

Учреждение образования
«Белорусский государственный
технологический университет»

ТРУДЫ БГТУ

Научный журнал

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

№ 6 (188) 2016 год

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

Минск 2016

Educational institution
“Belarusian State Technological University”

PROCEEDINGS OF BSTU

Scientific Journal

Published monthly since July 1993

No. 6 (188) 2016

**PHYSICS AND MATHEMATICS.
INFORMATICS**

Minsk 2016

Учредитель – учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет»

Главный редактор журнала – Войтов Игорь Витальевич, доктор технических наук, доцент, Республика Беларусь

Редакционная коллегия журнала:

Жарский И. М., кандидат химических наук, профессор (заместитель главного редактора), Республика Беларусь;
Дормешкин О. Б., доктор технических наук, доцент, Республика Беларусь;
Штукин С. С., доктор сельскохозяйственных наук, профессор, Республика Беларусь;
Торчик В. И., доктор биологических наук, Республика Беларусь;
Пайвинен Ристо, доктор наук, профессор, Финляндская Республика;
Кунтыш В. Б., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Соловьева Т. В., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Барчик Стэфан, доктор наук, профессор, Словацкая Республика;
Ещенко Л. С., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Левицкий И. А., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Жантасов К. Т., доктор технических наук, профессор, Республика Казахстан;
Прокопчук Н. Р., член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор, Республика Беларусь;
Леонтьев В. Н., кандидат химических наук, доцент, Республика Беларусь;
Харша Ратнавира, доктор наук, профессор, Королевство Норвегия;
Водопьянов П. А., член-корреспондент НАН Беларуси, доктор философских наук, профессор, Республика Беларусь;
Трус Н. В., кандидат филологических наук, доцент, Республика Беларусь;
Рангелова Е. М., доктор педагогических наук, профессор, Республика Болгария;
Марченко В. М., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Наркевич И. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Шкляр Бенцион, профессор, Государство Израиль;
Неверов А. В., доктор экономических наук, профессор, Республика Беларусь;
Барановский С. И., доктор экономических наук, профессор, Республика Беларусь;
Хассель Л. Г., доктор наук, профессор, Королевство Швеция;
Ветохин С. С., кандидат физико-математических наук, доцент, Республика Беларусь;
Касперович С. А., кандидат экономических наук, доцент, Республика Беларусь;
Казаренков В. И., доктор педагогических наук, Российская Федерация;
Кулак М. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Черная Н. В., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Файгле В., доктор наук, профессор, Федеративная Республика Германия;
Флорик Е. А., кандидат биологических наук (секретарь), Республика Беларусь.

Редакционная коллегия номера:

Марченко В. М., доктор физико-математических наук, профессор (главный редактор номера), Республика Беларусь;
Наркевич И. И., доктор физико-математических наук, профессор (заместитель главного редактора номера), Республика Беларусь;
Вихренко В. С., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Урбанович П. П., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Колесников В. Л., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Калинин А. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Сайко А. П., доктор физико-математических наук, Республика Беларусь;
Квасов Н. Т., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Минченко Л. И., доктор физико-математических наук, Республика Беларусь;
Радыно Я. В., член-корреспондент НАН Беларуси, доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Щекин А. К., доктор физико-математических наук, профессор, Российская Федерация;
Бартосевич Збигнев, доктор габилитованы, Республика Польша;
Шкляр Бенцион, профессор, Государство Израиль;
Аргиракис Панос, доктор наук, профессор, Греческая Республика;
Орлюкас Антанас Феликсас, доктор наук, Литовская Республика;
Соловьева И. Ф., кандидат физико-математических наук (секретарь), Республика Беларусь.

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

Телефоны: главного редактора журнала – (+375 17) 226-14-32;

главного редактора номера – (+375 17) 327-22-51.

E-mail: root@belstu.by, <http://www.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»

Publisher – educational institution “Belarusian State Technological University”

Editor in Chief – Voytov Igor’ Vital’evich, DSc (Engineering), Assistant Professor, Republic of Belarus

Editorial (Journal):

Zharskiy I. M., PhD (Chemistry), Professor (sub-editor), Republic of Belarus;
Dormeshkin O. B., DSc (Engineering), Assistant Professor, Republic of Belarus;
Shtukin S. S., DSc (Agriculture), Professor, Republic of Belarus;
Torchik V. I., DSc (Biology), Republic of Belarus;
Paivinen Risto, DSc, Professor, Republic of Finland;
Kuntyshev V. B., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;
Solov'yeva T. V., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;
Barcik Štefan, DSc, Professor, Slovak Republic;
Eshchenko L. S., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;
Levitskiy I. A., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;
Zhantsov K. T., DSc (Engineering), Professor, Republic of Kazakhstan;
Prokopchuk N. R., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, DSc (Chemistry), Professor, Republic of Belarus;
Leont'yev V. N., PhD (Chemistry), Assistant Professor, Republic of Belarus;
Harsha Ratnaweera, DSc, Professor, Kingdom of Norway;
Vodop'yanov P. A., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, DSc (Philosophy), Professor, Republic of Belarus;
Trus N. V., PhD (Philology), Assistant Professor, Republic of Belarus;
Rangelova E. M., DSc (Pedagogics), Professor, Republic of Bulgaria;
Marchenko V. M., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Narkevich I. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Shklyar Benzion, Professor, State of Israel;
Neverov A. V., DSc (Economics), Professor, Republic of Belarus;
Baranovskiy S. I., DSc (Economics), Professor, Republic of Belarus;
Hassel L. G., DSc, Professor, Kingdom of Sweden;
Vetokhin S. S., PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Republic of Belarus;
Kasperovich S. A., PhD (Economics), Assistant Professor, Republic of Belarus;
Kazarenkov V. I., DSc (Pedagogics), Russian Federation;
Kulak M. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Chernaya N. V., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;
Faigle W., DSc, Professor, Federal Republic of Germany;
Flyurik E. A., PhD (Biology) (secretary), Republic of Belarus.

Editorial (Issue):

Marchenko V. M., DSc (Physics and Mathematics), Professor (managing editor), Republic of Belarus;
Narkevich I. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor (sub-editor), Republic of Belarus;
Vikhrenko V. S., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Urbanovich P. P., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;
Kolesnikov V. L., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;
Kalinin A. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Sayko A. P., DSc (Physics and Mathematics), Republic of Belarus;
Kvasov N. T., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Minchenko L. I., DSc (Physics and Mathematics), Republic of Belarus;
Radyno Ya. V., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Shchekin A. K., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Russian Federation;
Bartosevich Zbigniew, DSc, Republic of Poland;
Shklyar Benzion, Professor, State of Israel;
Argyris Panos, DSc, Professor, Greece;
Orlukas Antanas Feliksas, DSc, Republic of Lithuania;
Solov'yeva I. F., PhD (Physics and Mathematics) (secretary), Republic of Belarus.

Contact: 13a, Sverdlova str., 220006, Minsk.

Telephones: editor in chief (+375 17) 226-14-32;

managing editor (+375 17) 327-22-51.

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

УДК 517.935.2+519.71

В. М. Марченко, И. М. Борковская, О. Н. Пыжкова

Белорусский государственный технологический университет

УСТОЙЧИВОСТЬ ГИБРИДНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С МНОГОМЕРНЫМ ВРЕМЕНЕМ*

Многие современные технологические процессы описываются гибридными системами, поэтому исследование представления решений таких систем и их качественных свойств является актуальной задачей. В работе рассмотрены линейные гибридные дискретно-непрерывные системы с многомерным (2-D-мерным) временем. Они состоят из непрерывной и дискретной составляющих. Для таких систем в симметрической форме ранее получены явные представления решения на основе сопряженных систем и путем разложения в ряды по решениям определяющих уравнений. В данной работе изучается такое важнейшее свойство гибридных систем, как устойчивость. Введены определения различных типов устойчивости (слабая асимптотическая устойчивость, сильная асимптотическая устойчивость, (α, γ) -устойчивость и др.) линейных стационарных гибридных 2-D-систем, исследована связь между ними и сформулирована соответствующая теорема. Доказаны необходимые условия асимптотической устойчивости. Представлены достаточные условия асимптотической устойчивости указанных систем в скалярном случае. Сформулированы необходимые и достаточные условия сильной асимптотической устойчивости и (α, γ) -устойчивости рассматриваемых систем. Предложенная техника позволяет также исследовать и другие типы устойчивости указанных систем.

Ключевые слова: гибридные 2-D-системы, асимптотическая устойчивость, необходимые и достаточные условия устойчивости.

V. M. Marchenko, I. M. Borkovskaya, O. N. Pyzhkova

Belarusian State Technological University

THE STABILITY OF HYBRID DYNAMIC 2-D-SYSTEMS

Some modern technological processes are described by the hybrid systems. Therefore, the study of the representation of solutions and the quality properties of such systems is an actual theme. The paper deals with linear hybrid discrete-continuous system with a multi-dimensional (2-D-dimensional) time. It consists of the continuous and discrete components. Earlier the representations of solutions based on conjugated systems and by expanding in series of decisions determining equations were received for such systems in the symmetric form. In this paper we study the stability of the hybrid systems. The stability is one of the most important properties of the systems under consideration. The definitions of different types of stability (weak asymptotic stability, strong asymptotic stability, (α, γ) -stability, etc.) for linear stationary hybrid 2-D-systems are introduced in the article. The connections between them are investigated and the corresponding theorem is formulated. The necessary conditions of stability are proved. The sufficient conditions of hybrid 2-D-systems stability are presented for the scalar case. The necessary, sufficient conditions of strong stability and (α, γ) -stability are formulated. The stability of other types can be studied by using the technique proposed.

Key words: hybrid 2-D-systems, asymptotic stability, necessary, sufficient conditions of stability.

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

Введение. Многие современные технологические процессы приводят к математическим моделям, представляющим собой гибридные системы [1–5]. Термин «гибридные системы» относят к системам, описывающим процессы или объекты с существенно различающимися характеристиками, например, содержащими 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. Неотъемлемым достоинством гибридных систем является, прежде всего, адекватность таких систем.

Актуальными представляются задачи, связанные с изучением представления решений гибридных систем и их качественных свойств. В работе [6] рассмотрены линейные гибридные дискретно-непрерывные системы с многомерным (2-D-мерным) временем, состоящие из непрерывной и дискретной составляющих. Для таких систем в симметрической форме получены явные представления решения на основе сопряженных систем и путем разложения в ряды по решениям определяющих уравнений таких систем. В данной статье исследуется такое важнейшее свойство указанных систем, как устойчивость.

Основная часть.

1. Постановка задачи. Рассмотрим гибридную дискретно-непрерывную 2-D-систему в симметрической форме (по отношению к операторам дифференцирования и сдвига):

$$\dot{x}_1(t, k) = A_{11}x_1(t, k) + A_{12}x_2(t, k), \quad (1)$$

$$t \in [0, +\infty),$$

$$x_2(t, k+1) = A_{21}x_1(t, k) + A_{22}x_2(t, k), \quad (2)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots,$$

где $\dot{x}_1(t, k) = \frac{\partial x_1(t, k)}{\partial t}$, $x_1(t, k) \in \mathbb{R}^{n_1}$, $x_2(t, k) \in \mathbb{R}^{n_2}$, $x_1(t, k)$, $x_2(t, k)$ – n_1 - и n_2 -векторы состояния системы; A_{11} , A_{12} , A_{21} , A_{22} – постоянные матрицы соответствующих размеров.

Пусть граничные (начальные) условия для (1) и (2) заданы в виде

$$x_1(0, k) = x_1(k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3)$$

$$x_2(t, 0) = x_2(t), \quad t \in [0, +\infty). \quad (4)$$

В нормальной форме гибридную модель 2-D-системы можно записать следующим образом:

$$\dot{x}_1(t, i) = A_{11}x_1(t, i) + A_{12}x_2(t, i), \quad (5)$$

$$t \in [0, +\infty),$$

$$x_2(t, i) = A_{21}x_1(t, i) + A_{22}x_2(t, i-1), \quad (6)$$

$$i = 0, 1, 2, \dots,$$

начальные условия:

$$x_1(0, i) = x_1(i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad (7)$$

$$x_2(t, -1) = x_2(t), \quad t \in [0, +\infty). \quad (8)$$

Рассмотрим далее систему (1), (2) в симметрической форме.

Задача. Получить условия устойчивости гибридной 2-D-системы (1), (2) в симметрической форме.

В работе [6] доказано, что существует единственное решение системы (1), (2), удовлетворяющее начальным условиям (3), (4).

Определение 1. Система (1), (2) называется:

1) устойчивой по x_1 относительно непрерывной переменной, если для любых ограниченных начальных функций существуют такие неотрицательные числа M_1, \dots, M_k, \dots , что соответствующее решение системы (1), (2) обладает свойством:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|x_1(t, k)\| \leq M_k$$

при каждом $k \in \mathbb{Z}_+ = \{1, 2, 3, \dots\}$, где символ $\|d\|$ обозначает норму (евклидову) вектора d ;

2) устойчивой по x_1 относительно дискретной переменной, если для любых ограниченных начальных функций существует такая неотрицательная функция $M(t)$, $t > 0$, что соответствующее решение системы (1), (2) обладает следующим свойством:

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \|x_1(t, k)\| \leq M(t)$$

при каждом $t \in \mathbb{R}_+ = (0, +\infty)$;

3) устойчивой по x_2 относительно непрерывной переменной, если для любых ограниченных начальных функций существуют такие неотрицательные числа M_1, \dots, M_k, \dots , что соответствующее решение системы (1), (2) обладает свойством:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|x_2(t, k)\| \leq M_k$$

при каждом $k \in \mathbb{Z}_+ = \{1, 2, 3, \dots\}$;

4) устойчивой по x_2 относительно дискретной переменной, если для любых ограниченных начальных функций существует такая неотрицательная функция $M(t)$, $t > 0$, что соответствующее решение системы (1), (2) обладает следующим свойством:

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \|x_2(t, k)\| \leq M(t)$$

при каждом $t \in \mathbb{R}_+ = (0, +\infty)$;

5) устойчивой по x_1 относительно непрерывной равномерно по дискретной переменной,

если для любых ограниченных начальных функций существует такое неотрицательное число M , что соответствующее решение системы (1), (2) обладает свойством:

$$\limsup_{t \rightarrow +\infty} \sup_{k \in \mathbb{Z}_+} \|x_1(t, k)\| \leq M;$$

6) устойчивой по x_1 относительно дискретной равномерно по непрерывной переменной, если для любых ограниченных начальных функций существует такое неотрицательное число M , что соответствующее решение системы (1), (2) обладает следующим свойством:

$$\limsup_{k \rightarrow +\infty} \sup_{t \in \mathbb{R}_+} \|x_1(t, k)\| \leq M;$$

7) устойчивой по x_2 относительно непрерывной равномерно по дискретной переменной, если для любых ограниченных начальных функций существует такое неотрицательное число M , что соответствующее решение системы (1), (2) обладает свойством:

$$\limsup_{t \rightarrow +\infty} \sup_{k \in \mathbb{Z}_+} \|x_2(t, k)\| \leq M;$$

8) устойчивой по x_2 относительно дискретной равномерно по непрерывной переменной, если для любых ограниченных начальных функций существует такое неотрицательное число M , что соответствующее решение системы (1), (2) обладает следующим свойством:

$$\limsup_{k \rightarrow +\infty} \sup_{t \in \mathbb{R}_+} \|x_2(t, k)\| \leq M;$$

9) слабо асимптотически устойчивой, если для любых ограниченных начальных функций $x_1(\cdot), x_2(\cdot)$ в (3), (4) соответствующее решение $x_1(t, k), x_2(t, k)$ системы (1), (2) обладает свойством:

$$\lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ k \rightarrow +\infty}} (\|x_1(t, k)\| + \|x_2(t, k)\|) = 0;$$

10) сильно асимптотически устойчивой, если найдутся такие действительные числа $M > 0, \alpha > 0, 0 < \gamma < 1$, что для любых ограниченных начальных функций соответствующее решение системы (1), (2) обладает следующим свойством:

$$\|x_1(t, k)\| + \|x_2(t, k)\| \leq M (e^{-\alpha t} + |\gamma|^k), \quad (9) \\ t > 0, k = 1, 2, \dots;$$

11) (α, γ) -устойчивой, если найдется такое действительное число $M > 0$, что для любых ограниченных начальных функций соответствующее решение системы (1), (2) удовлетворяет требованию (9).

