.234

Тульев В. В., Ташлыков И. С., Литвинов Д. А. **Влияние параметров осаждения на толщину модифицированного слоя при динамическом атомном перемешивании Pd/Fe-структур** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 77–79.

Методом резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия в сочетании с компьютерным моделированием определено, что при осаждении палладия на железо (99,5%) методом динамического атомного перемешивания, в котором в качестве ассистирующих ионов использовались ионы Ag^+ с энергией 6 кэВ, и интегральными потоками $(0,7-1,6) \cdot 10^{16}$ ион/см² формируется Pd-пленка толщиной $\sim(14-23)$ нм. Установлено, что толщина сформированного покрытия зависит от параметра I / A (отношение плотности потока I ассистирующих ионов к плотности потока A атомов осаждаемого покрытия). При расчете толщины пленки

необходимо учитывать помимо распыления ассистирующими ионами атомов покрытия также распыление атомов подложки.

Ил. 6. Библиогр. – 8 назв.

УДК 535.374:537.6:621

Сойка А. К., Шепелевич В. Г. **Долговременный отрицательный магнитоэлектрический эффект в металлах, вызванный воздействием сильного импульсного магнитного поля** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 80–82.

В работе представлены результаты экспериментальных исследований влияния сильных импульсных магнитных полей с амплитудой индукции от 5 до 40 Тл на механические свойства фольг из Al, Zn, Sn и сплава Al – Zn. В фольгах из Al и Al – Zn обнаружен отрицательный магнитоэлектрический эффект с магнитной памятью, заключающийся в значительном (до 50%) и, по-видимому, необратимом увеличении микротвердости образцов после однократного воздействия на них униполярного импульсного магнитного поля. По мнению авторов, обнаруженные особенности магнитоэлектрического эффекта в металлах не могут быть объяснены в рамках концепции спин-зависимых процессов в твердых телах, ответственных за магнитоэлектрические явления в ионных кристаллах.

Ил. 4. Библиогр. – 15 назв.

УДК 004.012:004.942

Акиншева И. В., Кузьмицкий И. Ф. **Особенности интегрального оценивания многомерных объектов и алгоритмов управления** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 83–86.

В данной статье рассматривается методика оптимизации многомерных объектов химической промышленности – реакторов поликонденсации. Согласно технологии, процесс поликонденсации протекает при высокой температуре и низком давлении, что подразумевает большие затраты электроэнергии. Разработан алгоритм поиска оптимальных значений управляющих переменных, составленный на основе теории вариационного исчисления и использующий интегральный критерий оптимизации процесса поликонденсации. При реализации алгоритма ставилась трудоемкая задача, связанная с большим количеством преобразований. Поэтому использовали ряд допущений, чтобы решение поставленной задачи представлялось возможным. Оценка принятых допущений доказала незначительное влияние на точность решения задачи оптимизации. Разработанный математический аппарат дает предпосылки для синтеза адаптивной системы управления исследуемым объектом.

Ил. 1. Библиогр. – 4 назв.

УДК 62.50

Лапето А. В., Кузьмицкий И. Ф. **Синтез систем управления с запаздыванием методом теории вложения на основе алгоритмов аппроксимации функций с отклоняющимся аргументом** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 87–91.

Работа посвящена синтезу систем управления с отклоняющимся аргументом на основе теории вложения. Показана возможность применения разложений различного типа для аппроксимации звеньев чистого запаздывания. Рассматривается возможность применения алгоритмов синтеза систем управления необходимой размерности на основе желаемого показателя перерегулирования и нормированного времени переходного процесса.

Табл. 2. Библиогр. – 5 назв.

УДК 681.3

Сухорукова И. Г., Гринюк Д. А., Оробей И. О. **Адаптация критерия серий к применению в управлении технологическими процессами** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 92–95.

Рассматривается возможность использования критерия серий для выявления нестационарности измерительных каналов промышленных программируемых логических контроллеров. Данные с измерительных регистров контроллера сглаживались несколькими вариантами фильтров. Выбор настроек критерия во многом определялся динамическими особенностями измерительных каналов. Нелинейные особенности измерительных каналов могут несколько исказить результаты работы критерия серий. Проводился анализ соответствия шумов в измерительных каналах нормальному распределению. Временные тренды исходных данных с контроллера анализировались с помощью MatLAB. Передача данных осуществлялась с помощью OPC-технологии.

Ил. 12. Библиогр. – 5 назв.

УДК 621.396

Олиферович Н. М., Гринюк Д. А., Оробей И. О. **Анализ динамических характеристик и динамических погрешностей преобразователя измерения параметров впитывания** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 96–99.

В статье представлены результаты анализа динамических свойств первичного преобразователя для определения параметров впитывания. При проведении экспериментальных исследований был выполнен ряд опытов по изучению свойств емкостного преобразователя, параметры которого определялись динамикой пропитки

фильтровальной бумаги на различных частотах. На основании полученных данных определены зависимости параметров схемы замещения измерительной ячейки от частоты. Проведен анализ динамических погрешностей измерительных схем. Результаты данного исследования позволяют выбрать схему измерительной цепи параметров емкостного преобразователя, которая, в свою очередь, обеспечит повышение точности прибора непрерывного контроля процесса смачивания.

Табл. 1. Ил. 11. Библиогр. – 5 назв.

УДК 65.011.56

Абрамов Г. В., Коробова Л. А., Матыцина И. А., Карпович Д. С., Шуленков Р. А. **Разработка математической модели для распознавания звуковых сигналов** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 100–103.

В статье рассматриваются применение нечеткой логики для распознавания звуковых сигналов. Источником звукового сигнала является астматический, туберкулезный кашли. Производится математический и программный анализ выборок кашлевых звуковых фрагментов. Формируются лингвистические переменные и формулируются функции принадлежности для математических переменных анализа фрагментов данных. В статье детально описывается алгоритм формирования нечетких выводов, а также применение различных алгоритмов нечетких регуляторов (Мамдани). Разработано программное и аппаратное решение для диагностирования и анализа звуковой дорожки кашля пациента с формированием заключения о классификации кашля и дальнейшем (амбулаторном) лечении.

Табл. 5. Ил. 5. Библиогр. – 7 назв.

УДК 621.391.26

Дятко А. А., Костромицкий С. М., Шумский П. Н. **Моделирование типовых траекторий летательных аппаратов для полунатурных испытаний** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 104–106.