2. Необходимые условия устойчивости. Связь между различными понятиями асимпто-

тической устойчивости системы (1), (2) отражает следующая теорема.

Теорема 1. Имеет место следующая цепочка импликаций:

$$\begin{aligned} 2) \Leftarrow 6) \ 5) \Rightarrow 1) \\ \uparrow \uparrow \\ 11) \Rightarrow 10) \Rightarrow 9) \\ \downarrow \downarrow \\ 3) \Leftarrow 7) \ 8) \Rightarrow 4) \end{aligned}$$

Здесь 1) – 11) означают соответствующие понятия устойчивости из определения 1.

Определение 2. Уравнение вида

$$\det \begin{bmatrix} \lambda I_{n_1} - A_{11} & -A_{12} \\ -A_{21} & \mu I_{n_2} - A_{22} \end{bmatrix} = 0 \quad (10)$$

назовем характеристическим уравнением, а его корни (в общем случае комплексные) – характеристическими числами (значениями) системы (1), (2).

Теорема 2 (необходимые условия асимптотической устойчивости):

1) если система (1), (2) слабо асимптотически устойчива, то для корней (λ, μ) характеристического уравнения (10) выполняется условие: $\operatorname{Re} \lambda < 0$ и $|\mu| \leq 1$ или $\operatorname{Re} \lambda \leq 0$ и $|\mu| < 1$;

2) если система (1), (2) сильно асимптотически устойчива, то для корней (λ, μ) характеристического уравнения (10) соблюдается условие: $\operatorname{Re} \lambda < 0$ и $|\mu| < 1$;

3) если система (1), (2) (α, γ) -устойчива, то для корней (λ, μ) характеристического уравнения (10) выполняется условие: $\operatorname{Re} \lambda \leq -\alpha$ и $|\mu| \leq \gamma$.

Доказательство. Пусть пара (λ_0, μ_0) удовлетворяет характеристическому уравнению (10). Тогда система (в общем случае комплексная)

$$\begin{bmatrix} \lambda_0 I_{n_1} - A_{11} & -A_{12} \\ -A_{21} & \mu_0 I_{n_2} - A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = 0$$

имеет ненулевое решение $\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{10} \\ c_{20} \end{bmatrix} \neq 0$, где

$c_{10} \in \mathbb{C}^{n_1}, c_{20} \in \mathbb{C}^{n_2}$. Полагая

$$\begin{bmatrix} x_1(t, i) \\ x_2(t, i) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{10} \\ c_{20} \end{bmatrix} e^{\lambda_0 t} \mu_0^i,$$

получаем:

$$\begin{aligned} \lambda c_1 e^{\lambda t} \mu^i &= A_{11} c_1 e^{\lambda t} \mu^i + A_{12} c_2 e^{\lambda t} \mu^i, \\ c_2 e^{\lambda t} \mu^{i+1} &= A_{21} c_1 e^{\lambda t} \mu^i + A_{22} c_2 e^{\lambda t} \mu^i, \end{aligned}$$

и, таким образом, функции $x_1(t, i) = c_{10} e^{\lambda_0 t} \mu_0^i, x_2(t, i) = c_{20} e^{\lambda_0 t} \mu_0^i$ являются решением системы (1), (2).

Тогда, применяя к этому решению требования 9) – 11) устойчивости в смысле определения 1, убеждаемся в справедливости утверждения теоремы 2.

Аналогично можно получить необходимые условия устойчивости в смысле понятий 1) – 8) из определения 1.

3. Достаточные условия устойчивости. Рассмотрим систему (1), (2) скалярных уравнений, где $A_{11} = a_{11}$, $A_{12} = a_{12}$, $A_{21} = a_{21}$, $A_{22} = a_{22}$ – действительные числа. Исследуем в этом случае для определенности сильную асимптотическую устойчивость такой системы.

Прежде всего, отметим, что вид характеристического уравнения упрощается:

$$\det \begin{bmatrix} \lambda - a_{11} & -a_{12} \\ -a_{21} & \mu - a_{22} \end{bmatrix} = \\ = (\lambda - a_{11})(\mu - a_{22}) - a_{12}a_{21} = 0,$$

откуда $\mu = a_{22} + \frac{a_{12}a_{21}}{\lambda - a_{11}}$ и с учетом необходимого

в силу теоремы 2 условия $\operatorname{Re} \lambda < 0$ и $|\mu| < 1$ заключаем, что это возможно лишь в случае, когда

- 1) $a_{12}a_{21} = 0$;
- 2) $|a_{22}| < 1$, $\operatorname{Re} a_{11} < 0$.

Покажем, что это условие является и достаточным. Действительно, поскольку $a_{12}a_{21} = 0$, то либо $a_{12} = 0$, либо $a_{21} = 0$. Пусть, например, $a_{12} = 0$. Тогда система (1), (2) в скалярном случае распадается:

$$\dot{x}_1(t, k) = a_{11}x_1(t, k), \\ x_2(t, k+1) = a_{22}x_2(t, k) + a_{21}x_1(t, k),$$

откуда

$$x_1(t, k) = e^{a_{11}t} x_1(0, k) = e^{a_{11}t} x_1(k), \\ x_2(t, k+1) = a_{22}x_2(t, k) + a_{21}e^{a_{11}t} x_1(k) = \\ = a_{22}^{k+1} x_2(t, 0) + a_{22}^k a_{21} e^{a_{11}t} x_1(0) + a_{22}^{k-1} a_{21} e^{a_{11}t} \times \\ \times x_1(1) + \dots + a_{22} a_{21} e^{a_{11}t} x_1(k-1) + a_{21} e^{a_{11}t} x_1(k) = \\ = a_{22}^{k+1} x_2(0) + a_{21} e^{a_{11}t} (a_{22}^k x_1(0) + \dots + x_1(k)).$$

Поскольку начальные функции ограничены: $\|x_1(k)\| \leq L$, $\|x_2(t)\| \leq L$ при некотором числе $L > 0$ для всех $t > 0$, $k = 1, 2, \dots$, то

$$\|x_1(t, k)\| + \|x_2(t, k)\| = \|e^{a_{11}t} x_1(k)\| + \\ + \|a_{22}^k x_2(0) + a_{21} e^{a_{11}t} (a_{22}^{k-1} x_1(0) + \dots + x_1(k-1))\| \leq \\ \leq L |a_{22}|^k + L |a_{21}| e^{\operatorname{Re} a_{11} t} (|a_{22}|^{k-1} + \dots + 1) = L |a_{22}|^k +$$

$$+ L |a_{21}| e^{t \operatorname{Re} a_{11}} \frac{|a_{22}|^k - 1}{|a_{22}| - 1} \leq L |a_{22}|^k + \frac{L |a_{21}|}{1 - |a_{22}|} e^{t \operatorname{Re} a_{11}} \leq \\ \leq M (e^{t \operatorname{Re} a_{11}} + |a_{22}|^k), \quad t > 0, k = 1, 2, \dots,$$

где $M = \max \left\{ L, \frac{L |a_{21}|}{1 - |a_{22}|} \right\}$, и система (1), (2) в

скалярном случае и $a_{12} = 0$ является сильно асимптотически устойчивой. Рассмотрим теперь случай, когда $a_{21} = 0$.

Тогда система принимает вид

$$\dot{x}_1(t, k) = a_{11}x_1(t, k) + a_{12}x_2(t, k), \\ x_2(t, k+1) = a_{22}x_2(t, k),$$

откуда с учетом формулы Коши получаем:

$$x_2(t, k) = a_{22}^k x_2(t), \\ x_1(t, k) = e^{a_{11}t} x_1(0, k) + \int_0^t e^{a_{11}(t-\tau)} a_{12} x_2(\tau) d\tau.$$

Тогда

$$\|x_1(t, k)\| + \|x_2(t, k)\| \leq e^{t \operatorname{Re} a_{11}} \|x_1(k)\| + \\ + \int_0^t e^{\operatorname{Re} a_{11}(t-\tau)} |a_{12}|^k \|x_2(\tau)\| d\tau \leq L e^{t \operatorname{Re} a_{11}} + \\ + L \frac{1 - e^{t \operatorname{Re} a_{11}}}{\operatorname{Re} a_{11}} |a_{22}|^k \leq M (e^{t \operatorname{Re} a_{11}} + |a_{22}|^k),$$

где $M = \max \left\{ L, \frac{L}{\operatorname{Re} a_{11}} \right\}$, и система (1), (2) в

скалярном случае и $a_{21} = 0$ является сильно асимптотически устойчивой.

Таким образом, нами доказана теорема 3.

Теорема 3. Для того, чтобы система (1), (2) скалярных уравнений была сильно асимптотически устойчивой, необходимо и достаточно, чтобы выполнялись следующие условия:

- 1) $a_{12}a_{21} = 0$;
- 2) $|a_{22}| < 1$, $\operatorname{Re} a_{11} < 0$.

Аналогично доказываются необходимые и достаточные условия (α, γ) -устойчивости системы (1), (2) в скалярном случае.

Теорема 4. Для того, чтобы система (1), (2) скалярных уравнений была (α, γ) -устойчивой, необходимо и достаточно, чтобы выполнялись следующие условия:

- 1) $a_{12}a_{21} = 0$;
- 2) $\operatorname{Re} a_{11} \leq -\alpha$, $|a_{22}| < \gamma$.

Заключение. Для линейных гибридных 2-D-систем в симметрической форме получены необходимые условия асимптотической устойчивости, достаточные условия устойчивости в скалярном случае. Сформулированы

необходимые, достаточные условия сильной асимптотической устойчивости и (α, γ) -устойчивости. Предложенная техника позволяет также исследовать и другие типы устойчивости системы (1), (2).

Литература

1. Dai L. Singular control systems // *Lecture notes in control and information sciences*: 118. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 1989. 319 p.
2. De la Sen M. A note about total stability of a class of hybrid systems // *Informatica*. 2006. Vol. 17, no. 4. P. 565–576.
3. Куржанский А. Б. Отчет о 16-м международном конгрессе ИФАК (IFAC) – международной федерации по автоматическому управлению // *Автоматика и телемеханика*. 2006. № 1. С. 183–189.
4. 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.
5. Марченко В. М., Пыжкова О. Н. Относительная управляемость линейных стационарных гибридных систем с многомерным временем // *Труды БГТУ*. 2008. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. С. 3–5.
6. Марченко В. М., Борковская И. М., Пыжкова О. Н. Гибридные динамические системы с многомерным временем. Представление решений // *Труды БГТУ*. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 3–9.

References

1. Dai L. Singular control systems. *Lecture notes in control and information sciences*: 118. Berlin; Heidelberg, Springer-Verlag, 1989. 319 p.
2. De la Sen M. A note about total stability of a class of hybrid systems. *Informatica*, 2006, vol. 17, no. 4, pp. 565–576.
3. Kurzhanskiy A. B. The 16-th IFAC Congress report. *Avtomatika i telemekhanika* [Automation and Remote Control], 2006, no. 1, pp. 183–189 (In Russian).
4. Marchenko V. M., Borkovskaya I. M. Stability and stabilization of the linear hybrid discrete-continues stationary systems. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2012, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 7–10 (In Russian).
5. Marchenko V. M., Pyzhkova O. N. Relative controllability of the linear stationary hybrid systems with multidimensional time. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physical-mathematical sciences and informatics, 2008, issue VI, pp. 3–5 (In Russian).
6. Marchenko V. M., Borkovskaya I. M., Pyzhkova O. N. Hybrid dynamic 2-D-systems. Representation of solutions. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 3–9 (In Russian).

Информация об авторах

Марченко Владимир Матвеевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: vladimir.marchenko@gmail.com

Борковская Инна Мечиславовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: borkovskaia@gmail.com

Пыжкова Ольга Николаевна – кандидат физико-математических наук, заведующая кафедрой высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: olga.pyzhkova@gmail.com

Information about the authors

Marchenko Vladimir Matveevich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vladimir.marchenko@gmail.com

Borkovskaya Inna Mechislavovna – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: borkovskaia@gmail.com

Pyzhkova Olga Nikolaevna – PhD (Physics and Mathematics), Head of the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: olga.pyzhkova@gmail.com

Поступила 10.03.2016

УДК 517.2

А. М. Волк

Белорусский государственный технологический университет

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ
ОБОБЩЕННОГО ГАММА-РАСПРЕДЕЛЕНИЯ**

Рассмотрено обобщенное гамма-распределение. Данное распределение обобщает гамма-распределение, распределения Рэлея, Максвелла, Вейбулла, Леви, хи-квадрат и имеет широкое применение в статистических методах исследования физических процессов, в дистанционном зондировании, в теории надежности, при описании дисперсного состава частиц дробления. Найдены числовые характеристики и получена характеристическая функция. Методом наибольшего правдоподобия получены уравнения для статистической оценки параметров данного распределения. Показана возможность описания дисперсной фазы в центробежных сепараторах.

Ключевые слова: обобщенное распределение, физические процессы, теория надежности, характеристическая функция, оценка параметров.

A. M. Volk

Belarusian State Technological University

**STATISTICAL EVALUATION OF PARAMETERS
OF THE GENERALIZED GAMMA DISTRIBUTION**

The generalization of gamma distribution was considered. This distribution summarizes gamma distribution, distributions of Relay, Maxwell, Veibull, Levi, chi-square and widely used in statistical research methods of physical processes, in remote sensing, in the theory of reliability, when describing the composition of the particulate grinding particles. Numerical characteristics were found. The characteristic function was obtained. Using maximum likelihood method the equations for the statistical evaluation of the parameters of this distribution was obtained. The possibility of distribution of the dispersed phase in the centrifugal separators was revealed.

Key words: generalized distribution, physical processes, reliability theory, the characteristic function, parameter estimation.

Введение. Обобщенное гамма-распределение было рассмотрено в работе [1]. Данное распределение включает в себя гамма-распределение, его частные случаи и многие известные распределения: Рэлея, Максвелла, Вейбулла, Леви, хи-квадрат [2]. Названные распределения широко используются в прикладных задачах, связанных со статистическими методами исследования физических процессов, дистанционным зондированием, в теории надежности, для описания дисперсного состава частиц дробления [2, 3].

Свойства обобщенного гамма-распределения. Рассмотрим обобщенное гамма-распределение некоторой случайной величины ξ :

$$f(x, \theta, p, c) = \frac{|c|}{\theta \Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \left(\frac{x}{\theta}\right)^{p-1} \exp\left(-\left(\frac{x}{\theta}\right)^c\right). \quad (1)$$

Отметим, что параметр θ является параметром масштаба, а p и c есть параметры формы.

Выполним переход к безразмерной случайной величине $\eta = \xi / \theta$:

$$f(t, \theta, p, c) = \frac{|c|}{\theta \Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} t^{p-1} \exp(-t^c). \quad (2)$$

Функция распределения непрерывной случайной величины η

$$F(t, \theta, p, c) = \frac{|c|}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \int_0^t \tau^{p-1} \exp(-\tau^c) d\tau \quad (3)$$

сводится к неполной гамма-функции [4].

Если $c > 0$, то

$$F(t, \theta, p, c) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \gamma\left(\frac{p}{c}, t^c\right), \quad (4)$$

а при $c < 0$

$$F(t, \theta, p, c) = 1 - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \gamma\left(\frac{p}{c}, t^c\right). \quad (5)$$

Если $\frac{p-1}{c} > 0$, то распределение (2), (3)

имеет моду:

$$t_{\text{mod}} = \left(\frac{p-1}{c}\right)^{\frac{1}{c}}, \quad \xi_{\text{mod}} = \theta t_{\text{mod}} = \theta \left(\frac{p-1}{c}\right)^{\frac{1}{c}}. \quad (6)$$

Для функции распределения мода будет точкой перегиба.

Для распределения (2), (3) определены начальные моменты порядка k , удовлетворяющего условию $p + k > 0$, причем

$$\alpha_k(\eta) = \Gamma\left(\frac{p+k}{c}\right) / \Gamma\left(\frac{p}{c}\right), \quad (7)$$

$$\alpha_k(\xi) = \theta^k \Gamma\left(\frac{p+k}{c}\right) / \Gamma\left(\frac{p}{c}\right). \quad (8)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \alpha_v(\xi) &= \frac{|\tilde{\eta}|}{\theta \Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \int_0^{+\infty} x^v \left(\frac{x}{\theta}\right)^{p-1} \exp\left\{-\left(\frac{x}{\theta}\right)\right\} dx = \\ &= \frac{|c|\theta^v}{\theta \Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \int_0^{+\infty} \left(\frac{x}{\theta}\right)^{p+v-1} \exp\left\{-\left(\frac{x}{\theta}\right)\right\} dx = \\ &= \frac{|c|\theta^v}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \int_0^{+\infty} t^{p+v-1} \exp(-t^c) dt = \theta^v \frac{\Gamma\left(\frac{p+v}{c}\right)}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)}. \end{aligned}$$

Рассчитаем характеристическую функцию распределения (2), (3) случайной величины ξ :

$$\begin{aligned} \varphi(\zeta) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\zeta x) f(x) dx = \\ &= \varphi(\zeta) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\Gamma\left(\frac{p+k}{c}\right)}{k!} (i\zeta\theta)^k = \\ &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\Gamma\left(\frac{p+k}{c}\right)}{k!} (i\zeta\theta)^k. \end{aligned}$$

Выполним замену $t^c = y$ и, разлагая функцию $\exp(i\zeta\theta t)$ в ряд, найдем:

$$\begin{aligned} \varphi(\zeta) &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\zeta\theta)^k}{k!} \int_0^{+\infty} y^{\frac{p+k}{c}-1} \exp(-y) dy = \\ &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\Gamma\left(\frac{p+k}{c}\right)}{k!} (i\zeta\theta)^k. \quad (9) \end{aligned}$$

Для исследования сходимости полученного ряда применим признак Коши и используем

формулу Стирлинга [4]. При $c < 0$ или $c > 1$ данный ряд сходится и характеристическая функция аналитическая при любых значениях ζ . В данном случае распределение случайной величины однозначно определяется ее моментами [5].

Статистическая оценка параметров. Статистическая оценка параметров распределения может быть выполнена методом моментов, при котором параметры распределения находятся из условия равенства теоретических и статистических моментов. Распределение однозначно определяется своими моментами, если характеристическая функция аналитическая [5].

Метод моментов требует решения достаточно сложной системы уравнений, а также проверки соответствия полученной функции статистическим данным с помощью критериев согласия.

Выполним статистическую оценку параметров распределения (2) методом наибольшего правдоподобия [6].

Пусть имеется некоторая выборка $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ генеральной совокупности распределения (2), (3). Рассмотрим функцию правдоподобия:

$$L = \prod_{i=1}^n \frac{|c|}{\theta \Gamma\left(\frac{p}{c}\right)} \left(\frac{x_i}{\theta}\right)^{p-1} \exp\left\{-\left(\frac{x_i}{\theta}\right)^c\right\}. \quad (10)$$

Прологарифмируем данную функцию:

$$\begin{aligned} \ln L &= \\ &= n \left[\ln \frac{|c|}{\theta} - \ln \Gamma\left(\frac{p}{c}\right) + (p-1) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln \frac{x_i}{\theta} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i}{\theta}\right)^c \right] \end{aligned}$$

и рассмотрим функцию:

$$\begin{aligned} G &= \frac{\ln L}{n} = \\ &= \ln \frac{|c|}{\theta} - \ln \Gamma\left(\frac{p}{c}\right) + (p-1) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln \frac{x_i}{\theta} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i}{\theta}\right)^c. \end{aligned}$$

Максимум данной функции совпадает с максимумом функции правдоподобия (10).

Найдем частные производные функции G :

$$\frac{\partial G}{\partial \theta} = -\frac{p}{\theta} + \frac{c}{\theta} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i}{\theta}\right)^c, \quad (11)$$

$$\frac{\partial G}{\partial p} = -\frac{1}{c} \Psi\left(\frac{p}{c}\right) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln \frac{x_i}{\theta}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial G}{\partial c} = \frac{1}{c} + \frac{p}{c^2} \Psi\left(\frac{p}{c}\right) - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i}{\theta}\right)^c \ln \frac{x_i}{\theta}. \quad (13)$$

Применим необходимое условие экстремума функции многих переменных, приравняем найденные частные производные к нулю и получим уравнения правдоподобия для определения параметров распределения:

$$\theta = \left(\frac{c}{p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^c \right)^{\frac{1}{c}}, \quad (14)$$

$$\frac{1}{c} \psi \left(\frac{p}{c} \right) - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln \frac{x_i}{\theta} = 0, \quad (15)$$

$$\frac{1}{c} + \frac{p}{c^2} \psi \left(\frac{p}{c} \right) - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i}{\theta} \right)^c \ln \frac{x_i}{\theta} = 0. \quad (16)$$

Решение уравнений (14)–(16) дает статистическую оценку параметров распределения (2), (3). Данные оценки являются состоятельными, асимптотически-несмещенными, эффективными, асимптотически-нормальными и асимптотически-эффективными оценками [6]. При условии эффективности оценок система (14)–(16) имеет единственное решение [7].

Описание дисперсного состава частиц дробления. Распределение (2), (3) инвариантно относительно величины ξ^k . Применяв его к описанию величины порядка d^k относительно диаметра при исследовании дисперсного состава частиц дробления частиц и обозначив $t = d / \theta$, получим распределение:

$$f(t, \theta, p, c) = \frac{|c|}{\theta \Gamma \left(\frac{p+k}{c} \right)} t^{p+k-1} \exp(-t^c), \quad (17)$$

$$F(t, \theta, p, c) = \frac{|c|}{\Gamma \left(\frac{p+k}{c} \right)} \int_0^t \tau^{p+k-1} \exp(-\tau^c) d\tau. \quad (18)$$

Функции (17), (18) описывают распределение количества ($k=0$), диаметров ($k=1$), поверхности ($k=2$) и объема ($k=3$) в зависимости от размера частиц и позволяют найти все необходимые характеристики этих распределе-

ний, предварительно получив статистическую оценку параметров по полученным уравнениям правдоподобия.

Рассмотрим экспериментальные значения распределения веса капель дисперсной фазы, уносимых из сепарационного элемента [8]. Средние значения шести опытов, полученных методом отбора проб, приведены в таблице.

Распределение веса капель дисперсной фазы

Диаметр капель $d_i - d_{i+1}$, мкм	0–40	20–40	40–60	60–80	80–100
Относительный вес	0,03	0,23	0,38	0,21	0,15

Решение уравнений правдоподобия (14)–(16) дает значения параметров: $\theta = 49,2$, $c = 2,233$, $p = 3,373$ и функцию распределения объемов:

$$F_3(d) = 2,52 \int_0^{d/49,2} t^{2,373} \exp(-t^{2,233}) dt. \quad (19)$$

Полученное распределение позволяет рассчитать все необходимые характеристики распределения количества, размера, поверхности и объема исследуемой дисперсной фазы и применить их для расчета эффективности процессов разделения газожидкостных потоков [9].

Закключение. Обобщенное гамма-распределение имеет широкую область применения в силу своей универсальности. Но его использование ограничивалось отсутствием способов достоверной оценки параметров на основании статистических данных.

Предложенный метод наибольшего правдоподобия и полученные уравнения (14)–(16) позволяют получить состоятельные и асимптотически-эффективные статистические оценки параметров распределения.

Полученное распределение объемов (19) частиц дисперсной фазы может быть использовано для расчета эффективности разделения фаз в газожидкостных потоках.

Литература

1. Stacy E. W. A generalization of the gamma distribution // Ann. Math. Statistics. 1962. Vol. 33. P. 1187–1192.
2. Королев В. Ю., Крылов В. А., Кузьмин В. Ю. Устойчивость конечных смесей обобщенных гамма-распределений относительно возмущений параметров // Информатика и ее применения. 2011. Т. 5, вып. 1. С. 31–38.
3. Коузов П. А. Основы анализа дисперсионного состава промышленных пылей и измельченных материалов. Л.: Химия, 1987. 264 с.
4. Янке Е., Эмдэ Ф., Леш Ф. Специальные функции: Формулы, графики, таблицы. М.: Наука, 1977. 458 с.
5. Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. В 2 т. Т. 2. М.: Мир, 1984. 738 с.

6. Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика: Основы моделирования и первичная обработка данных. М.: Финансы и статистика, 1983. 471 с.
7. Крамер Г. Математические методы статистики: Основы моделирования и первичная обработка данных. М.: Мир, 1975. 648 с.
8. Левданский Э. И., Волк А. М., Плехов И. М. О законе распределения частиц при дроблении // ТОХТ. 1986. № 5. С. 672–677.
9. Волк А. М. Эффективность разделения газожидкостных потоков // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2006. Вып. XIV. С. 42–45.

References

1. Stacy E. W. A generalization of the gamma distribution. *Ann. Math. Statistics*, 1962, vol. 33, pp. 1187–1192.
2. Korolev V. Yu., Krylov V. A., Kuz'min V. Yu. Stability of finite mixtures of generalized gamma distributions with respect to perturbations of parameters. *Informatika i ee primeneniya* [Computer science and its applications], 2011, vol. 5, issue 1, pp. 31–38 (In Russian).
3. Kouzov P. A. *Osnovy analiza dispersionnogo sostava promyshlennykh pyley i izmel'chennykh materialov* [Principles of analysis of variance and composition of industrial dust from grinding materials]. Leningrad, Khimiya Publ., 1987. 264 p.
4. Yanke E., Emde F., Lesh F. *Spetsial'nyye funktsii: Formuly, grafiki, tablitsy* [Special functions: Formulas, graphs, tables]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 458 p.
5. Feller V. *Vvedeniye v teoriyu veroyatnostey i ee prilozheniya* [An introduction to probability theory and its applications]. In 2 vol., vol. 2. Moscow, Mir Publ., 1984. 738 p.
6. Ayvazyan S. A., Enyukov I. S., Meshalkin L. D. *Prikladnaya statistika: Osnovy modelirovaniya i pervichnaya obrabotka dannykh* [Applied Statistics: Basics of modeling and primary processing]. Moscow, Finansy i statistika Publ., 1983. 471 p.
7. Kramer G. *Matematicheskiye metody statistiki: Osnovy modelirovaniya i pervichnaya obrabotka dannykh* [Mathematical Methods of Statistics: Basics of modeling and primary data processing]. Moscow, Mir Publ., 1975. 648 p.
8. Levdanskiy E. I., Volk A. M., Plekhov I. M. On the particle distribution law in crushing. *Tekhnicheskiye osnovy khimicheskoy tekhnologii* [Technical Foundations of Chemical Engineering], 1986, no. 5, pp. 672–677 (In Russian).
9. Volk A. M. Separation efficiency of gas-liquid flow. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physical-mathematical sciences and informatics, 2006, issue XIV, pp. 42–45 (In Russian).

Информация об авторе

Волк Анатолий Матвеевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: volk@belstu.by

Information about the author

Volk Anatoliy Matveevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: volk@belstu.by

Поступила 05.03.2016

УДК 519.624

И. Ф. Соловьева

Белорусский государственный технологический университет

**ИССЛЕДОВАНИЕ МАТРИЦ ЯКОБИ И ЧИСЕЛ ОБУСЛОВЛЕННОСТИ
ПРИ РЕШЕНИИ НЕЛИНЕЙНЫХ ГРАНИЧНЫХ ЗАДАЧ**

В рассматриваемой работе для решения нелинейных граничных задач предлагается метод множественной двусторонней пристрелки, позволяющий заменить процесс численного решения граничной задачи решением нескольких задач Коши. Для решения задач строятся вычислительные схемы метода множественной двусторонней пристрелки. Они включают в себя процедуру решения задач Коши в прямом и обратном направлениях. Для этого выбираются пристрелочные подынтервалы. В статье показано, что выбор числа и длин подынтервалов пристрелки обеспечивает необходимые свойства и качества задач Коши, для решения которых существуют в настоящее время хорошо работающие методы. В ходе решения данной проблемы составляется матрица Якоби и исследуются ее свойства. Для пристрелочных задач Коши строится замыкающая система уравнений, которая получается достаточно низкого порядка. Определяются границы спектра матрицы Якоби и вычисляются их числа обусловленности. Предлагаемая методика позволяет решать широкие классы нелинейных граничных задач, в том числе и прикладного характера.

Ключевые слова: малый параметр, пограничный слой, двухточечные граничные задачи.

I. F. Solov'yeva

Belarusian State Technological University

**THE RESEARCH OF JACOBI MATRICES AND CONDITION NUMBERS FOR SOLVING
NONLINEAR BOUNDARY VALUE PROBLEMS**

In this paper for solving nonlinear boundary value problems we propose a method of multiple two-way adjustment. This method allows you to process the numerical solution of the boundary problem to replace several solutions for the Cauchy-cottages. To solve the problems of computational schemes are built using multiple two-way adjustment. They include a procedure for solving the Cauchy problems in both forward and reverse directions. For this sighting purpose sub-ranges were selected. The article shows that the choice of the number and lengths of the subintervals zeroing provides a necessary and quality of the Cauchy problem, for the solutions of which well working methods exist at the present time. In the course of solving this problem Ritz-Jacobi matrix is made and its properties are investigated. For sighting Cauchy problem closing system of equations, constructed which can be obtained of a quite a low order. Define the boundaries of the spectrum of the Jacobi matrix are defined and their condition numbers are calculated. The proposed method allows to solve a wide class of nonlinear boundary value problems, including an applied research.

Key words: small parameter, boundary layer, the two-point boundary value problems.

Введение. В настоящее время проблемы разработки и исследования новых методов численного решения граничных задач очень разнообразны, актуальны и значимы. Интерес к ним достаточно высок.

Это объясняется следующими причинами: рассмотрением новых классов задач, в том числе и прикладных, к решению которых имеющиеся алгоритмы неприменимы или их использовать на практике недостаточно эффективно, необходимостью более глубокого изучения новых и уже существующих алгоритмов с целью выявления их действительных возможностей, улучшения их вычислительных свойств и расширения их области применения. Проблеме численного решения нелинейных двухточечных граничных задач с пограничными слоями уделяется в настоящее время все большее внимание.

В ряде случаев при решении нелинейных граничных задач интересной является идея построения итерационных процессов таким образом, чтобы они приводили к необходимости численного решения только задач линейного вида, и чтобы итерационная последовательность приближенных решений этих линейных задач сходилась к искомому решению исходной нелинейной задачи.

Постановка задачи. Пусть задана нелинейная двухточечная задача с неразделенными граничными условиями:

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

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

где

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

$$g : R^n \times R^n \rightarrow R^n.$$

Построение алгоритма метода множественной двусторонней пристрелки преследует в основном такие цели, как улучшение свойств пристрелочных траекторий, уменьшение числа неизвестных, ослабление условий на локализацию начальных приближений.

В данной статье будем рассматривать метод множественной двусторонней пристрелки, позволяющий заменить процесс численного решения граничной задачи решением нескольких задач Коши. Методы такого рода называют методами редукции граничных задач к задачам Коши. Сильной стороной такого подхода к решению граничных задач является тот момент, что для решения задач Коши в настоящее время можно применять сильно развитые, хорошо работающие и имеющие полное математическое обеспечение численные методы [1].

При решении указанного выше типа задач стандартными численными методами возникают большие трудности, причина которых чаще всего заключается в неустойчивости численного процесса. В качестве специальных методов будем рассматривать метод множественной двусторонней пристрелки, обладающий необходимой гибкостью.

Для исследования сходимости метода множественной двусторонней пристрелки важное значение имеет понятие изолированности решения задачи (1), (2).

Определение. Решение граничной задачи (1), (2) называется изолированным, если выполняются условия:

$$\det \left[\frac{\partial g(y(a), y(b))}{\partial y(a)} + \frac{\partial g(y(a), y(b))}{\partial y(b)} \Phi(a) \right] \neq 0,$$

$$\det \left[\frac{\partial g(y(a), y(b))}{\partial y(a)} + \frac{\partial g(y(a), y(b))}{\partial y(b)} \Phi(b) \right] \neq 0$$

на точном решении задачи (1), (2). Функция $\Phi(t)$ – это матричное решение задачи Коши

$$\Phi'(t) = \frac{\partial f(t, y(t))}{\partial y} \Phi(t), \quad \Phi(a) = E,$$

где $a \leq t \leq b$, взятое при $t = b$.