Рассмотрен метод расчета координат типовых траекторий летательного аппарата в дискретные моменты времени, используемых при моделировании работы радиолокационных станций при полунатурном испытании их работоспособности. Метод заключается в определении координат требуемой траектории, когда ее плоскость параллельна плоскости XU декартовой системы координат XYZ и находится относительно ее на нулевой высоте. Координаты требуемого положения траектории в пространстве могут быть получены путем поворота расчетной траектории вокруг соответствующих координатных осей на заданные углы и смещения ее в нужную область пространства.

Ил. 2. Библиогр. – 2 назв.

УДК 621.391.26

Ярмолик С. Н., Дятко А. А., Шумский П. Н., Храменков А. С. **Оценка распределения решающей статистики в задачах радиолокационного обнаружения и распознавания объектов** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 107–109.

В работе представлен анализ способов оценивания плотности вероятности квадратичного функционала от комплексных гауссовых отсчетов, характеризующихся заданными корреляционными свойствами. Приведены результаты математического моделирования аппроксимирующих рядов, основанных на системах ортогональных полиномов, показаны их достоинства и недостатки. Проанализирован способ формирования дискретного распределения квадратичного функционала, основанный на преобразовании его характеристической функции. Результаты оценивания плотности вероятности квадратичной формы, получаемые на основе рассмотренной методики, целесообразно использовать при решении задач радиолокационного обнаружения и распознавания.

Ил. 4. Библиогр. – 6 назв.

УДК 531.19

Бокун Г. С., Гапанюк Д. В. **Алгоритм прогонки для расчета импеданса твердого электролита** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 110–112.

Предложен новый метод прогонки, пригодный, в отличие от известного, для решения систем уравнений с матрицами Якоби, состоящими из $2n + 1$ диагоналей. Суть метода состоит в том, что выбираются пробные значения n неизвестных и по невязкам последних n уравнений системы находится ее точное решение. Показано, что новый алгоритм решения систем уравнений содержит ряд преимуществ, реализованных на примере построения программы расчета электрического импеданса токопроводящей керамики.

Библиогр. – 5 назв.

УДК 004.056.55

Пацей Н. В. **Исследование корректирующей способности конструкций двоичных кодов с низкой плотностью проверок на четность основанных на матрицах перестановок** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 113–115.

В статье рассматриваются некоторые конструкции двоичных кодов с низкой плотностью проверок на четность, построенные на основе проверочных матриц перестановок. Представлены результаты моделирования кодовых конструкций для итеративного декодирования по алгоритму минимальных сумм. Обсуждается влияние увеличения количества перестановок в проверочной матрице на корректирующие способности низкоплотностного кода.

Табл. 1. Ил. 2. Библиогр. – 7 назв.

УДК 681.3.053

Виткова М. Ф., Романенко Д. М. **Адаптивная система кодирования (декодирования) на основе многомерных итеративных кодов и многопороговых декодеров** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 116–120.

В статье рассмотрены основные параметры качества бинарного цифрового канала связи, способы их измерения, достоинства и недостатки. Представлена общая структурная схема разработанной адаптивной системы, схемы блоков кодирования, декодирования и блока анализа. Описан принцип действия адаптивной системы, назначение и особенности каждого из блоков, а также их достоинства и недостатки. Ключевой особенностью разработанной адаптивной системы является возможность расчета параметра BER в режиме передачи реального трафика с последующим выбором наиболее подходящего корректирующего кода.

Табл. 4. Ил. 4. Библиогр. – 5 назв.

УДК 003.26+347.78

Шутько Н. П. **Особенности и формальное описание процесса осаждения секретной информации в текстовые документы на основе стеганографии** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 121–124.

Объект исследования данной статьи – текстовые документы, обрабатываемые с помощью известных текстовых процессоров и редакторов, а также коды компьютерных программ и файлы баз данных. Описаны основы математического моделирования процесса осаждения тайной авторской информации в указанные типы документов на основе текстовой стеганографии. Тайная информация предназначена для защиты прав интеллектуальной собственности. Осаждение информации предусматривает изменение цветовых координат символов текста. Основу математической модели составляют пространственные координаты и цветовые параметры пикселей, формирующих растр текста.

Ил. 3. Библиогр. – 10 назв.

УДК 004.021

Колесников В. Л., Бракович А. И., Жук Я. А. **Фашификация и дефашификация данных при решении многокритериальных задач** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 125–127.

В статье представлена математическая основа фашификации и дефашификации данных при решении многокритериальных задач, описана программная реализация анализа наблюдений за производственным комплексом. Разработанное программное средство позволяет формализовать и решать многокритериальные задачи с помощью нечетких множеств и экспоненциальных функций принадлежности.

Ил. 1. Библиогр. – 2 назв.

УДК 004.021

Колесников В. Л., Бракович А. И., Жук Я. А. **Решение многокритериальных задач, оптимальных по Парето** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 128–130.

В статье представлена математическая и программная реализация процесса построения диаграммы Парето на основании набора технологических режимов и требований к показателям качества, приведена блок-схема алгоритма поиска Парето-оптимальных решений. Разработанное программное средство позволяет выполнить поиск Парето-оптимальных векторов и их оценку для выбора оптимального технологического режима.

Ил. 2. Библиогр. – 1 назв.

УДК 512.08,681.55

Герман О. В., Садовская О. И., Герман Ю. О. **Составление плана работ на основе системы дизъюнктов разностного типа** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 131–134.

В статье рассмотрена задача построения расписания выполнения работ на основе формальной модели, представленной системой дизъюнктов разностного типа. С помощью систем дизъюнктов разностного типа можно описывать поведение динамических систем, например дискретных систем управления, интеллектуальных роботов, систем планирования работ и др. Временной параметр играет роль временного шага. Представлен общий принцип решения вместе с соответствующей иллюстрацией его применения.

Библиогр. – 3 назв.

УДК 004.786:519.711.3

Кобайло А. С. **Применение теории синтеза вычислительных систем реального времени для моделирования физических процессов на примере радиосигналов** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 135–137.

Рассмотрены возможности использования элементов теории синтеза вычислительных систем реального времени (ТСВСПВ) для моделирования физических процессов. Применение положений теории показано на примере синтеза специализированного вычислительного устройства для формирования радиосигналов в составе автоматизированной системы полунатурных испытаний радиотехнических средств или тренажеров радиооператоров. При этом использована математическая модель радиосигналов, приведенная к виду, допускающему графовое представление.

Ил. 1. Библиогр. – 3 назв.

УДК 681.325.3

Шиман Д. В., Булова Ю. О. **Программное средство для исследования характеристик кодов, направленных на исправление ошибок типа «стирание»** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 138–141.

В статье описывается функциональная часть программного средства для исследования корректирующей способности LT- и разработанных авторами ранее LTM- и P-кодов для исправления ошибок типа «стирание». Программное средство рассчитывает избыточность выбранных кодов для испытания и отображает полученные результаты в графической форме. Экспериментально рассчитывается средняя избыточность для моделируемых кодов стираний.

Ил. 8. Библиогр. – 5 назв.

УДК 681.391

Пласковицкий В. А., Урбанович П. П. **Использование абстрактных синтаксических деревьев для обфускации кода** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 142–146.

В статье рассмотрено практическое использование абстрактных синтаксических деревьев для обфускации программного кода на примере языка Python. При этом изучены возможности изменения строк, чисел, функций, имен объектов, операторов. Проведен анализ механизма обработки кода, сделаны замеры скорости выполнения в зависимости от типа обрабатываемых конструкций. Изучен этап обратной сборки программы на основе полученного дерева. Рассмотрена интеграция полученного обработчика с авторскими алгоритмами обфускации кода.

Табл. 4. Ил. 3. Библиогр. – 6 назв.

УДК 004.3

Жиляк Н. А., Цыганенко Н. П. **Шифрование XML-документа средствами .NET** // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 147–149.

На основе проведенного исследования по изучению средств компании Microsoft для шифрования XML сформированы необходимые требования к параметрам и функциональным возможностям разрабатываемого программного средства для шифрования XML-документов. Основными недостатками средств платформы .Net являются отсутствие высокоуровневой поддержки, невозможность выбора алгоритма шифрования и закрытый исходный код алгоритмов. Предложенные этапы для улучшения ситуации в сфере шифрования XML-данных легли в основу для проектирования и разработки реального программного продукта.

Библиогр. – 4 назв.

RESUME

.....

УДК 517.935.2+519.71

Marchenko V. M., Borkovskaya I. M., Pyzhcova O. N. **The method of states space in hybrid discrete-continuous and hybrid differential-difference systems** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 3–6.

In this paper, we present an example of an economics model of a hybrid discrete-continuous system that can be reduced to a hybrid differential-difference one. We discuss approaches to study qualitative control theory problems for such a system based on the analysis of its states space. Several game problems of controllability are formulated.

Fig. 2. Bibliogr. – 17 sources.

УДК 532.517

Volk A. M. **The hydrodynamics of liquid film on the cylinder surface** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 7–9.

Mathematical modeling of the interaction of the phases at the film fluid motion on cylindrical surfaces in the processes of phase separation and heat and mass transfer are determine the optimum modes, the ratio between the geometric parameters and load phases. The film movement of the liquid phase under the influence of the gravitational field of mass forces and swirling gas flow on the surface of the cylinder is theoretically studied. There is obtained differential equations of motion of the film under the influence of swirling gas flow. Exact solutions for the components of velocity given to adherence of the film on the surface of a permeable cylinder and equality of shear stresses at the interface are obtained. There is found the film thickness, the speed at the interface, and the velocity gradient at the cylinder surface. The resulting mathematical model permits to determine the mode of the film and take into account in its hydrodynamics in the study of separation processes and heat and mass transfer.

Fig. 1. Bibliogr. – 6 sources.

УДК 519.624

Solovjova I. F. **Impact locations of the boundary layers on the solution of nonlinear boundary value problems with a small parameter at the highest derivative** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 10–12.

Work is devoted to the study of nonlinear boundary value problems with a small parameter at the highest derivative and emerging with the boundary layers. For these tasks, the proposed modification methods adjustment. If the boundary layer is on the left end of the specified interval, the method of zeroing in reverse, if on the right, then based on direct multiple adjustment. In the case when the boundary layer occurs at both ends of the segment, we propose a method of multiple two-way adjustment. A comparison of these methods and show the advantage of the latter method for solving boundary value problems with a boundary layer. An example of solving the boundary value problem with the boundary layer, the results of which are given solutions in the form of a table of basic values.

Bibliogr. – 2 sources.

УДК 514.76

Mozhey N. P. **Cohomologies three-dimensional homogeneous spaces** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-mathematical Sciences and Informatics. P. 13–18.

In this paper we study three-dimensional homogeneous manifolds. Also we describe cohomology this manifolds. The local classification of homogeneous spaces is equivalent to the description of effective pairs of Lie algebras. We described all invariant symmetric nondegenerate bilinear forms on those homogeneous spaces. Also we have found curvature Riemannian (pseudo-Riemannian) three-dimensional homogeneous spaces. We restricted ourselves to the case of a non-trivial stationary subgroup, all other homogeneous spaces in this dimension are three-dimensional Lie groups. We used the algebraic approach for description of manifolds, methods of the theory of Lie groups and Lie algebras and homogeneous spaces.

Bibliogr. – 6 sources.

УДК 517.977

Yakimenka A. A. **Limiting delay in one neutral-type equation** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 19–21.

In this paper we study the problem of finding the limiting delay in one scalar equation of neutral type is studying. Investigate the question of the stability of this equation depending on its parameters, including on the delay. Found limit delay for which is lost stability property. The results can be applied in the study of the stability of systems of neutral type.

Bibliogr. – 6 sources.

УДК 531.19

Bokun G. S., Vikhrenko V. S., Salkus T. **Estimation of the frequency dependence of the resistivity in the inter- and intragrain areas of conductive ceramics** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 22–25.

The lattice fluid model is used to describe the transport processes in ceramic solids characterized by spatial heterogeneity caused by their granular structure. The relations that allow studying the equilibrium distribution of the particle concentration in the grain boundaries region are deduced. The kinetic equations describing the diffusion fluxes in the presence of an inhomogeneous distribution of the concentration are formulated. Using the Laplace transform in time, the frequency dependence of the electrical resistivity is obtained in inter- and intragrain areas of ceramics.

Bibliogr. – 3 sources.

УДК 531.19

Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. **Concentration distribution of mobile particles in the area of intergrain boundaries of solid electrolytes** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 26–28.