Алгоритм метода множественной двусторонней пристрелки. Предлагаемый метод множественной двусторонней пристрелки состоит в следующем.

Разбиваем отрезок на совокупность точек. Назовем их точками пристрелки:

$$a = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{2m-1} < t_{2m} = b.$$

Множественную пристрелку организуем таким образом, чтобы вычислительный процесс развивался в обоих направлениях.

Пристрелочные задачи Коши построим в прямом и обратном направлениях:

$$\begin{cases} u' = f(t, u), & t \in J_{2j-1}^{(+)} = \{t_{2j-1} \leq t \leq t_{2j}\}; \\ u(t, y_{2j-1})|_{t=t_{2j-1}} = y_{2j-1}, & y_{2j-1} \in R^n, \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} v' = f(t, v), & t \in J_{2j-1}^{(-)} = \{t_{2j-1} \geq t \geq t_{2j-2}\}, \\ v(t, y_{2j-1})|_{t=t_{2j-1}} = y_{2j-1}, & y_{2j-1} \in R^n, \quad j = \overline{1, m}, \end{cases} \quad (4)$$

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

Для полученных пристрелочных задач Коши составляем замыкающую систему уравнений вида

$$\begin{cases} u(t_{2j}, y_{2j-1}) - v(t_{2j}, y_{2j+1}) = 0, & j = \overline{1, m}, \\ g(v(t_0, y_1), u(t_{2m}, y_{2m-1})) = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Обозначим:

$$z = (y_1^T, y_2^T, \dots, y_{2m-1}^T)^T.$$

Перепишем замыкающую систему вида (5) в операторной форме

$$H(z) = 0, \quad (6)$$

где

$$H: R^N \rightarrow R^N, \quad N = m \times n.$$

Свойства замыкающих систем уравнений (5), (6) зависят от правой части f , исходного уравнения, формы граничных условий, области интегрирования $[a, b]$, точек пристрелки $u(t, y_{2j-1})$ и траекторий пристрелки $u(t, y_{2j-1})$, $v(t, y_{2j-1})$. Эти свойства наиболее полно характеризуются матрицами Якоби для соответствующих отображений H .

Для замыкающей системы уравнений (5) матрица Якоби будет иметь вид

$$\frac{\partial H}{\partial z} = \begin{bmatrix} \Phi_2^{(k)} & -\Omega_2^{(k)} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \Phi_4 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \Phi_{2m-2}^{(k)} & -\Omega_{2m-2}^{(k)} \\ G_1^{(k)} & 0 & \dots & 0 & G_{2m-1}^{(k)} \end{bmatrix},$$

$$\Phi_{2j}^{(k)} = \frac{\partial v(t_{2j}, y_{2j-1}^{(k)})}{\partial y_{2j-1}}, \quad \Omega_{2j}^{(k)} = \frac{\partial u(t_{2j}, y_{2j+1})}{\partial y_{2j+1}},$$

$$G_1^{(k)} = \frac{\partial g(P_{0,2m}^{(k)})}{\partial u} \Omega_0, \quad G_{2m-1}^{(k)} = \frac{\partial g(P_{0,2m}^{(k)})}{\partial v} \Phi_{2m}^{(k)}.$$

Пусть $y(t)$ – искомое решение исходной граничной задачи. Введем обозначения:

$$z^* = (y_1^{*T}, \dots, y_{2m-1}^{*T})^T. \quad (7)$$

Понятно, что $H(z^*)=0$, где z^* – решение исходной системы (1), (2).

Обозначим k -е приближение к решению z^* :

$$z^{(k)} = (y_1^{(k)T}, y_3^{(k)T}, \dots, y_{2m-1}^{(k)T})^T \in R^n.$$

Все оставшиеся приближения найдем, применяя модифицированный метод Ньютона, основанный на аппроксимации матрицы Якоби:

$$\frac{\partial H(z^{(k)})}{\partial z} \Delta z^{(k)} = -H(z^{(k)}).$$

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

$$y(t) = \begin{cases} v(t, y_{2j-1}^*), & t \in J_{2j-1}^{(-)}, \\ u(t, y_{2j-1}^*), & t \in J_{2j-1}^{(+)}, \quad j = \overline{1, m}. \end{cases} \quad (8)$$

В случае прямого направления матрицы-блоки для пристрелочных задач Коши будут иметь вид

$$\begin{cases} U'_{2j-1}(t) = \Phi_{2j-1}(u)U_{2j-1}(t), \\ U_{2j-1}(t_{2j-1}) = I, \quad t \in J_{2j-1}^{(+)}, \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \Phi_{2j-1}(u) = \frac{\partial f(t, u(t, y_{2j-1}))}{\partial u}, \\ U_{2j-1}(t) = \frac{\partial u(t, y_{2j-1})}{\partial u}. \end{cases} \quad (10)$$

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

$$\begin{cases} V'_{2j-1}(t) = \Phi_{2j-1}(v)V_{2j-1}(t), \\ V_{2j-1}(t_{2j-1}) = I, \quad t \in J_{2j-1}^{(-)}, \end{cases} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_{2j-1}(v) &= \frac{\partial f(t, v(t, y_{2j-1}))}{\partial v}, \\ V_{2j-1}(t) &= \frac{\partial v(t, y_{2j-1})}{\partial y_{2j-1}}, \quad j = \overline{1, m}, \end{aligned} \quad (12)$$

причем

$$\begin{cases} U_{2j-1}^{(2j)} = U_{2j-1}(t_{2j}), \\ V_{2j-1}^{(2j-2)} = V_{2j-1}(t_{2j-2}). \end{cases} \quad (13)$$

Построим последовательные приближения:

$$z^{(k+1)} = z^{(k)} + \Delta z^{(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

Найдем поправки $\Delta z^{(k)}$ в методе Ньютона:

$$\Delta z^{(k)} = (\Delta z_1^{(k)T}, \Delta z_3^{(k)T}, \dots, \Delta z_{2m-1}^{(k)T})^T, \quad (15)$$

где

$$H = (h_1^{(k)}, h_3^{(k)}, \dots, h_m^{(k)})^T, \quad h_i^{(k)} = h_i(z^{(k)}).$$

На точном решении z^* выполняется неравенство

$$\det D_m(z^*) \neq 0$$

и, следовательно, решение граничной задачи изолировано. Значит, при хорошем начальном приближении $z^{(0)}$ нетрудно обеспечить сходимость метода Ньютона. Вычислительные свойства метода Ньютона достаточно сильно зависят от свойств матрицы Якоби $\frac{\partial H}{\partial z}$.

Свойства матрицы Якоби, в свою очередь, определяются числом и длинами положительных $J_{2j-1}^{(+)}$ и отрицательных $J_{2j-1}^{(-)}$ подынтервалов пристрелки. Такая зависимость во многих случаях дает наглядную картину решения задач с пограничным слоем.

Для замыкающей системы уравнений в задаче Троеша [2] можно конкретизировать матрицу Якоби. Запишем ее в следующем виде:

$$\frac{\partial H(z^k)}{\partial z} = \begin{bmatrix} \Phi_2^{(k)} & -\Omega_2^{(k)} \\ G_1^{(k)} & G_3^{(k)} \end{bmatrix}.$$

Введем обозначения

$$H_0 = \frac{\partial H(z^{(0)})}{\partial z}$$

и образуем матрицу $B = H_0^T H_0$.

Вычислим числа обусловленности матрицы H_0 . Для этого определим верхнюю и нижнюю границы матрицы B :

$$z^{(k+1)} = B \left(\frac{z^{(k)}}{\|z^{(k)}\|} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots, z^{(k)} \in R^4. \quad (16)$$

Верхнюю границу $\beta(B)$ матрицы B найдем по правилу:

$$\beta(B) = \lim_{k \rightarrow \infty} \|z^{(k)}\|, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (17)$$

Введем обозначения:

$$C = \beta(B)E - B, \quad \omega^{(k)} \in R^4, \quad (18)$$

$$\beta(C) = \lim_{k \rightarrow \infty} \|\omega^{(k)}\|. \quad (19)$$

Определим нижнюю границу $\alpha(B)$ матрицы B :

$$\alpha(B) = \beta(B) - \beta(C). \quad (20)$$

Итерации векторов $z^{(k)}$ и $\omega^{(k)}$ проводились до тех пор, пока не достигалась точность:

$$\|z^{(s+1)} - z^{(s)}\| \leq \frac{1}{2} 10^{-5},$$

$$\|\omega^{(p+1)} - \omega^{(p)}\| \leq \frac{1}{2} 10^{-5}.$$

Искомое значение чисел обусловленности вычислим по формуле

$$\nu(H_0) = \sqrt{\frac{\beta(B)}{\alpha(B)}}.$$

Методы решения задач Коши, предназначенные для определения блоков

$$U_{2j-1}^{(2j)} \text{ и } V_{2j-1}^{(2j)},$$

можно видоизменять таким образом, чтобы свойства, характеризующие метод Ньютона, сохранялись.

Заключение. Предложенная схема метода множественной двусторонней пристрелки позволяет решать широкие классы граничных задач с пограничным слоем. С помощью этой методики была решена нелинейная граничная задача Троеша. Данная задача считается достаточно трудной в вычислительном отношении, и, как правило, на ней проверяется работа предлагаемого метода.

Литература

1. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1983. 200 с.
2. Холл Д., Уатт Д. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1989. 312 с.

References

1. Dekker K., Verver Ya. *Ustoychivost' metodov Runge-Kutta dlya zhestkikh nelineynykh differentsial'nykh uravneniy* [Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations]. Moscow, Mir Publ., 1983. 200 p.
2. Holl D., Uatt D. *Sovremennyye chislennyye metody resheniya obyknovennykh differentsial'nykh uravneniy* [Modern numerical methods for solving ordinary differential equation]. Moscow, Mir Publ., 1989. 312 p.

Информация об авторе

Соловьева Ирина Федоровна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: ira1234568@tut.by

Information about the author

Solov'yeva Irina Fedorovna – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: ira1234568@tut.by

Поступила 07.03.2016

УДК 517.977

А. А. Якименко

Белорусский государственный технологический университет

МОДАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ОДНОЙ СИСТЕМОЙ НЕЙТРАЛЬНОГО ТИПА

В статье рассматривается решение задачи модального управления для двумерной стационарной динамической системы с запаздывающим аргументом нейтрального типа с одним входом и одним запаздыванием по состоянию. Дается определение задачи модального управления для исследуемой системы. При решении задачи модального управления используются линейные регуляторы по типу обратной связи, содержащие как линейную, так и интегральную части. Эти регуляторы используют информацию как о текущем состоянии системы, так и векторы состояний и их производные в предыдущие моменты времени. Регуляторы получены в явной форме как элементарные функции параметров исходной системы и ее вектора состояния. Указан вид характеристического квазиполинома замкнутой этим регулятором исходной системы нейтрального типа.

Ключевые слова: системы нейтрального типа, модальное управление, регуляторы, обратная связь, запаздывание.

A. A. Yakimenka

Belarusian State Technological University

MODAL CONTROL FOR ONE NEUTRAL TYPE SYSTEM

The paper deals with the modal control problems for the stationary two-dimensional dynamical systems with retarded argument of neutral type with one input and one state delay. The definition of a modal control problem for the system is given. For the solution for such a problem we use linear regulators of feedback type, comprising both linear and integral part. These regulators use information on both the current state of the system, and the state vectors and their derivatives in previous times. Regulators are obtained in an explicit form as a basic function of the initial parameters of the system and its state vector. Characteristic quasipolynomial closed by this regulator original system of neutral type is obtained.

Key words: neutral type systems, modal control, regulators, feedback control, lag.

Введение. Задача модального управления является одной из основных задач теории управления. Такая задача хорошо изучена для систем без запаздывания. Для систем с запаздывающим аргументом [1] и систем нейтрального типа решение задачи модального управления значительно сложнее. Это обусловлено тем, что пространство состояний таких систем, как правило, бесконечномерно.

Основная часть. Рассмотрим линейную стационарную систему с запаздывающим аргументом нейтрального типа с одним входом и одним запаздыванием по состоянию:

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) = & A_0 x(t) + A_1 x(t-h) + \\ & + A_2 \dot{x}(t-h) + bu(t), \quad t > 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где $A_i, i=0, 1, 2$ – постоянные 2×2 -матрицы; $h > 0$ – постоянное запаздывание; b – ненулевой 2-вектор. Не ограничивая общности, считаем $b' = [0, 1]$ («'» означает транспонирование).

Присоединим к системе (1) регулятор вида

$$\begin{aligned} u(t) = & q'_{00} x(t) + \sum_{i=0}^L \sum_{j=1}^M q'_{ij} x^{(i)}(t-jh) + \\ & + \int_{-h}^0 g'(s) x(t+s) ds, \end{aligned} \quad (2)$$

где q_{00}, q_{ij} – 2-векторы; $g(s), s \in [-h, 0]$ – непрерывная 2-вектор-функция;

$$x^{(i)}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d^i}{dt^i} x(t), \quad x^{(0)}(t) \equiv x(t).$$

Характеристическое уравнение системы (1) имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \det [A_0 + A_1 e^{-\lambda h} + A_2 \lambda e^{-\lambda h} - \lambda I_2] & \equiv \\ & \equiv \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^2 \tilde{\alpha}_{ij} \lambda^i e^{-j\lambda h} = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где числа $\tilde{\alpha}_{ij}$ вычисляются как функции матриц $A_i, i=0, 1, 2$, в частности $\tilde{\alpha}_{00} = \det A_0$, $\tilde{\alpha}_{20} = 1$, $\tilde{\alpha}_{22} = \det A_2$.

Определение. Система (1) модально управляема регулятором вида (2), если для любых наперед заданных чисел $\alpha_{ij}, i=0, 1, 2, j=0, 1, 2, \alpha_{20} = 1$, найдется регулятор (2) такой, что характеристическое уравнение замкнутой системы (1), (2) имеет вид (ср. с (3)):

$$\begin{aligned} \det [A_0 + A_1 e^{-\lambda h} + A_2 \lambda e^{-\lambda h} - \lambda I_2 + bU(\lambda)] & \equiv \\ & \equiv \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^2 \alpha_{ij} \lambda^i e^{-j\lambda h} = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где $U(\lambda)$ – регулятор (2) в частотной области.

Введем (2×2)-матрицы:

$$A(\lambda) = A_0 + A_1 e^{-\lambda h} + A_2 \lambda e^{-\lambda h},$$

$$W(\lambda) = [A(\lambda)b, b], \lambda \in \mathbb{C}.$$

Рассмотрим слабо циклический случай:

$$\det W(\lambda) = c(\gamma_0 + e^{-\lambda h}), (c \neq 0).$$

Матрица $A(\lambda)$ в этом случае имеет следующий вид:

$$A(\lambda) = \begin{bmatrix} \beta_0 + \beta_1 e^{-\lambda h} + \beta_2 \lambda e^{-\lambda h} & c(\gamma_0 + e^{-\lambda h}) \\ a_1(\lambda) & a_2(\lambda) \end{bmatrix},$$

где $\beta_i, i = 0, 1, 2, \gamma_0$ – некоторые действительные числа; $a_j(\lambda), j = 1, 2$ – квазиполиномы:

$$a_i(\lambda) = a_{i0} + a_{i1} e^{-\lambda h} + a_{i2} \lambda e^{-\lambda h},$$

где $a_{ij} \in \mathbb{R}; i = 1, 2, j = 0, 1, 2$.

Регулятор вида (2) в частотной области будем искать в виде

$$U(\lambda) = \left(\frac{1}{c} \eta_1(\lambda) - a_1(\lambda), \eta_2(\lambda) - a_2(\lambda) \right).$$

Возможны два случая:

- i) $\beta_2 \gamma_0 + 1 = 0,$
- ii) $\beta_2 \gamma_0 + 1 \neq 0.$

Теорема 1. В случае i) система (1) модально управляема регулятором вида (2) тогда и только тогда, когда $\beta_0 - \beta_1 \gamma_0 \neq 0$.