The system of equations describing the distribution of particle concentration in the area of intergrain boundaries of conductive ceramics in the framework of the lattice systems theory is obtained. The charge density profiles obtained by stepwise and exponential distributions of the crystal potential are investigated. The appearance of two capacitor layers as well as the identity of their amplitudes in both cases is noted. It is shown with stepwise distribution of the crystalline potential width capacitor layers independent of the step form.

Fig. 5. Bibliogr. – 7 sources.

УДК 531.19

Groda Ya. G. **The diffusion coefficient of lattice fluid with interaction in the saddle point on the simple cubic lattice: the results of the MCS and the superposition approximation** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 29–31.

The diffusion process of the lattice fluid with additional interaction in the saddle point on a body-centered cubic lattice is considered. The technique of obtaining an analytic expression for the jump diffusion coefficient of the lattice fluid is proposed. The jump diffusion coefficient of the system with nearest neighbor attractive (repulsive) interaction and interaction in the saddle point of the same energy is calculated. The analytical results are compared with Monte Carlo simulation data.

Fig. 2. Bibliogr. – 8 sources.

УДК 531.19

Bokun G. S. **Asymptotic solution of the Nernst-Planck-Poisson equation for the ionic crystal** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 32–34.

Diffusion in a system consisting of two solid phases with different concentration of charge carriers is considered. The integral Laplace transform in time and the spatial Fourier transform are used for solving the diffusion equations. As a result, we obtain an asymptotic solution for the change with time of the potential difference between the two phases formed due to the diffusive transition layer. It is shown that with the increase of size of the transition layer and the alignment of the concentration in the initial phases the potential difference tends to a constant limiting value.

Bibliogr. – 9 sources.

УДК 531.19

Lasovsky R. N. **Nanostructuring of intercalation systems in an external field** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 35–37.

A closed system of differential-difference evolution equations for the concentration field of the lattice system in the presence of an external field is obtained. The kinetics of two- and three-dimensional lattice systems with a symmetric arrangement of the "inoculating" areas is investigated. It is shown that initially there is a series of narrow condensed central bands that are absorbed over time by the wide condensed zone formed in the direction of the external field. The emergence of the central bands and their rate of extinction depend on the intensity of the external field.

Fig. 2. Bibliogr. – 9 sources.

УДК 539.12

Klenitsky D. V. **The effect of particle size on the speed of sound in the hadron resonance gas** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 38–40.

We study the effect of the particle size on the speed of sound in the hadron resonance gas which consists of hadronic resonances with masses $M < 2$ GeV. We have calculated the pressure, the energy density and the entropy density in the hadron resonance gas taking into account the excluded volume (the volume occupied by the particles). The

excluded volume is taken into account using the procedure proposed by Van der Waals, generalized to the case of a variable number of particles in the system. Using thermodynamic quantities calculated taking into account the excluded volume, we determined the speed of sound in the gas and the results compared with the velocity of sound in a gas which consists of point particles. At high temperatures accounting the particle size leads to a significant increase.

Fig. 2. Bibliogr. – 7 sources.

УДК 531.19;539.682

Narkevich I. I., Farafontova E. V., Klyshko V. B. **Complete system of equations for the calculation of the free energy of the system, taking into account the inhomogeneous distribution of molecules in microcells of the method of conditional distributions** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 41–43.

With the help of a two-level molecular-statistical approach, we have developed a methodology for calculating for the average energy of interaction of the molecule of the environment with all other molecules of the molecular system. This procedure involves analytical calculations to account for the interaction with molecules at large distances and numerical calculations for the nearest neighbors (first and second). As a result, we have compiled a complete system of integral and algebraic equations. Its solution allows us to calculate the free energy of a molecular system.

Fig. 1. Bibliogr. – 3 sources.

УДК 535.37+541.65+543.4

Klenitsky D. V., Kruk M. M. **Analysis of the nonplanar distortions of the free base corrole macrocycle** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 44–46.

The analysis of the nonplanar distortions for two NH tautomers of the corrole free base has been carried out. The least-square deviations from the macrocycle mean plane for the tetrapyrrolic macrocycle atoms have been determined. The mean macrocycle plane is assigned as a plane with the smallest least-square deviations of C1, C4, C5, C6, C9, C16, and C19 atoms. Both NH tautomers have nonplanar distortions of the wave-type, but the magnitude of the deviations was found to be substantially different. Both pyrrolic and pyrrolic rings are tilted relatively to the mean macrocycle plane due to the steric hindrances in the tetrapyrrolic macrocycle core, and the tendency to the pyramidalization been revealed for the pyrrolic nitrogens.

Fig. 1. Bibliogr. – 7 sources.

УДК 535.34

Kornienko T. A., Miksyuk Yu. I., Saechnikov K. A. **Propagation and interaction of light beams in photorefractive crystals of bismuth titanate** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 47–49.

The self-focusing processes of Gaussian light fields and the formation of screening soliton-like structures in photorefractive $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (BTO) crystals with $[111]$, $[11-2]$, $[1-10]$ orientations have been studied experimentally. The principal scenario of the light-beam transverse profile transformation has been demonstrated; the exposure required to form a stable soliton-like structure has been established. The optimum parameters for incoherent interaction of two Gaussian light beams on orthogonal geometry of their propagation within the cubic photorefractive crystal of bismuth titanate under the effect of an external electric field have been selected and their use has been illustrated.

Fig. 4. Bibliogr. – 3 sources.

УДК 621.391

Nikitionok V. I., Vetokhin S. S. **Superfast nonparametric double channel detector of weak optical signals** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 50–52.

The operation and quality indicators of a double channel nonparametric detector of weak optical signals, which is based on Wald – Wolfowitz runs test, is described. The detector provides a constant error probability under changing background intensity. The ability of decision making on signal detection within a minimized time interval is proved under still continuing simple Poisson sequences (that means just "superfast"). The structural scheme of the detector is shown.

Fig. 1. Bibliogr. – 6 sources.

УДК 621.378.325

Rudik K. I., Chernuyvsky V. A. **The amplitude and phase anisotropy of the solutions of complex molecules upon laser excitation** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 53–55.

The amplitude and phase anisotropy of a dye solution induced by linearly-polarized radiation has been experimentally investigated by the radiation has been experimentally investigated by the method of light probing. It is shown that, in optical respect, this dye solution excited by linearly-polarized radiation represents a single-axis negative crystal whose optical axis is in line with voltage vector of the electric field intensity vector of the exciting light wave. With the help of the Stokes parameters of the polarization ellipse of the amplified probing radiation are received.

From the obtained parameters of the ellipse the change in the refractive index $\Delta n = 10^{-5}$ of the excited dye solution has been calculated.

Fig. 3. Bibliogr. – 7 sources.

УДК 539.19

Kuzmitsky V. A. **An exact algebraic method in the inverse problem for complicated Fermi resonance or its vibronic analogue** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 56–58.

We found an exact solution for the problem of reconstruction of coupling matrix elements between the "bright" and "dark" states b_i and unperturbed energy levels a_i ($i = 1, 2, \dots, n - 1$); it is suggested that the observed energies e_k and transition intensities I_k ($k = 1, 2, \dots, n$) into resulting "mixed" states are known. The algorithm uses algebraic methods and bases on finding of eigenvectors of Hamiltonian matrices of a particular form, and its modified version employs the elementary Jacobi rotations. For three porphyrin compounds, which manifest the non-adiabatic vibronic interaction in the region of electronic 0–0-transition $S_0 \rightarrow S_2$, energies of the excited electronic state S_2 and of the states of vibrational sub-levels a_i of the electronic state S_1 was evaluated, as well as the coupling matrix elements b_i between these states.

Fig. 2. Bibliogr. – 5 sources.

УДК 539.19

Valkovich D. I., Kuzmitsky V. A., Solovyov K. N. **Electronically excited states of the tetrapyrrole compounds: quantum chemical calculation by the INDO/Sm method** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 59–61.

For molecules of tetrapyrroles, the accuracy of the energy values of the excited electronic states in quantum chemical calculations at the *ab initio* or DFT/TDDFT level does not exceed the accuracy of semi-empirical methods. In this regard, for the porphin and Mg porphin molecules, we have undertaken variation of the parameters of the INDO/S method for both one-electron and two-electron integrals, and, on this basis, proposed a modified parameterization, INDO/Sm; it has been shown that the experimental position of the Q and B transitions in the electronic spectra is reproduced by INDO/Sm calculations with an accuracy of ca. 300 cm^{-1} . Using the INDO/Sm method, we calculated the electronic spectra of tetrapyrrole fundamental structures, including chlorin, bacteriochlorin, tetraazaporphin; results for the energy of Q levels are consistent with the experimental data with an accuracy of ca. $300\text{--}700 \text{ cm}^{-1}$, whereas the INDO/S calculation accuracy is ca. 3000 cm^{-1} . In the framework of the INDO/Sm method, we have carried out extensive calculations of several series of tetrapyrrole compounds, in particular, phthalocyanine analogues with five-membered heteroaromatic rings, phenyl substituted porphyrazines, bacteriochlorophyll analogues and others. The results obtained, together with experimental data, enabled establishing significant spectral-structural correlations.

Bibliogr. – 7 sources.

УДК 535.36;535.37;584.4;537.26

Shishonok E. M., Luhn V. G. **XRD analysis and strength investigations of synthetic diamond** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 62–64.

Using XRD analysis, powders of synthetic diamond (SD) were investigated. The sets of powders possessed various grain sizes, different impurity contents and strength and were synthesized during one cycle of synthesis. XRD patterns of the powder sets were compared with standard of natural diamond. As established, lines of the patterns of SD were presented by finely resolved multiplets which testified to distortions of CD crystal lattice. A connection of the distortion's character with strength and morphology of powders of grains is established

Fig. 5. Bibliogr. – 1 source.

УДК 674.055:621.934(043.3)

Chayevski V. V., Grishkevich A. A., Garanin V. N., Uglov V. V., Kuleshov A. K. **Influence ZrN- and Mo-N-coatings on shear knife wear of a milling tool when cutting chipboard** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 65–67.

The results of high-energy processing shear knives milling tool by method PVD are presented in the article. It is established that durability period of modified milling tool with formed ZrN-, Mo-N-coatings on shear knives when cutting laminated chipboard increases to 70%. Type of bare tool wear are determined as an abrasive. Mo-N-coatings change the type of shear knife wear from mechanical dispersion in conjunction with an abrasive to oxidative when cutting laminated chipboard.

Tab. 1. Fig. 3. Bibliogr. – 5 sources.

УДК 539.213.2

Dolgiy V. K., Pochtenny A. E. **Modeling adsorption-resistive response in the sensory layers of organic semiconductors** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 68–70.

The proposed theoretical model of adsorption-resistive response impurity organic semiconductor in comparison with experimental data, allowed to establish the mechanism of sensor response to nitrogen dioxide films of ion-doped

copper phthalocyanine. It is shown that the ion-implanted impurity increases touch response, if the electronic states of the impurity located on the energy scale below their own, and the state of the recorded gas – between its own states and ion-implanted impurity. Found that the maximum touch response observed at a concentration of ion-implanted impurity corresponding to the transition from private to extrinsic impurity organic semiconductor.

Fig. 5. Bibliogr. – 3 sources.

УДК 537.633.2

Madyarov V. R. **VHF-diagnostics of semiconductors on the basis of charge carrier transfer kinetic model** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 71–73.

On the basis of solution to the Boltzmann equation the expression for VHF Hall mobility is obtained via semiconductor band structure parameters. It is shown that irrespective of the transverse sizes of the sample the Hall mobility can be found by measuring conductivity of the semiconductor sample in two mutually transverse directions. Experimental check has shown satisfactory conformity of dielectric permeability values calculated using kinetic model with that obtained by probe wave phase shift measurements in the frequency region of 30–80 GHz.

Fig. 3. Bibliogr. – 5 sources.

УДК 539.1.06:539.23.234

Bobrovich O. G., Tashlykov I. S., Tulev V. V. **Influence of the parameters of ion-assisted deposition on the formation Me/Si structures** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 74–76.

By RBS elemental composition of Co, Mo, W coatings deposited on (100)Si substrate in the condition of ion (Co^+ , Mo^+ , W^+) assisting have been investigated. Thickness of the coatings are increases with the decrease of the accelerating voltage for assisting Co^+ , Mo^+ , W^+ ions from 20 to 7 kV and depends on the relationship of the flux density of ions J_i to the flux density of deposited atoms J_A (J_i / J_A) and type deposited on Si metal. It is established that the optimal ratio of J_i / J_A at which is reached the maximum thickness Co coating and Mo coating is 0,06 and for W coating – 0,04.

Fig. 3. Bibliogr. – 8 sources.