Нетрудно показать, что в этом случае задачу модального управления решает следующий регулятор:

$$\eta_1(\lambda) = \beta_2 \frac{\alpha_{21} \beta_2 + \beta_2^2 + \alpha_{22} \lambda^3 e^{-\lambda h} + \beta_2 \times$$

$$\times \frac{\alpha_{11} \beta_2 + 2\beta_1 \beta_2 - \alpha_{22} \beta_0 + \alpha_{12} + \alpha_{10} \beta_2^2 + \alpha_{21} \beta_1 + \beta_0 \beta_2^2}{\beta_0 \beta_2 + \beta_1} \lambda^2 e^{-\lambda h} +$$

$$+ \beta_2 \frac{\alpha_{11} \beta_1 + 2\beta_0 \beta_1 \beta_2 + \beta_1^2 + \alpha_{10} \beta_0 \beta_2^2 + 2\alpha_{10} \beta_1 \beta_2}{\beta_0 \beta_2 + \beta_1} +$$

$$+ \frac{\alpha_{00} \beta_2^2 + \alpha_{01} \beta_2 + \alpha_{02} - \alpha_{12} \beta_0 + \beta_0^2 \beta_2^2}{\beta_0 \beta_2 + \beta_1} \lambda e^{-\lambda h} +$$

$$+ \beta_2 \frac{\beta_0 \beta_1^2 + \alpha_{10} \beta_0 \beta_1 \beta_2 - \alpha_{02} \beta_0 + \beta_0^2 \beta_1 \beta_2}{\beta_0 \beta_2 + \beta_1} +$$

$$+ \frac{\alpha_{00} \beta_1 \beta_2 + \alpha_{01} \beta_1 + \alpha_{10} \beta_1^2}{\beta_0 \beta_2 + \beta_1} e^{-\lambda h} + (\alpha_{00} + \beta_0^2 + \beta_0 \alpha_{10}) \beta_2,$$

$$\eta_2(\lambda) = \frac{\alpha_{21} \beta_2 + \beta_2^2 + \alpha_{22} \lambda^2 e^{-\lambda h} +$$

$$+ \frac{\alpha_{11} \beta_2 + \beta_0 \beta_2^2 + \alpha_{10} \beta_2^2 + \alpha_{12} + \beta_1 \beta_2}{\beta_0 \beta_2 + \beta_1} \lambda e^{-\lambda h} +$$

$$+ \frac{\beta_0 \beta_1 \beta_2 + \alpha_{10} \beta_0 \beta_2^2 + \beta_0^2 \beta_2^2 + \alpha_{00} \beta_2^2}{\beta_0 \beta_2 + \beta_1} +$$

$$+ \frac{\alpha_{10} \beta_2 + \alpha_{10} \beta_1 \beta_2 + \alpha_{02}}{\beta_0 \beta_2 + \beta_1} e^{-\lambda h} - \beta_0 - \alpha_{10}.$$

Рассмотрим случай ii). Введем обозначения:

$$\xi = \frac{\beta_0 - \beta_1 \gamma_0}{1 + \beta_2 \gamma_0}, \quad \delta_1 = \gamma_0 + e^{-\xi h}.$$

Теорема 2. Для того, чтобы система (1) в случае ii) была модально управляема регулятором вида (2), необходимо и достаточно выполнения условия $\delta_1 \neq 0$.

Можно показать, что задачу модального управления решает регулятор вида

$$\eta_1(\lambda) = \left(\frac{-\beta_2 - \alpha_{21} + \alpha_{22} \gamma_0}{1 + \beta_2 \gamma_0} \beta_2 - \alpha_{22} \right) \lambda^2 e^{-\lambda h} +$$

$$+ \left(- \frac{(\beta_2 + \alpha_{21} - \alpha_{22} \gamma_0)(\beta_0 \beta_2 + \beta_1)}{1 + \beta_2 \gamma_0} - \alpha_{12} - \right.$$

$$\left. - \frac{\alpha_{10} \beta_2^2 \gamma_0 - \alpha_{12} \beta_2 \gamma_0^2 + \alpha_{22} \beta_0 \beta_2 \gamma_0^2 - \alpha_{21} \beta_0 \beta_2 \gamma_0}{(1 + \beta_2 \gamma_0)^2} - \right.$$

$$\left. - \frac{\alpha_{11} \beta_2 \gamma_0 + \beta_0 \beta_2 + \alpha_{10} \beta_2 + \beta_1 - \alpha_{12} \gamma_0}{(1 + \beta_2 \gamma_0)^2} \beta_2 - \right.$$

$$\left. - \frac{-\alpha_{21} \beta_1 \gamma_0 + \alpha_{11} + \alpha_{22} \beta_1 \gamma_0^2}{(1 + \beta_2 \gamma_0)^2} \beta_2 \right) \lambda e^{-\lambda h} -$$

$$- \frac{\beta_2 + \alpha_{21} - \alpha_{22} \gamma_0}{1 + \beta_2 \gamma_0} \beta_0 \beta_1 e^{-\lambda h} - \frac{\beta_2 + \alpha_{21} - \alpha_{22} \gamma_0}{1 + \beta_2 \gamma_0} \beta_0^2 -$$

$$- \frac{3\alpha_{00} \beta_2^2 \gamma_0^2 + \alpha_{12} \beta_0 \gamma_0^2 - \alpha_{21} \beta_0^3 \gamma_0 - \alpha_{11} \beta_0 \gamma_0 + \alpha_{22} \beta_0 \beta_1 \gamma_0^2 e^{-\xi h}}{\delta_1 (1 + \beta_2 \gamma_0)^3} -$$

$$- \frac{3\alpha_{00} \beta_2 \gamma_0 - \beta_0 \beta_1 \gamma_0 + \alpha_{22} \beta_0^2 \gamma_0^2 - \alpha_{21} \beta_0 \beta_1 \gamma_0 e^{-\xi h}}{\delta_1 (1 + \beta_2 \gamma_0)^3} -$$

$$- \frac{\alpha_{22} \beta_0 \beta_1 \beta_2 \gamma_0^4 + \alpha_{21} \beta_1^2 \gamma_0^2 e^{-\xi h}}{\delta_1 (1 + \beta_2 \gamma_0)^3} -$$

$$- \frac{\alpha_{00} - \beta_0 \beta_1 \beta_2 \gamma_0^2 + \alpha_{01} e^{-\xi h} + 2\alpha_{10} \beta_0 \beta_2 \gamma_0}{\delta_1 (1 + \beta_2 \gamma_0)^3} -$$

$$- \frac{2\alpha_{11} \beta_0 \beta_2 \gamma_0^2 + 2\alpha_{12} \beta_0 \beta_2 \gamma_0^3 + \alpha_{21} \beta_0 \beta_1 \gamma_0^2}{\delta_1 (1 + \beta_2 \gamma_0)^3} -$$

$$- \frac{\alpha_{22} \beta_0 \beta_1 \gamma_0^3 + \alpha_{10} \beta_0 + \beta_0^2 + \beta_0^2 \beta_2 \gamma_0}{\delta_1 (1 + \beta_2 \gamma_0)^3} -$$

$$- \frac{2\alpha_{02} \beta_2 \gamma_0^2 e^{-\xi h} + \alpha_{12} \beta_0 \beta_2^2 \gamma_0^4 + \alpha_{02} \beta_2^2 \gamma_0^3 e^{-\xi h}}{\delta_1 (1 + \beta_2 \gamma_0)^3} -$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\alpha_{02}\gamma_0 e^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_0\beta_2^3\gamma_0^3 e^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_0\beta_2\gamma_0^2 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \frac{\alpha_{10}\beta_1 e^{-\xi h} + \alpha_{00}\beta_2 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \\
& - \frac{2\alpha_{01}\beta_2\gamma_0 e^{-\xi h} - \alpha_{11}\beta_0\beta_2\gamma_0 e^{-\xi h} - \alpha_{11}\beta_0\beta_2^2\gamma_0^2 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \frac{\alpha_{00}\beta_2^2\gamma_0^2 e^{-\xi h} + \alpha_{01}\beta_2^2\gamma_0^2 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \\
& - \frac{\alpha_{00}\beta_2^3\gamma_0^3 + 2\alpha_{00}\beta_2^2\gamma_0 e^{-\xi h} + \alpha_{10}\beta_1\beta_2\gamma_0 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \frac{\alpha_{11}\beta_0\beta_2^2\gamma_0^3 + \alpha_{22}\beta_0^2\beta_2\gamma_0^3 - \alpha_{21}\beta_0^2\beta_2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \\
& - \frac{\alpha_{11}\beta_1\gamma_0 e^{-\xi h} - \alpha_{22}\beta_1^2\gamma_0^2 e^{-\xi h} + \alpha_{10}\beta_0\beta_2^2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \frac{\alpha_{10}\beta_0\beta_2 e^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_1\gamma_0^2 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \\
& - \frac{\beta_0^2\beta_2 e^{-\xi h} - \beta_1^2\gamma_0 e^{-\xi h} + \beta_0\beta_1 e^{-\xi h} - \alpha_{22}\beta_0\beta_1\beta_2\gamma_0^3 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \frac{\alpha_{21}\beta_0\beta_1\beta_2\gamma_0^3 + \alpha_{12}\beta_1\beta_2\gamma_0^3 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \\
& - \frac{\alpha_{22}\beta_0^3\beta_2\gamma_0^2 e^{-\xi h} - \alpha_{21}\beta_0^3\beta_2\gamma_0 e^{-\xi h} - \alpha_{11}\beta_1\beta_2\gamma_0^2 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \frac{\beta_0\beta_1\beta_2\gamma_0 + \alpha_{10}\beta_0\beta_2^2\gamma_0 e^{-\xi h} - \alpha_{10}\beta_2^2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} - \\
& - \left(\frac{-\alpha_{12}\beta_2\gamma_0^2 + \alpha_{22}\beta_0\beta_2\gamma_0^2 - \alpha_{21}\beta_0\beta_2\gamma_0 + \alpha_{11}\beta_2\gamma_0 + \beta_0\beta_2}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} + \right. \\
& + \left. \frac{\alpha_{10}\beta_2 + \beta_1 - \alpha_{12}\gamma_0 - \alpha_{21}\beta_1\gamma_0 + \alpha_{11} + \alpha_{22}\beta_1\gamma_0^2}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} \right) \beta_1 e^{-\lambda h} - \\
& - \left(\frac{\alpha_{10}\beta_2^2\gamma_0 - \alpha_{12}\beta_2\gamma_0^2 + \alpha_{22}\beta_0\beta_2\gamma_0^2 - \alpha_{21}\beta_0\beta_2\gamma_0}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} + \right. \\
& + \frac{\alpha_{11}\beta_2\gamma_0 + \beta_0\beta_2 + \alpha_{10}\beta_2 + \beta_1}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} + \\
& + \left. \frac{-\alpha_{12}\gamma_0 - \alpha_{21}\beta_1\gamma_0 + \alpha_{11} + \alpha_{22}\beta_1\gamma_0^2}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} \right) \beta_0 - \\
& - \left(\frac{\alpha_{02}\gamma_0 + 2\beta_0\beta_1\beta_2\gamma_0 + \alpha_{02}e^{-\xi h} - \beta_0^2\beta_2 + 2\alpha_{02}\beta_2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \right. \\
& + \frac{\alpha_{02}\beta_2^2\gamma_0^3 - \beta_1^2\beta_2\gamma_0^2 - \alpha_{12}\beta_0\beta_2^2\gamma_0^3}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
& + \frac{\alpha_{12}\beta_1\beta_2^2\gamma_0^4 + \alpha_{10}\beta_1\beta_2^2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
& + \frac{\alpha_{12}\beta_1\beta_2\gamma_0^3 - \alpha_{12}\beta_0\beta_2\gamma_0^2 e^{-\xi h} + \alpha_{21}\beta_0^3\beta_2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
& + \frac{\alpha_{22}\beta_1^2\beta_2\gamma_0^4 - \alpha_{22}\beta_0^2\beta_2\gamma_0^2 + \alpha_{21}\beta_1^2\beta_2\gamma_0^3 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
& + \frac{3\alpha_{02}\beta_2\gamma_0 e^{-\xi h} + 3\alpha_{02}\beta_2^2\gamma_0^2 e^{-\xi h} + \alpha_{02}\beta_2^3\gamma_0^3 e^{-\xi h}}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
& + \frac{2\alpha_{21}\beta_0\beta_1\beta_2\gamma_0^2 + 2\alpha_{22}\beta_0\beta_1\beta_2\gamma_0^3 - \alpha_{11}\beta_1\beta_2^2\gamma_0^3 + \alpha_{11}\beta_0\beta_2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
& + \frac{\alpha_{10}\beta_1\beta_2\gamma_0 - \alpha_{11}\beta_1\beta_2\gamma_0^2 - \alpha_{01}\beta_2\gamma_0 - \alpha_{00}\beta_2^2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
& + \frac{-\alpha_{10}\beta_0\beta_2^2\gamma_0 - \alpha_{11}\beta_1\beta_2^2\gamma_0^2 - \alpha_{10}\beta_0\beta_2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
& + \left. \frac{\alpha_{01}\beta_2^3\gamma_0^3 + 2\alpha_{01}\beta_2^2\gamma_0^2 - 2\alpha_{00}\beta_2^2\gamma_0 - \alpha_{00}\beta_2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} \right) e^{-\lambda h} - \\
& - \left(\frac{\alpha_{11}\beta_0\beta_1\gamma_0 - \alpha_{10}\beta_0^2\beta_2 - \alpha_{02}\beta_1\gamma_0^2 - \alpha_{12}\beta_0\beta_1\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \right. \\
& + \frac{-\alpha_{00}\beta_1\beta_2^2\gamma_0^2 - \alpha_{11}\beta_1^2\beta_2\gamma_0^3 - \beta_0^3\beta_2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \\
& + \frac{\alpha_{01}\beta_1\gamma_0 - \alpha_{22}\beta_1^3\gamma_0^4 + \alpha_{21}\beta_1^3\gamma_0^3 - \alpha_{00}\beta_0\beta_2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \\
& + \frac{\alpha_{22}\beta_0\beta_1^2\beta_2\gamma_0^4 + \alpha_{11}\beta_0^2\beta_2^2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \\
& + \frac{-\alpha_{11}\beta_1^2\gamma_0^2 + 2\alpha_{11}\beta_0\beta_1^2\gamma_0 + \alpha_{10}\beta_1^2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \\
& + \frac{-\alpha_{10}\beta_0\beta_1 + \alpha_{12}\beta_1^2\gamma_0^3 - \alpha_{00}\beta_1 - \beta_1^3\gamma_0^2 + \alpha_{10}\beta_1^2\beta_2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \\
& + \frac{\alpha_{21}\beta_0^3\beta_1\gamma_0 + \alpha_{01}\beta_1\beta_2^3\gamma_0^3 - \alpha_{22}\beta_0^3\beta_1\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \\
& + \frac{\alpha_{12}\beta_1^2\beta_2\gamma_0^4 + 2\alpha_{01}\beta_1\beta_2\gamma_0^2 - 2\alpha_{00}\beta_1\beta_2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \\
& + \left. \frac{-\alpha_{02}\beta_0\beta_2\gamma_0^2 - 2\alpha_{02}\beta_0\beta_2^2\gamma_0^3 - 2\alpha_{21}\beta_0\beta_1^2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{2\alpha_{22}\beta_0\beta_1^2\gamma_0^3 - 2\alpha_{02}\beta_1\beta_2\gamma_0^3 - \alpha_{02}\beta_1\beta_2^2\gamma_0^4}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \frac{-\alpha_{10}\beta_2^2\gamma_0^2 - \beta_0\beta_2^2\gamma_0^2 - 2\beta_0\beta_2\gamma_0 - \alpha_{10} - 2\alpha_{10}\beta_2\gamma_0 - \beta_0}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} + \\
 & + \frac{\alpha_{01}\beta_0\beta_2\gamma_0 + 2\alpha_{01}\beta_0\beta_2^2\gamma_0^2 + 2\beta_0^2\beta_1\beta_2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \left(\frac{-\alpha_{00}\beta_2^2\gamma_0^2 - \alpha_{12}\beta_0\gamma_0^2 + \alpha_{01}\beta_2^3\gamma_0^3 + \alpha_{21}\beta_0^2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \right. \\
 & + \frac{-\beta_0\beta_1^2\beta_2\gamma_0^2 - \alpha_{02}\beta_0\beta_2^3\gamma_0^4 - \alpha_{11}\beta_0\beta_1\beta_2^2\gamma_0^3}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \frac{\alpha_{11}\beta_0\gamma_0 - 2\alpha_{02}\beta_2\gamma_0^3 + \alpha_{12}\beta_1\gamma_0^3}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
 & + \frac{-2\alpha_{21}\beta_0^2\beta_1\beta_2\gamma_0^2 + 2\alpha_{22}\beta_0^2\beta_1\beta_2\gamma_0^3 + \alpha_{10}\beta_0\beta_1\beta_2^2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \frac{2\alpha_{01}\beta_2\gamma_0^2 - \alpha_{02}\beta_2^2\gamma_0^4 - 2\alpha_{00}\beta_2\gamma_0 + 2\beta_0\beta_1\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
 & + \frac{\alpha_{12}\beta_0\beta_1\beta_2^2\gamma_0^4 + \alpha_{21}\beta_0\beta_1^2\beta_2\gamma_0^3}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \frac{\alpha_{10}\beta_1\gamma_0 - \alpha_{22}\beta_1^2\gamma_0^4 - \alpha_{22}\beta_0^2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
 & + \frac{-\alpha_{12}\beta_0^2\beta_2^2\gamma_0^3 - \alpha_{12}\beta_0^2\beta_2\gamma_0^2 + \alpha_{21}\beta_0^3\beta_2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \frac{\alpha_{21}\beta_1^2\gamma_0^3 - \alpha_{00} + \alpha_{01}\gamma_0 - \alpha_{02}\gamma_0^2 + \alpha_{10}\beta_1\beta_2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
 & + \frac{-\alpha_{22}\beta_0^3\beta_2\gamma_0^2 + \alpha_{11}\beta_0^2\beta_2\gamma_0 - \alpha_{10}\beta_0^2\beta_2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} + \frac{-\alpha_{11}\beta_1\beta_2\gamma_0^3 + \alpha_{12}\beta_1\beta_2\gamma_0^4 - \alpha_{10}\beta_0\beta_2\gamma_0 + \alpha_{11}\beta_0\beta_2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
 & + \frac{-\alpha_{00}\beta_0\beta_2^3\gamma_0^2 + \alpha_{01}\beta_0\beta_2^3\gamma_0^3 - 2\alpha_{00}\beta_0\beta_2^2\gamma_0}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^4} \left. \right) \frac{e^{-\xi h} - e^{-\lambda h}}{\lambda - \xi}, \\
 & \eta_2(\lambda) = \\
 & = \frac{-\beta_2 + \alpha_{22}\gamma_0 - \alpha_{21} - \beta_2^2\gamma_0 - \alpha_{21}\beta_2\gamma_0 + \alpha_{22}\beta_2\gamma_0^2}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} \lambda e^{-\lambda h} + \\
 & + \frac{-2\beta_0\beta_2 - \beta_0\beta_2^2\gamma_0 - \beta_1 + \alpha_{21}\beta_1\gamma_0 + \alpha_{12}\beta_2\gamma_0^2 + \alpha_{22}\beta_0\gamma_0}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} e^{-\lambda h} + \\
 & + \frac{-\alpha_{22}\beta_1\gamma_0^2 + \alpha_{12}\gamma_0 - \alpha_{11} - \alpha_{21}\beta_0 - \alpha_{10}\beta_2^2\gamma_0 - \alpha_{10}\beta_2 - \alpha_{11}\beta_2\gamma_0}{(1+\beta_2\gamma_0)^2} e^{-\lambda h} + \\
 & + \frac{\alpha_{12}\beta_0\beta_2\gamma_0^3 - 2\alpha_{21}\beta_0\beta_1\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} + \\
 & + \frac{2\alpha_{22}\beta_0\beta_1\gamma_0^3 - \alpha_{10}\beta_0 - \beta_0^2 - \beta_1^2\gamma_0^2}{\delta_1(1+\beta_2\gamma_0)^3} \left. \right) \times \\
 & \times \frac{e^{-\xi h} - e^{-\lambda h}}{\lambda - \xi}.
 \end{aligned}$$