УДК 539.1.06:539.23.234

Tulev V. V., Tashlykov I. S., Litvinov D. A. **Influence of deposition parameters on the thickness of the modified layer for dynamic atomic mixing Pd/Fe-structures** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 77–79.

Rutherford backscattering and RUMP simulation programmer have been applied to investigate composition of Pd/Fe system prepared using dynamic atomic deposition process when deposition of Pd thin film on Fe (99,5%) substrate was assisted with 6 keV Ar^+ ions irradiation. The thickness of Pd film was $\sim(14-23)$ nm. It was found, that the thickness of coating depends on parameter I/A (ratio the number I of assisting ions to the number A atoms deposited coating).

Fig. 6. Bibliogr. – 8 sources.

УДК 535.374:537.6:621

Soika A. K., Shepelevich V. G. **Long-term negative magnetoplastic effect in metals caused by exposure to a strong pulsed magnetic field** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 80–82.

The paper presents the results of experimental studies of the influence of strong pulsed magnetic fields with amplitude of induction from 5 to 40 T on the mechanical properties of the foils Al, Zn, Sn and alloy Al – Zn. In a foil of Al and Al – Zn magnetoplastic detected negative effect from the magnetic memory, comprising the significant (50%) and appear to irreversibly increase the microhardness of the specimens after exposure to a single unipolar pulse magnetic field. According to the authors, detected features magnetoplastic effect in metals can not be explained within the concept of spin-dependent processes in solids responsible for magnetoplastic phenomena in ionic crystals.

Fig. 4. Bibliogr. – 15 sources.

УДК 004.021:004.942

Akinsheva I. V., Kuzmitski I. F. **Features integrated evaluation multidimensional objects and control algorithms** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 83–86.

This article discusses the procedure for optimizing multidimensional objects chemical industry – polycondensation reactors. According to the technology, the polycondensation takes place at high temperatures and low pressures, which means high cost of electricity. Thus, the purpose of the study is to develop a methodology to determine the optimal parameter values of the polycondensation process. An algorithm for finding optimal values of the control variables, based on a theory of the calculus of variations and optimization using integral criterion polycondensation process. When implementing algorithms posed consuming task associated with a lot of transformations. Therefore used a number of assumptions that the solution of the problem possible. Evaluation of the assumptions proved negli-

gible effect on the accuracy of the optimization problem. Developed mathematical apparatus gives the prerequisites for the synthesis of adaptive control system of the object under study.

Fig. 1. Bibliogr. – 4 sources.

УДК 62.50

Lapeta A. V., Kuzmitski I. F. **Synthesis of control systems with delay by embedding theory based on algorithms of approximation of functions with deviating argument** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 87–91.

The paper deals with the problems related to the process of production of extrusion devices. It goes about new methods for the synthesis of process control algorithms by using the system embedding theory. In the paper, we show how to apply a mechanical manipulator process to obtain more stable physical and mechanical characteristics of the product in maintaining the optimal use of the production space.

Tab. 2. Bibliogr. – 5 sources.

УДК 681.3

Suhorukova I. H., Hryniuk D. A., Orobei I. O. **Adaptation criterion series for use in process control** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 92–95.

There was researched the possibility of using the runs test for detecting nonstationarity measuring channels industrial programmable logic controllers. Measurement data of the controller was treated with different type filter. Runs test must be adapted to the use of the properties of the measurement channels. Nonlinear properties of the measuring channels can deform result work runs test. Article contains an analysis of noise in measuring channels as a normal process. Temporal trends in raw data from the controller were analyzed using MatLAB. Data transfer was performed using OPC technology.

Fig. 12. Bibliogr. – 5 sources.

УДК 621.396

Oliferovich N. M., Hryniuk D. A., Orobei I. O. **Analysis of dynamic characteristics and dynamic errors of transducer measurement parameters soaking** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 96–99.

In the article are presented the results of the analysis of the dynamic properties of primary device for determine of characteristic of capillary soaking. In carrying out experimental studies a series of experiments was carried out to study the properties of the capacitance transducer. Parameters components of the capacitance transducer determine the dynamics of the soaking of filter paper at different frequencies. Based on these findings have been identified dependencies of the parameters of the equivalent circuit of the measuring cell from the frequency. Analysed the dynamic errors of measuring circuits. The results of this study allow to select the diagram of measuring circuits of capacitance transducer, which in turn, will improve the accuracy of device continuous monitoring wetting process.

Tab. 1. Fig. 11. Bibliogr. – 5 sources.

УДК 65.011.56

Abramov G. V., Korobova L. A., Matytsina I. A., Karpovich D. S., Shulenkov R. A. **Development of mathematical models for the recognition of sound signals** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 100–103.

The article discusses the use of fuzzy logic to detect sounds. Sound source is asthmatic, tuberculosis coughs. Made math and analysis software samples cough sound fragments. Formed linguistic variables and the membership functions are formulated for mathematical variables fragment analysis data. The article describes in detail the algorithm for forming fuzzy conclusions as well as the use of various algorithms of fuzzy controllers (Mamdani). Developed software and hardware solution for the diagnosis and analysis track coughing patient with forming an opinion on the classification of cough and further (outpatient) treatment.

Tab. 5. Fig. 5. Bibliogr. – 7 sources.

УДК 621.391.26

Dyatko A. A., Kostromitsky S. M., Shumsky P. N. **Modeling of typical aircraft trajectories for seminatural tests** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 104–106.

Describes the method of calculating the coordinates of typical aircraft trajectories in the discrete moments of time, which used for modelling of work radar stations at seminatural test of their working capacity. The method consists in definition of coordinates of a demanded trajectory when its plane is parallel to a plane XY of the Cartesian system of coordinates XYZ and is rather it at zero height. The coordinates corresponding to demanded position of a trajectory in space, can be received by turn of a settlement trajectory round corresponding coordinate axes on set corners and its displacement in the necessary area of space.

Fig. 2. Bibliogr. – 2 sources.

УДК 621.391.26

Yarmolik S. N., Dyatko A. A., Shumsky P. N., Chramenkov A. S. **Estimation of allocation of solving statistics in tasks of radar-tracking detection and recognition of objects** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 107–109.

In article the analysis of methods of estimation of probability density of a square functional from the complex Gaussian countings characterized by the given correlative properties is produced. Results of mathematical modeling of the approximating rows based on systems of orthogonal polynomials are resulted, their merits and demerits are shown. The method of formation of discontinuous distribution of the square functional, based on conversion of its characteristic function is analyzed. The considered method provides demanded quality of estimation and can be used at the analysis of solving statistics in tasks of radar-tracking detection and recognition of objects.