Заключение. Таким образом, полученные регуляторы решают задачу модального управления в слабо циклическом случае.

Литература

1. Якименко А. А. Модальное управление одной запаздывающей системой // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 3–7.

References

1. Yakimenka A. A. Modal control for one delayed system. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2013, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 3–7 (In Russian).

Информация об авторе

Якименко Андрей Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: yakimenko@belstu.by

Information about the author

Yakimenka Andrei Aliksandravich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: yakimenko@belstu.by

Поступила 14.03.2016

УДК 514.76

Н. П. Можей

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

**ТРЕХМЕРНЫЕ СИММЕТРИЧЕСКИЕ МНОГООБРАЗИЯ
И ТЕНЗОРЫ РИЧЧИ НА НИХ**

Работа посвящена исследованию симметрических пространств. Представлена локальная классификация трехмерных симметрических однородных пространств, что эквивалентно описанию эффективных пар алгебр Ли, допускающих инвариантную невырожденную симметрическую билинейную форму на изотропном модуле. Описаны все инвариантные линейные связности на таких пространствах вместе с их тензорами кривизны и кручения, алгебрами голономии, секционными кривизнами, тензорами Риччи. В статье использован алгебраический подход для описания линейных связностей, методы теории групп Ли, алгебр Ли и однородных пространств. Методы, предложенные в работе, могут быть применены для анализа физических моделей, а алгоритмы классификации однородных пространств, линейных связностей на этих пространствах, тензоров кривизны и кручения, алгебр голономии, секционных кривизн, тензоров Риччи могут быть компьютеризованы и использованы для решения подобных задач в больших размерностях.

Ключевые слова: симметрическое пространство, алгебра Ли, линейная связность, тензор Риччи.

N. P. Mozhey

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

THREE-DIMENSIONAL SYMMETRIC SPACES AND RICHI TENSORS ON THEM

The paper is devoted to the study of symmetric spaces. We present the local classification of three-dimensional symmetric homogeneous spaces. It is equivalent to the description of effective pairs of Lie algebras supplied with an invariant nondegenerate symmetric bilinear form on the isotropy module. We describe all invariant linear connections on the such spaces together with their curvature and torsion tensors, holonomy algebras, sectional curvatures, Richi tensors. In this article we used the algebraic approach for description of linear connections, methods of the theory of Lie groups, Lie algebras and homogeneous spaces. The methods stated in the work can be applied for the analysis of physical models, and algorithms classification of homogeneous spaces, linear connections on these spaces, curvature and torsion tensors, holonomy algebras, sectional curvatures, Richi tensors can be computerized and used for the decision of similar problems in large dimensions.

Key words: symmetric space, Lie algebra, linear connection, Richi tensor.

Введение. Идея многообразия как геометрического объекта, обладающего своей собственной внутренней геометрией, принадлежит Б. Риману. Это понятие появилось до понятия абстрактного топологического пространства, и первоначально многообразие всегда было снабжено метрикой. Симметрическое пространство – это пространство линейной связности без кручения, тензор кривизны которого сохраняется при параллельном перенесении. Название «симметрическое» связано с одним важным геометрическим свойством таких пространств, которое может быть принято за определение: геодезическая симметрия относительно любой точки есть автоморфизм пространства, т. е. такое преобразование, при котором заданная связность переходит в себя.

Потоки Риччи ввел Р. Гамильтон, он же получил глубокие результаты в теории трехмерных многообразий. В работах, связанных с доказательством гипотезы Пуанкаре, потоки Риччи

римановых многообразий использовались как важное техническое средство, было получено много результатов о существовании и свойствах таких потоков (см., например, [1]). Представляет интерес и изучение геометрических свойств метрик, входящих в поток Риччи. Поток Риччи задается через тензор Риччи, который определяет кривизну многообразия в одномерном направлении.

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: секционной кривизной, кривизной Риччи или скалярной кривизной. Впервые открытые двумерные поверхности неотрицательной гауссовой кривизны изучал Кон-Фоссен. В двумерном случае все указанные кривизны совпадают, эта связь достаточно просто описывается с помощью теоремы Гаусса – Бонне.

В многомерном случае теоремы, аналогичной теореме Гаусса – Бонне, нет, а возможность серьезного изучения многомерных римановых многообразий появилась после доказательства теоремы сравнения Рауха и Александра – Топоногова. Используя эти теоремы и другие, часто удается получить те или иные геометрические характеристики риманова многообразия, а из уже имеющихся геометрических свойств извлечь информацию и о топологическом строении риманова многообразия. Первым результатом в многомерном случае была теорема о цилиндре, обобщающая аналогичную теорему Кон-Фоссена для двумерных поверхностей.

1. Основные определения. Пусть M – дифференцируемое многообразие, на котором транзитивно действует группа \bar{G} , (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 $G \subset \bar{G}$. Пусть $\bar{\mathfrak{g}}$ – алгебра Ли группы Ли \bar{G} , а \mathfrak{g} – подалгебра, соответствующая подгруппе G . Инвариантные римановы метрики \mathbf{g} на M находятся во взаимно однозначном соответствии с инвариантными симметрическими невырожденными билинейными формами B на G -модуле $\bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$, т. е. каждое риманово однородное пространство (\bar{G}, M, \mathbf{g}) , $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} \leq 4$ описывается тройкой $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, B)$. Линейной связностью на паре $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ будем называть такое отображение $\Lambda: \bar{\mathfrak{g}} \rightarrow \mathfrak{gl}(V)$, где $V = \bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$, что его ограничение на \mathfrak{g} есть изотропное представление подалгебры, а все отображение является \mathfrak{g} -инвариантным. Хорошо известно (см., например, [2]), что инвариантные линейные связности на однородном пространстве (M, G) находятся во взаимно однозначном соответствии с линейными связностями на паре $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$. Тензор кручения имеет вид

$$T(x_V, y_V) = \Lambda(x)y_V - \Lambda(y)x_V - [x, y]_V$$

для всех $x, y \in \bar{\mathfrak{g}}$, а тензор кривизны –

$$R(x_V, y_V) = [\Lambda(x), \Lambda(y)] - \Lambda([x, y]).$$

Алгеброй голономии связности на паре $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ называется подалгебра вида

$$V + [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), V] + [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), V]] + \dots,$$

где $V = \{[\Lambda(x), \Lambda(y)] - \Lambda([x, y]) \mid x, y \in \bar{\mathfrak{g}}\}$.

2. Классификация симметрических пространств.

Теорема 1. Локально однородное симметрическое пространство, допускающее риманову метрику, такое, что $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} = 3$ и $\mathfrak{g} \neq \{0\}$, эквивалентно одной и только одной из следующих троек:

Таблица умножения							B		
	e_1	u_1	u_2	u_3					
e_1	0	$-u_2$	u_1	0	ε_1	0	0	$\varepsilon_1, \varepsilon_2 = \pm 1$	
u_1	u_2	0	0	0	0	ε_1	0		
u_2	$-u_1$	0	0	0	0	0	ε_2		
u_3	0	0	0	0					
номер 1.3.1									
	e_1	u_1	u_2	u_3					
e_1	0	$-u_2$	u_1	0	a	0	0	$a \neq 0$	
u_1	u_2	0	$\pm e_1$	0	0	a	0		
u_2	$-u_1$	$\mp e_1$	0	0	0	0	± 1		
u_3	0	0	0	0					
номер 1.3.5 и 1.3.6									
	e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3			
e_1	0	e_3	$-e_2$	$-u_3$	0	u_1	1	0	0
e_2	$-e_3$	0	e_1	$-u_2$	u_1	0	0	1	0
e_3	e_2	$-e_1$	0	0	$-u_3$	u_2	0	0	1
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			
номер 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	a	0	0
e_2	$-e_3$	0	e_1	$-u_2$	u_1	0	0	a	0
e_3	e_2	$-e_1$	0	0	$-u_3$	u_2	0	0	a
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			
номер 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	a	0	0
e_2	$-e_3$	0	e_1	$-u_2$	u_1	0	0	a	0
e_3	e_2	$-e_1$	0	0	$-u_3$	u_2	0	0	a
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			
номер 3.5.3									

Здесь e_1, e_2, e_3 – базис \mathfrak{g} , u_1, u_2, u_3 – базис, дополнительный к \mathfrak{g} в $\bar{\mathfrak{g}}$.

Кроме римановой метрики псевдориманову метрику сигнатуры (2, 1) допускают следующие однородные пространства из приведенных в теореме: 1.3.1 при $\varepsilon_1\varepsilon_2 < 0$, 1.3.5, 1.3.6.

Теорема 2. Локально однородное симметрическое пространство, допускающее только псевдориманову метрику, такое, что $\text{codim}_{\bar{\mathfrak{g}}}\mathfrak{g} = 3$ и $\mathfrak{g} \neq \{0\}$, эквивалентно одной и только одной из следующих троек:

Таблица умножения							B		
	e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3			
e_1	0	e_2	$-e_3$	u_1	0	$-u_3$	0	0	1
e_2	$-e_2$	0	e_1	0	u_1	u_2	0	-1	0
e_3	e_3	$-e_1$	0	u_2	u_3	0	1	0	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			
номер 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	$-u_3$	<table border="1"> <tr><td>0</td><td>0</td><td>a</td></tr> <tr><td>0</td><td>$-a$</td><td>0</td></tr> <tr><td>a</td><td>0</td><td>0</td></tr> </table> $a \neq 0$	0	0	a	0	$-a$	0	a	0	0
0	0	a														
0	$-a$	0														
a	0	0														
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										
номер 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	$-u_3$	<table border="1"> <tr><td>0</td><td>0</td><td>a</td></tr> <tr><td>0</td><td>$-a$</td><td>0</td></tr> <tr><td>a</td><td>0</td><td>0</td></tr> </table> $a \neq 0$	0	0	a	0	$-a$	0	a	0	0
0	0	a														
0	$-a$	0														
a	0	0														
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										
номер 3.4.3																
	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3											
e_1	0	e_2	u_1	0	$-u_3$	<table border="1"> <tr><td>0</td><td>0</td><td>1</td></tr> <tr><td>0</td><td>-1</td><td>0</td></tr> <tr><td>1</td><td>0</td><td>0</td></tr> </table>	0	0	1	0	-1	0	1	0	0	
0	0	1														
0	-1	0														
1	0	0														
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											
номер 2.21.1																
	e_1	u_1	u_2	u_3												
e_1	0	0	u_1	u_2	<table border="1"> <tr><td>0</td><td>0</td><td>1</td></tr> <tr><td>0</td><td>-1</td><td>0</td></tr> <tr><td>1</td><td>0</td><td>0</td></tr> </table>	0	0	1	0	-1	0	1	0	0		
0	0	1														
0	-1	0														
1	0	0														
u_1	0	0	0	0												
u_2	$-u_1$	0	0	0												
u_3	$-u_2$	0	0	0												
номер 1.8.1																
	e_1	u_1	u_2	u_3												
e_1	0	0	u_1	u_2	<table border="1"> <tr><td>0</td><td>0</td><td>1</td></tr> <tr><td>0</td><td>-1</td><td>0</td></tr> <tr><td>1</td><td>0</td><td>0</td></tr> </table>	0	0	1	0	-1	0	1	0	0		
0	0	1														
0	-1	0														
1	0	0														
u_1	0	0	0	0												
u_2	$-u_1$	0	0	$\pm e_1$												
u_3	$-u_2$	0	$\mp e_1$	0												
номер 1.8.4 и 1.8.5																
	e_1	u_1	u_2	u_3												
e_1	0	u_1	$-u_2$	0	<table border="1"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>0</td></tr> <tr><td>1</td><td>0</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>0</td><td>± 1</td></tr> </table>	0	1	0	1	0	0	0	0	± 1		
0	1	0														
1	0	0														
0	0	± 1														
u_1	$-u_1$	0	0	0												
u_2	u_2	0	0	0												
u_3	0	0	0	0												
номер 1.1.1																
	e_1	u_1	u_2	u_3												
e_1	0	u_1	$-u_2$	0	<table border="1"> <tr><td>0</td><td>a</td><td>0</td></tr> <tr><td>a</td><td>0</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>0</td><td>± 1</td></tr> </table> $a \neq 0$	0	a	0	a	0	0	0	0	± 1		
0	a	0														
a	0	0														
0	0	± 1														
u_1	$-u_1$	0	e_1	0												
u_2	u_2	$-e_1$	0	0												
u_3	0	0	0	0												
номер 1.1.5																
	e_1	u_1	u_2	u_3												
e_1	0	u_1	$-u_2$	0	<table border="1"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>0</td></tr> <tr><td>1</td><td>0</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>0</td><td>a</td></tr> </table> $a \neq 0$	0	1	0	1	0	0	0	0	a		
0	1	0														
1	0	0														
0	0	a														
u_1	$-u_1$	0	u_3	0												
u_2	u_2	$-u_3$	0	0												
u_3	0	0	0	0												
номер 1.1.6																

Доказательство основано на классификации псевдоримановых пространств, приведенной в [3].

Для указанных однородных пространств находим инвариантные линейные связности.

Прямыми вычислениями получаем, что, например, в случаях 3.5.1, 3.5.2, 3.5.3 связность в базисе u_1, u_2, u_3 имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{2,3} \\ 0 & -p_{2,3} & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & -p_{2,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ p_{2,3} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 0 & p_{2,3} & 0 \\ -p_{2,3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Для 1.3.1–1.3.6 связность выглядит следующим образом:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & p_{1,3} \\ 0 & 0 & p_{2,3} \\ p_{3,1} & p_{3,2} & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & -p_{2,3} \\ 0 & 0 & p_{1,3} \\ -p_{3,2} & p_{3,1} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} r_{1,1} & r_{1,2} & 0 \\ -r_{1,2} & r_{1,1} & 0 \\ 0 & 0 & r_{3,3} \end{pmatrix}.$$

В случаях 3.4.1, 3.4.2, 3.4.3, 2.21.1 связность имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & p_{1,2} & 0 \\ 0 & 0 & p_{1,2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -p_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{1,2} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -p_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & -p_{1,2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Для 1.1.1, 1.1.5, 1.1.6 связность выглядит следующим образом:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & p_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_{3,2} & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q_{2,3} \\ q_{3,1} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} r_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & r_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & r_{3,3} \end{pmatrix}.$$

В случаях 1.8.1, 1.8.4, 1.8.5 связность имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & p_{1,2} & p_{1,3} \\ 0 & 0 & p_{1,2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -p_{1,2} & q_{1,2} & q_{1,3} \\ 0 & 0 & q_{1,2} + p_{1,3} \\ 0 & 0 & p_{1,2} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} r_{1,1} & r_{1,2} & r_{1,3} \\ -p_{1,2} & r_{1,1} + q_{1,2} & r_{1,2} + q_{1,3} \\ 0 & -p_{1,2} & r_{1,1} + 2q_{1,2} + p_{1,3} \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим теперь случаи 3.4.2 и 3.4.3. Не нарушая общности, можно считать, что $a = p_{1,2} \geq 0$. Поскольку тензоры кривизны и кручения инвариантны относительно действия группы Ли, то они однозначно определяются тензорами на касательном пространстве к многообразию, причем эти тензоры инвариантны относительно изотропного действия. Тензор кривизны:

$$R(u_1, u_2) = \begin{pmatrix} 0 & a^2 \mp 1 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \mp 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$R(u_1, u_3) = \begin{pmatrix} -a^2 \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \mp 1 \end{pmatrix},$$

$$R(u_2, u_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -a^2 \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & -a^2 \pm 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Тензор кручения:

$$T(u_1, u_2) = 2au_1, T(u_1, u_3) = 2au_2, T(u_2, u_3) = 2au_3.$$

Алгебра голономии совпадает с трехмерным неприводимым представлением $sl(2, \mathbb{R})$ при $a^2 \neq \pm 1$ и коммутативна в противном случае. Аналогично рассматриваются остальные случаи.

Для указанных выше симметрических пространств найдем также секционную кривизну:

$$K(u_i, u_j) = \frac{B(R(u_i, u_j)u_i, u_j)}{B(u_i, u_i)B(u_j, u_j) - B(u_i, u_j)^2}.$$

Номер тройки	$K(u_1, u_2)$	$K(u_1, u_3)$	$K(u_2, u_3)$
1.3.1	0	0	0
1.3.5	$\frac{1}{a}$	0	0
1.3.6	$-\frac{1}{a}$	0	0
3.5.1	0	0	0
3.5.2	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$	$\frac{1}{a}$
3.5.3	$-\frac{1}{a}$	$-\frac{1}{a}$	$-\frac{1}{a}$

3. Классификация тензоров Риччи. Тензорное поле Риччи S – ковариантное тензорное поле степени 2, такое, что

$$S(x, y) = \text{tr } v \rightarrow R(v, x)y \text{ для } x, y, v \in T_x(M).$$

Теорема 3. Тензоры Риччи симметрических римановых однородных пространств имеют следующий вид:

3.5.1

$-2p_{2,3}^2$	0	0
0	$-2p_{2,3}^2$	0
0	0	$-2p_{2,3}^2$

3.5.2

$-2p_{2,3}^2 - 2$	0	0
0	$-2p_{2,3}^2 - 2$	0
0	0	$-2p_{2,3}^2 - 2$

3.5.3

$-2p_{2,3}^2 + 2$	0	0
0	$-2p_{2,3}^2 + 2$	0
0	0	$-2p_{2,3}^2 + 2$

1.3.1

$p_{2,3}p_{3,2} + p_{1,3}p_{3,1} - p_{3,1}r_{1,1} + p_{3,2}r_{1,2} + r_{3,3}p_{3,1}$	$p_{1,3}p_{3,2} - p_{2,3}p_{3,1} - p_{3,1}r_{1,2} - p_{3,2}r_{1,1} + r_{3,3}p_{3,2}$	0
$p_{1,3}p_{3,2} + p_{2,3}p_{3,1} + p_{3,2}r_{1,1} + p_{3,1}r_{1,2} - r_{3,3}p_{3,2}$	$p_{2,3}p_{3,2} + p_{1,3}p_{3,1} - p_{3,1}r_{1,1} + p_{3,2}r_{1,2} + r_{3,3}p_{3,1}$	0
0	0	$2p_{1,3}r_{3,3} - 2r_{1,1}p_{1,3} - 2r_{1,2}p_{2,3}$

1.3.5

$p_{2,3}p_{3,2} + p_{1,3}p_{3,1} - 1 - p_{3,1}r_{1,1} + p_{3,2}r_{1,2} + r_{3,3}p_{3,1}$	$p_{1,3}p_{3,2} - p_{2,3}p_{3,1} - p_{3,1}r_{1,2} - p_{3,2}r_{1,1} + r_{3,3}p_{3,2}$	0
$-p_{1,3}p_{3,2} + p_{2,3}p_{3,1} + p_{3,2}r_{1,1} + p_{3,1}r_{1,2} - r_{3,3}p_{3,2}$	$p_{2,3}p_{3,2} + p_{1,3}p_{3,1} - 1 - p_{3,1}r_{1,1} + p_{3,2}r_{1,2} + r_{3,3}p_{3,1}$	0
0	0	$2p_{1,3}r_{3,3} - 2r_{1,1}p_{1,3} - 2r_{1,2}p_{2,3}$

1.3.6

$p_{2,3}p_{3,2} + p_{1,3}p_{3,1} + 1 - p_{3,1}r_{1,1} + p_{3,2}r_{1,2} + r_{3,3}p_{3,1}$	$p_{1,3}p_{3,2} - p_{2,3}p_{3,1} - p_{3,1}r_{1,2} - p_{3,2}r_{1,1} + r_{3,3}p_{3,2}$	0
$-p_{1,3}p_{3,2} + p_{2,3}p_{3,1} + p_{3,2}r_{1,1} + p_{3,1}r_{1,2} - r_{3,3}p_{3,2}$	$p_{2,3}p_{3,2} + p_{1,3}p_{3,1} + 1 - p_{3,1}r_{1,1} + p_{3,2}r_{1,2} + r_{3,3}p_{3,1}$	0
0	0	$2p_{1,3}r_{3,3} - 2r_{1,1}p_{1,3} - 2r_{1,2}p_{2,3}$

Теорема 4. Тензоры Риччи симметрических псевдоримановых однородных пространств имеют следующий вид:

3.4.1

0	0	$-2p_{1,2}^2$
0	$2p_{1,2}^2$	0
$-2p_{1,2}^2$	0	0

3.4.2

0	0	$-2p_{1,2}^2 + 2$
0	$2p_{1,2}^2 - 2$	0
$-2p_{1,2}^2 + 2$	0	0

3.4.3

0	0	$-2p_{1,2}^2 - 2$
0	$2p_{1,2}^2 + 2$	0
$-2p_{1,2}^2 - 2$	0	0

2.21.1

0	0	$-2p_{1,2}^2$
0	$2p_{1,2}^2$	0
$-2p_{1,2}^2$	0	0

1.1.1

0	$p_{3,2}q_{2,3} - p_{3,2}r_{2,2} + r_{3,3}p_{3,2}$	0
$p_{1,3}q_{3,1} - q_{3,1}r_{1,1} + r_{3,3}q_{3,1}$	0	0
0	0	$p_{1,3}r_{3,3} - r_{1,1}p_{1,3} + q_{2,3}r_{3,3} - r_{2,2}q_{2,3}$

1.1.5

0	$p_{3,2}q_{2,3} - 1 - p_{3,2}r_{2,2} + r_{3,3}p_{3,2}$	0
$p_{1,3}q_{3,1} - 1 - q_{3,1}r_{1,1} + r_{3,3}q_{3,1}$	0	0
0	0	$p_{1,3}r_{3,3} - r_{1,1}p_{1,3} + q_{2,3}r_{3,3} - r_{2,2}q_{2,3}$

1.1.6

0	$p_{3,2}q_{2,3} + r_{2,2} - p_{3,2}r_{2,2} + r_{3,3}p_{3,2}$	0
$p_{1,3}q_{3,1} - r_{1,1} - q_{3,1}r_{1,1} + r_{3,3}q_{3,1}$	0	0
0	0	$p_{1,3}r_{3,3} - r_{1,1}p_{1,3} + q_{2,3}r_{3,3} - r_{2,2}q_{2,3}$

1.8.1

0	0	$-2p_{1,2}^2$
0	$2p_{1,2}^2$	$3p_{1,3}p_{1,2} - p_{1,2}(q_{1,2} + p_{1,3})$
$-2p_{1,2}^2$	$-2p_{1,3}p_{1,2} + q_{1,2}p_{1,2}$	$p_{1,2}q_{1,3} + 4p_{1,3}q_{1,2} + 2p_{1,3}^2 + q_{1,2}^2 - r_{1,2}p_{1,2}$

1.8.4

0	0	$-2p_{1,2}^2$
0	$2p_{1,2}^2$	$3p_{1,3}p_{1,2} - p_{1,2}(q_{1,2} + p_{1,3})$
$-2p_{1,2}^2$	$-2p_{1,3}p_{1,2} + q_{1,2}p_{1,2}$	$p_{1,2}q_{1,3} + 4p_{1,3}q_{1,2} + 2p_{1,3}^2 + q_{1,2}^2 - r_{1,2}p_{1,2} - 1$

1.8.5

0	0	$-2p_{1,2}^2$
0	$2p_{1,2}^2$	$3p_{1,3}p_{1,2} - p_{1,2}(q_{1,2} + p_{1,3})$
$-2p_{1,2}^2$	$-2p_{1,3}p_{1,2} + q_{1,2}p_{1,2}$	$p_{1,2}q_{1,3} + 4p_{1,3}q_{1,2} + 2p_{1,3}^2 + q_{1,2}^2 - r_{1,2}p_{1,2} + 1$

Заключение. Алгебраический подход, использованный в работе, дает возможность обобщить различные результаты дифференциальной геометрии и упростить их доказательство, а также применить идеи дифференциальной геометрии к другим математическим теориям и, наоборот, использовать различные алгебраические результаты в дифференциальной геометрии. Полученный результат позволяет в дальнейшем провести классификацию всех линейных связностей на трехмерных пространствах, методика также может быть использована для других размерностей.

Литература

1. Chow B., Knopf D. Mathematical Surveys and Monographs. Vol. 110: The Ricci flow: an introduction. Providence: American Mathematical Society, 2004. 325 p.
2. Nomizu K. Invariant affine connections on homogeneous spaces // Amer. Journ. Math. 1954. Vol. 76, no. 1. P. 33–65.
3. Можей Н. П. Аффинные связности на трехмерных псевдоримановых однородных пространствах // Известия высших учебных заведений. Математика. 2013. № 12. С. 51–69.

References

1. Chow B., Knopf D. *Mathematical Surveys and Monographs*. Vol. 110: The Ricci flow: an introduction. Providence, American Mathematical Society Publ., 2004. 325 p.
2. Nomizu K. Invariant affine connections on homogeneous spaces. *Amer. Journ. Math.*, 1954, vol. 76, no. 1, pp. 33–65.
3. Mozhey N. P. Affine connections on three-dimensional pseudo-Riemannian homogeneous spaces. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Matematika* [News of higher educational institutions. Mathematics], 2013, no. 12, pp. 51–68 (In Russian).

Информация об авторе

Можей Наталья Павловна – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры «Программное обеспечение информационных технологий». Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (220013, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, Республика Беларусь). E-mail: mozheynatalya@mail.ru

Information about the author

Mozhey Natalya Pavlovna – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, Software for Information Technologies Department. Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovki str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mozheynatalya@mail.ru

Поступила 26.02.2016

УДК 517.982.45

Т. Г. Шагова

Белорусский государственный технологический университет

**К ВОПРОСУ ОБ АСИМПТОТИЧЕСКИХ РАЗЛОЖЕНИЯХ
РАЦИОНАЛЬНЫХ МНЕМОФУНКЦИЙ**

Рассмотрена задача аппроксимации обобщенных функций новыми обобщенными функциями (мнемофункциями, порожденными рациональными функциями), которые образуют подалгебру в алгебре новых обобщенных функций, и асимптотические разложения которых имеют специальный вид. Построены асимптотические разложения некоторых классов рациональных мнемофункций, в частности, ассоциированных с обобщенными функциями δ и $P(1/x)$, а также исследовано их поведение на бесконечности. Ввиду того, что произведение обобщенных функций не может быть корректно определено в пространстве обобщенных функций, для δ^2 и $(\frac{1}{x})^2$ построены асимптотические разложения, главным членом которых является δ -функция с бесконечно большим коэффициентом. В работе показано, что равенство, представленное в монографии [1], имеет место только для аппроксимаций определенного вида.

Ключевые слова: аппроксимация, мнемофункция, рациональная мнемофункция, асимптотическое разложение.

T. G. Shagova

Belarusian State Technological University

ON THE ASYMPTOTIC EXPANSIONS OF RATIONAL MNEMOFUNCTIONS

The problem of generalized functions approximation by new generalized functions (mnemofunctions generated by rational functions) is considered in the article. They form a subalgebra in the algebra of new generalized functions and their asymptotic expansions have a special type. The approximations of distributions δ and $P(1/x)$ by mnemofunctions generated by rational functions are considered. Asymptotic expansions were built for such mnemofunctions and their behavior was investigated. Asymptotic expansions for δ^2 and $(\frac{1}{x})^2$ which are not defined as generalized functions, were obtained.

The major term of these expansions is δ -function with infinitely large coefficient. It was shown that the equality given in the monograph [1] holds only for approximations of special type.

Key words: approximation, mnemofunction, rational mnemofunction, asymptotic expansion.

Введение. В связи с невозможностью введения ассоциативного всюду определенного произведения обобщенных функций стала развиваться теория новых обобщенных функций. В рамках данной теории рассматриваются новые объекты, которые обладают основными свойствами обобщенных функций, но в то же время допускают корректно определенную операцию умножения, т. е. образуют алгебру. Практически все эти конструкции основаны на некоторой аппроксимации обобщенных функций семейством гладких функций $f_\epsilon(x)$, зависящих от малого параметра ϵ . Поскольку по своему построению новые обобщенные функции сохраняют информацию о способе их получения из гладких, то для таких объектов начали использовать название мнемофункции (от слова «мнемо» – память) [2].