Fig. 4. Bibliogr. – 6 sources.

УДК 531.19

Bokun G. S., Gapanjuk D. V. **The algorithm to calculate the impedance of the solid electrolyte** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 110–112.

A new method suitable, in contrast to the known, to solve systems of linear algebraic equations with matrices consisting of $2n + 1$ diagonals is suggested. The method consists in that the selected test values of n unknowns are chosen, and discrepancies of the last n equations of the system are used to find the exact solution of the system. It is shown that a new algorithm for solving systems of equations contains a number of advantages realized by constructing the program for calculating the electrical impedance of the conductive ceramics.

Bibliogr. – 5 sources.

УДК 004.056.55

Patsey N. V. **Study designs correcting capability of binary low density parity check codes based on matrix permutation** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 113–115.

This article discusses some versions of binary low density parity check codes built on the basis of permutation matrices. The results of code designs simulation for iterative min-sum decoding algorithm are presented. The effect of influence increasing permutations number in the code check matrix on correction capabilities discussed.

Tab. 1. Fig. 2. Bibliogr. – 7 sources.

УДК 681.3.053

Vitkova M. F., Romanenko D. M. **Adaptive coding (decoding) system based on multidimensional iterative codes and multithreshold decoders** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 116–120.

The article describes main quality parameters of the binary digital communication channel, methods of measurement, advantages and disadvantages. A general structural scheme of the developed system, schemes of coding, decoding and analysis blocks are presented. The operation principle of a such adaptive system, the purpose and particular qualities of each block, and also advantage and disadvantages are described. The main features of the developed adaptive system is the possibility to calculate the BER in the transmission mode of the real traffic with a choice of the most suitable correcting code.

Tab. 4. Fig. 4. Bibliogr. – 5 sources.

УДК 003.26+347.78

Shutko N. P. **Peculiarities and formal description of the embedding process of the secret information in text documents based on steganography** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 121–124.

The object of the research of this article – text documents that are processed with the help of some word processors and editors, as well as codes of software and database files. The basics of mathematical modeling of the embedding process of the secret author information in these types of documents based on text steganography are described. Secret information is intended to protect intellectual property rights. An Embedding provides changing the color coordinates of characters in the text. The base of mathematical model is the spatial coordinates and color values of pixels forming the raster of the text.

Fig. 3. Bibliogr. – 10 sources.

УДК 004.021

Kolesnikov V. L., Brakovich A. I., Zhuk Ya. A. **Fuzzification and defuzzification data for solving multiobjective problems** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 125–127.

The article describes the mathematical basis of fuzzification and defuzzification data for solving multiobjective problems and the software implementation analysis of production complex observations. The developed software tool allows to formalize and solve the problem using multi-criteria fuzzy sets and exponential membership functions.

Fig. 1. Bibliogr. – 2 sources.

УДК 004.021

Kolesnikov V. L., Brakovich A. I., Zhuk Ya. A. **Decision of Pareto optimal multicriteria problem** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 128–130.

The article describes the mathematical and software implementation process of building a Pareto chart based on a set of technological regimes and requirements for quality indicators. In article is shown a block diagram of the Pareto-optimal solutions search. The developed software tool allows to search for Pareto-optimal vectors and their evaluation for the optimal technological regime.

Fig. 2. Bibliogr. – 1 source.

УДК 512.8,681.55

German O. V., Sadovskaja O. I., German Yu. O. **Making a job performance plan on the basis of the differential type disjuncts** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 131–134.

The paper is devoted to the scheduling the set of jobs on the basis of one formal model represented by differential type disjuncts. With the help of the formal model one could describe the behavior of dynamic systems, e. g. discrete control systems, intelligent robotics systems, job planning systems and so forth. The time parameter stands for some time step. A common approach to solving the systems under consideration is suggested with the necessary illustrative explanation. It develops a technique of solution of the logical equation systems with a time parameter which admits not obligatory adjacent time steps.

Bibliogr. – 3 sources.

УДК 004.786:519.711.3

Kobaylo A. S. **Theory of computing systems for real-time simulation of physical processes** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 135–137.

The possibilities of using the elements of the theory of synthesis of computing real-time systems for modeling physical processes. Application of the theory illustrated by the synthesis of specialized computing device for generating radio signals in the automated system of HIL testing of radio aids or radiooperatorov simulators. The author used a mathematical model of radio, reduced to the form that admits graph representation.

Fig. 1. Bibliogr. – 3 sources.

УДК 681.325.3

Shiman D. V., Bulova Yu. O. **Software tool for investigating the characteristics of code designed to fix errors like "erasing"** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 138–141.

This paper describes the functional part of a software tool for the error-correcting capability investigation of LT- and LTM- and P-codes developed by the authors previously. This codes are applied for error correction of the "erasure". Software tool calculates the redundancy for the selected code and displays the results in graphical form. Experimentally calculated average redundancy for simulated erasure codes.

Fig. 8. Bibliogr. – 5 sources.

УДК 681.391

Plaskovitsky V. A., Urbanovich P. P. **Use abstract syntax tree to obfuscate code** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 142–146.

This paper considers the practical application of abstract syntax trees to obfuscate the example code in Python. The possibility of changing strings, numbers, functions, names of objects, operators are studied. The analysis of the mechanism for handling code execution speed measurements are made, depending on the type of processed structures. Studied reassembly step program based on the resulting tree. Considered integration with the author obtained handler code obfuscation algorithms.

Tab. 4. Fig. 3. Bibliogr. – 6 sources.

УДК 004.3

Zhilyak N. A., Tsiganenko N. P. **Encrypt XML document means .Net** // Proceedings of BSTU. 2014. No. 6: Physical-Mathematical Sciences and Informatics. P. 147–149.

On the basis of studies of the company's funds for Microsoft XML encryption formed the necessary requirements for the parameters and functionality of the developed software tools for encrypting XML documents. The main disadvantages of funds platform. Net are the lack of high-level support, the inability to select an encryption algorithm and closed source algorithms. Proposed steps to improve the situation in the XML encryption data formed the basis for the design and development of real software.

Bibliogr. – 4 sources.

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ	3
МАТЕМАТИКА	3
Марченко В. М., Борковская И. М., Пыжкова О. Н. Метод пространства состояний в дискретно-непрерывных и дифференциально-разностных системах	3
Волк А. М. Гидродинамика жидкой пленки на цилиндрической поверхности	7
Соловьева И. Ф. Влияние пограничного слоя на решение нелинейных граничных задач с малым параметром при старшей производной	10
Можей Н. П. Когомологии трехмерных однородных пространств	13
Якименко А. А. Предельное запаздывание в одном уравнении нейтрального типа	19
МЕХАНИКА.....	22
Бокун Г. С., Вихренко В. С., Шалкус Т. Оценка частотной зависимости электросопротивления в межзеренных и внутризеренных областях токопроводящей керамики	22
Ласовский Р. Н., Вихренко В. С. Распределение концентрации лабильных частиц в области межзеренных границ в твердых электролитах	26
Грода Я. Г. Определение коэффициента диффузии решеточного флюида с взаимодействием в седловой точке на объемноцентрированной кубической решетке в рамках суперпозиционного приближения	29
Бокун Г. С. Асимптотическое решение уравнений Нернста – Планка – Пуассона для ионного кристалла	32
Ласовский Р. Н. Наноструктуризация интеркаляционных систем во внешнем поле	35
ФИЗИКА.....	38
Кленицкий Д. В. Влияние размера частиц на скорость звука в адронном резонансном газе... ..	38
Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Клышко В. Б. Полная система уравнений для расчета свободной энергии системы с учетом неоднородного распределения молекул в микрочастицах метода условных распределений	41
Кленицкий Д. В., Крук Н. Н. Анализ неплоскостных искажений макроцикла свободного основания коррола	44
Корниенко Т. А., Миксюк Ю. И., Саечников К. А. Распространение и взаимодействие световых пучков в фоторефрактивных кристаллах титаната Висмута	47
Никитенок В. И., Ветохин С. С. Сверхбыстрый непараметрический двухканальный обнаружитель слабых оптических сигналов	50
Рудик К. И., Чернявский В. А. Амплитудная и фазовая анизотропия растворов сложных молекул при лазерном возбуждении	53
Кузьмицкий В. А. Точный алгебраический метод в обратной задаче для сложного резонанса Ферми или его вибронного аналога	56
Волкович Д. И., Кузьмицкий В. А., Соловьев К. Н. Электронно-возбужденные состояния тетрапиррольных соединений: квантово-химические расчеты методом INDO/Sm	59
Шишонок Е. М., Лугин В. Г. Рентгеноструктурный анализ и исследования прочностных свойств синтетического алмаза	62

Чаевский В. В., Гришкевич А. А., Гаранин В. Н., Углов В. В., Кулешов А. К. Влияние ZrN- и Mo-N-покрытий на износ лезвия ножа фрезерного инструмента при резании ДСтП.....	65
Долгий В. К., Почтенный А. Е. Моделирование адсорбционно-резистивного отклика в сенсорных слоях органических полупроводников	68
Мадьяров В. Р. СВЧ-диагностика полупроводников на основе кинетической модели переноса носителей заряда	71
Бобрович О. Г., Ташлыков И. С., Тульев В. В. Влияние параметров ионно-ассистируемого осаждения на формирование Me/Si-структур.....	74
Тульев В. В., Ташлыков И. С., Литвинов Д. А. Влияние параметров осаждения на толщину модифицированного слоя при динамическом атомном перемешивании Pd/Fe-структур.....	77
Сойка А. К., Шепелевич В. Г. Долговременный отрицательный магнитопластический эффект в металлах, вызванный воздействием сильного импульсного магнитного поля.....	80

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ 83

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ..... 83

Акиншева И. В., Кузьмицкий И. Ф. Особенности интегрального оценивания многомерных объектов и алгоритмов управления.....	83
Лапето А. В., Кузьмицкий И. Ф. Синтез систем управления с запаздыванием методом теории вложения на основе алгоритмов аппроксимации функций с отклоняющимся аргументом	87
Сухорукова И. Г., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Адаптация критерия серий к применению в управлении технологическими процессами	92
Олиферович Н. М., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Анализ динамических характеристик и динамических погрешностей преобразователя измерения параметров впитывания	96
Абрамов Г. В., Коробова Л. А., Матыцина И. А., Карпович Д. С., Шуленков Р. А. Разработка математической модели для распознавания звуковых сигналов	100
Дятко А. А., Костромицкий С. М., Шумский П. Н. Моделирование типовых траекторий летательных аппаратов для полунатурных испытаний.....	104
Ярмолик С. Н., Дятко А. А., Шумский П. Н., Храменков А. С. Оценка распределения решающей статистики в задачах радиолокационного обнаружения и распознавания объектов.....	107
Бокун Г. С., Гапанюк Д. В. Алгоритм прогонки для расчета импеданса твердого электролита	110

ОБРАБОТКА И ПЕРЕДАЧА ИНФОРМАЦИИ.....113

Пацей Н. В. Исследование корректирующей способности конструкций двоичных кодов с низкой плотностью проверок на четность, основанных на матрицах перестановок	113
Виткова М. Ф., Романенко Д. М. Адаптивная система кодирования (декодирования) на основе многомерных итеративных кодов и многопороговых декодеров.....	116
Шутько Н. П. Особенности и формальное описание процесса осаждения секретной информации в текстовые документы на основе стеганографии.....	121

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И ОБУЧАЮЩИЕ СИСТЕМЫ.....125

Колесников В. Л., Бракович А. И., Жук Я. А. Фашификация и дефашификация данных при решении многокритериальных задач.....	125
Колесников В. Л., Бракович А. И., Жук Я. А. Решение многокритериальных задач, оптимальных по Парето	128
Герман О. В., Садовская О. И., Герман Ю. О. Составление плана работ на основе системы дизъюнктов разностного типа	131

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ 135

- Кобайло А. С.** Применение теории синтеза вычислительных систем реального времени для моделирования физических процессов на примере радиосигналов 135
- Шиман Д. В., Булова Ю. О.** Программное средство для исследования характеристик кодов, направленных на исправление ошибок типа «стирание» 138
- Пласковицкий В. А., Урбанович П. П.** Использование абстрактных синтаксических деревьев для обфускации кода 142
- Жиляк Н. А., Цыганенко Н. П.** Шифрование XML-документа средствами .NET 147

РЕФЕРАТЫ..... 150**RESUME 159**