Связь мнемофункций с классическими обобщенными функциями устанавливается с помощью понятия ассоциированности. Будем гово-

рить, что обобщенная функция $u \in D'(\mathbf{R})$ ассоциирована с мнемофункцией $f_\epsilon(x)$ и что f есть регуляризация функции u , если

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int f_\epsilon(x) \varphi(x) dx = \langle u, \varphi \rangle$$

для любой функции $\varphi \in D(\mathbf{R})$. Будем обозначать $(f_\epsilon) \sim u$.

С позиции ассоциированности понятие произведения обобщенных функций возникает достаточно естественно. Произведением функций $u, v \in D'(\mathbf{R})$, ассоциированных с мнемофункциями (f_ϵ) и (g_ϵ) соответственно, будем считать обобщенную функцию w , ассоциированную с произведением мнемофункций $(f_\epsilon g_\epsilon)$. Однако для семейства $(f_\epsilon g_\epsilon)$ может не существовать ассоциированной обобщенной функции, что частично преодолевается за счет того, что для мнемофункций часто существуют асимптотические разложения в пространстве $D'(\mathbf{R})$ вида

$$(f_\varepsilon) \approx \sum_{k=-m}^{+\infty} \varepsilon^k u_k, \quad u_k \in D'(\mathbf{R}).$$

С точки зрения асимптотических разложений произведением обычных обобщенных функций можно считать асимптотическое разложение произведения ассоциированных мнемофункций.

Особый интерес вызывают мнемофункции, порожденные рациональными функциями, т. е.

мнемофункции вида $f_\varepsilon(x) = \frac{P(x/\varepsilon)}{Q(x/\varepsilon)}$, которые

будем в дальнейшем называть рациональными. Такие мнемофункции образуют подалгебру в алгебре обобщенных функций, и их асимптотические разложения имеют специальный вид. Поэтому в данной работе рассматриваются рациональные мнемофункции и их асимптотические разложения.

Основная часть. Академиками А. Н. Тихоновым и А. А. Самарским была получена общая формула нахождения асимптотических разложений интегралов, зависящих от параметра, основанная на методе последовательных разложений [3]. С точки зрения теории мнемофункций эта формула дает асимптотическое разложение мнемофункций вида $f_\varepsilon(x) = f(x/\varepsilon)$, так называемых самоподобных мнемофункций. С помощью этой формулы были построены асимптотические разложения ряда рациональных мнемофункций. Рассмотрим некоторые из них.

Пусть $f(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$. Тогда семейство функций $f_\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2}$ задает аппроксимацию δ -функции. И асимптотическое разложение имеет вид

$$\frac{\varepsilon}{\pi(\varepsilon^2 + x^2)} \sim \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \varepsilon^{2k} \left(\frac{\varepsilon}{\pi} P\left(\frac{1}{x^{2k+2}}\right) + \frac{\delta^{(2k)}}{(2k)!} \right).$$

Существует много других аппроксимаций δ -функции. Асимптотические разложения таких семейств имеют главный член, равный δ , и отличаются младшими членами. Например, функция $f_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi(1+x^4)}$. Ее асимптотическое разложение:

$$\frac{\varepsilon^3 \sqrt{2}}{\pi(\varepsilon^4 + x^4)} \sim \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \varepsilon^{4k} \left(\frac{\delta^{(4k)}}{(4k)!} + \frac{\varepsilon^2 \delta^{(4k+2)}}{(4k+2)!} + \varepsilon^3 P\left(\frac{1}{x^{4k+4}}\right) \right).$$

Функцию $1/x$ аппроксимирует семейство функций, порожденное $g(x) = \frac{x}{1+x^2}$. Тогда ее асимптотический ряд:

$$\frac{\varepsilon x}{\varepsilon^2 + x^2} \sim \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \varepsilon^{2k} \left(P\left(\frac{1}{x^{2k+1}}\right) + \varepsilon \pi \delta^{(2k+1)} \right).$$

Следует отметить, что асимптотические разложения рациональных мнемофункций имеют специальный вид: коэффициентами таких разложений могут быть только δ -функция и ее производные или степенные функции.

В монографии П. Антосика, Я. Микусинского и Р. Сикорского «Теория обобщенных функций: секвенциальный подход» [1] для квадратов функций δ и $P(1/x)$ приведено следующее равенство:

$$\delta^2 - \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{1}{x^2} \right)^2 = -\frac{1}{\pi^2} \frac{1}{x^2}.$$

Поскольку выражения δ^2 и $\left(\frac{1}{x}\right)^2$ как

обобщенные функции не определены, левая часть формулы, очевидно, не имеет смысла. В то время, когда правая часть равенства определена в пространстве обобщенных функций. Формальное доказательство этого выражения дано в [1]. Рассмотрим это равенство с позиции мнемофункций. В качестве аппроксимаций δ и $P(1/x)$ возьмем рациональные функции $f(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$ и $g(x) = \frac{x}{1+x^2}$ соответственно. Асимптотические разложения мнемофункций, порожденных данными, были приведены ранее. Найдем асимптотические разложения, соответствующие квадратам мнемофункций. Для наглядности выпишем только несколько первых членов разложений:

$$\begin{aligned} (f_\varepsilon)^2 &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \right) \sim \frac{\delta}{\varepsilon \cdot 2\pi} + \frac{\varepsilon}{2\pi} \frac{\delta^{(2)}}{2!} + \\ &+ \frac{\varepsilon^2}{\pi^2} P\left(\frac{1}{x^4}\right) - \frac{3\varepsilon^3}{2\pi} \frac{\delta^{(4)}}{4!} + \dots; \\ (g_\varepsilon)^2 &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{1}{\varepsilon} g\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \right) \sim \frac{\pi\delta}{2\varepsilon} + P\left(\frac{1}{x^2}\right) - \\ &- \frac{3\pi\varepsilon}{2} \frac{\delta^{(2)}}{2!} - 2\varepsilon^2 P\left(\frac{1}{x^4}\right) + \dots \end{aligned}$$

Подставив эти разложения в равенство, видим, что главный член разности будет следующим:

$$(f_\varepsilon)^2 - \frac{1}{\pi^2}(g_\varepsilon)^2 \approx -\frac{1}{\pi^2}P\left(\frac{1}{x^2}\right).$$

Что и требовалось показать.

Однако если в качестве аппроксимации δ -функции взять функцию $f_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi(1+x^4)}$, то первые члены асимптотического разложения, соответствующего квадрату мнемофункции:

$$\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{1}{\varepsilon}f_1^2\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)\right) \sim \frac{3}{2\sqrt{2}\pi\varepsilon}\delta + \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}\pi}\frac{\delta^{(2)}}{2!} + \frac{\varepsilon^3}{2\sqrt{2}\pi}\frac{\delta^{(4)}}{4!} + \dots$$

И если $P(1/x)$ будем аппроксимировать функцией $g(x)$, то

$$(f_\varepsilon)^2 - \frac{1}{\pi^2}(g_\varepsilon)^2 \approx \frac{3\sqrt{2}-2}{2}\frac{\delta}{2\pi\varepsilon} - \frac{1}{\pi^2}P\left(\frac{1}{x^2}\right) + \dots,$$

т. е. δ -функция с бесконечно большим коэффициентом. Отсюда следует, что с точки зрения теории мнемофункции выполнимость данного равенства зависит от способа аппроксимации. Для того, чтобы это равенство выполнялось, следует аппроксимировать δ и $P(1/x)$ рациональными функциями, удовлетворяющими равенству: $\int f^2(x)dx = \frac{1}{\pi^2}\int g^2(x)dx$.

Заключение. В ходе работы были получены асимптотические разложения некоторых рациональных мнемофункций. Коэффициентами таких разложений могут быть только функция δ и ее производные, а также степенные функции. Рассмотрены некоторые аппроксимации обобщенных функций δ и $P(1/x)$ и построены их асимптотические разложения, а также построены разложения мнемофункций, соответствующих квадратам функций δ и $P(1/x)$. Главным членом таких разложений является δ -функция с бесконечно большим коэффициентом.

Литература

1. Антосик П., Микусинский Я., Сикорский Р. Теория обобщенных функций: секвенциальный подход. М.: Мир, 1976. 312 с.
2. Антоневиц А. Б., Пыжкова О. Н., Третьякова Л. Г. Асимптотические разложения для произведений базовых обобщенных функций // Труды Института математики НАН Беларуси. 2000. Т. 5. С. 18–31.
3. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Асимптотическое разложение интегралов с медленно убывающим ядром // Доклады Академии наук СССР. 1959. Т. 126, № 1. С. 26–29.

References

1. Antosik P., Mikusinskiy Ya., Sikorskiy R. *Teoriya obobshchennykh funktsiy: sekventsial'nyy podkhod* [The theory of generalized functions: sequential approach]. Moscow, Mir Publ., 1976. 312 p.
2. Antonevich A. B., Pyzhkova O. N., Tret'yakova L. G. Asymptotic expansions for products of basic distributions. *Trudy Instituta matematiki NAN Belarusi* [Proceedings of mathematical institution of NASB], 2000, vol. 5, pp. 18–31 (In Russian).
3. Tikhonov A. N., Samarskiy A. A. Asymptotic expansions of integrals with slowly decreasing kernel. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Reports of the USSR Academy of Sciences], 1959, vol. 126, no. 1, pp. 26–29 (In Russian).

Информация об авторе

Шагова Татьяна Григорьевна – магистр физико-математических наук, ассистент кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: tanya.shagova@gmail.com

Information about the author

Shagova Tat'yana Grigor'evna – Master of Physical and Mathematical Sciences, assistant lecturer, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tanya.shagova@gmail.com

Поступила 11.03.2016

УДК 517.968

Л. Д. Яроцкая

Белорусский государственный технологический университет

**ОБ УРАВНЕНИИ С ДВУМЯ ЯДРАМИ ТИПА
СВЕРТКИ КОНТОРОВИЧА – ЛЕБЕДЕВА**

Настоящая работа посвящена изучению интегрального уравнения второго рода с двумя ядрами. В качестве одного из них взята классическая свертка для преобразования Конторовича – Лебедева, а в качестве второго – обобщенная свертка, построенная с помощью композиционного равенства для преобразования Конторовича – Лебедева. Предполагается, что свертываемые и искомые функции принадлежат некоторым весовым пространствам Лебега измеримых функций. Путем применения преобразования Конторовича – Лебедева рассматриваемое уравнение сведено к линейному алгебраическому уравнению относительно преобразования Конторовича – Лебедева и некоторого интегрального преобразования по индексу с ядром, связанным с функцией Макдональда. Далее с помощью аппарата интегралов типа Коши полученное уравнение сводится к краевой задаче Римана для полуплоскости в классе функций, исчезающих на бесконечности, и применяются для нее соответствующие известные результаты. Получены условия аналитического продолжения интеграла Конторовича – Лебедева в некоторую полосу, установлена связь между интегралом типа Коши по действительной оси и интегралом Конторовича – Лебедева, записаны аналоги формул Сохоцкого. При этом рассмотрены условия равносильности полученных задач, даны достаточные условия разрешимости и алгоритм для нахождения решения.

Ключевые слова: интегральное уравнение, преобразования по индексу, преобразование Конторовича – Лебедева, композиционная свертка.

L. D. Yarotskaya

Belarusian State Technological University

**ON THE EQUATION WITH TWO CONVOLUTIONS
OF THE KONTOROVICH – LEBEDEV TYPE IN THE KERNELS**

The integral equation of the second kind with two kernels is investigated. One of them is the Kontorovich – Lebedev convolution and the second one is the generalized convolution construction connected with the index transforms of the Kontorovich – Lebedev type. It's supposed that kernels and unknown functions belonging to some weighted Lebesgue spaces of measurable functions. Applying the Kontorovich – Lebedev transform this equation is reduced to a linear algebraic equation associated with the Kontorovich – Lebedev transform and some integral transform with respect to a parameter of the Macdonald type function. Then by means of the Cauchy type integral the last equation can be reduced to the Riemann boundary value problem for the half-plane in the class of functions vanishing at infinity. The solutions are obtained applying the well known results for the Riemann boundary value problem. We obtain the conditions of the analytic continuation of the Kontorovich – Lebedev integral in some strip. We establish the connections between the Cauchy type integral along the real axis and the Kontorovich – Lebedev integral and the analogues Sokhotskii formulas. As a result, sufficient conditions for solvability and the algorithm for receiving the solutions are given.

Key words: integral equation, index transform, Kontorovich – Lebedev transform, general convolution.

Введение. В работе автора [1] впервые были исследованы интегральные уравнения с неподвижной особенностью, разрешимые в замкнутой форме посредством преобразования Конторовича – Лебедева. В дальнейшем оказалось, что ядра рассматриваемых уравнений первого и второго рода являются свертками двух функций. Установлено [2], что преобразование Конторовича – Лебедева порождает целый класс преобразований по индексу. В монографии [3] разработан метод построения композиционных сверток для таких преобразований. В частности, дано понятие

обобщенной свертки $(f * g)$ двух функций f и g как операции умножения в некоторой алгебре, когда с помощью действия соответствующего интегрального оператора K на свертку приходим к обычному умножению образов. Если при некоторых условиях имеет смысл обратный оператор от произведения функций, то в некотором пространстве функций свертку можно определить равенством Парсеваля:

$$(f * g)(x) = K^{-1}([K_1 f][K_2 g])(x),$$

где K_1, K_2 – некоторые интегральные операторы.

Это позволило полученные конструкции применить для исследования некоторых классов интегральных уравнений с композиционной сверткой [2].

Основная часть.

1. Предварительные сведения. Рассмотрим преобразование Конторовича – Лебедева следующего вида:

$$K_{\tau}[f] = \int_0^{\infty} K_{\tau}(x) f(x) dx, \quad \tau \geq 0. \quad (1)$$

Здесь $K_{\tau}(x)$ – функция Макдональда мнимого параметра, для которой справедливо следующее интегральное представление [3]:

$$K_{\tau}(x) = \int_0^{\infty} e^{-x \operatorname{ch} u} \cos(\tau u) du. \quad (2)$$

Обозначим через $L_{\nu,p}(\mathbf{R}_+)$ пространство измеримых на положительной полуоси функций со степенным весом, норма которого определяется формулой

$$\|f\|_{\nu,p} = \left(\int_0^{\infty} |x^{\nu} f(x)|^p \frac{dx}{x} \right)^{1/p} < \infty, \quad (3)$$

где $\nu \in \mathbf{R}$, $p \geq 1$. Заметим, что в случае $\nu p = 1$ пространство $L_{\nu,p}(\mathbf{R}_+)$ совпадает с пространством $L_p(\mathbf{R}_+)$.

В монографии [3] показано, что оператор Конторовича – Лебедева (1) ограничено действует из пространств функций $L_{\nu,2}(\mathbf{R}_+)$ с параметром $0 < \nu < 1$ в пространство $L_2(\mathbf{R}_+)$.

Через

$$KL(L_{\nu,p}) = \{g : g(\tau) = K_{\tau}[f]\} \quad (4)$$

обозначим область значения преобразования Конторовича – Лебедева (1) функций f пространства $L_{\nu,p}(\mathbf{R}_+)$, где $\nu < 1$, $p \geq 1$. Показано [3], для того чтобы $g(\tau) \in KL(L_{\nu,p})$, $0 < \nu < 1$, $p \geq 1$, необходимо и достаточно, чтобы

$$\begin{aligned} g(\tau) &\in L_r(\mathbf{R}_+), \quad r \geq 1, \\ \text{l.i.m.}_{\varepsilon \rightarrow 0+} (I_{\varepsilon} g) &\in L_{\nu,p}(\mathbf{R}_+). \end{aligned} \quad (5)$$

Кроме того, справедлива следующая формула обращения преобразования (1):

$$f(x) = \text{l.i.m.}_{\varepsilon \rightarrow 0+} (I_{\varepsilon} g)(x), \quad x > 0, \quad (6)$$

$$(I_{\varepsilon} g)(x) = \frac{2}{\pi^2 x^{1-\varepsilon}} \times$$

$$\times \int_0^{\infty} \tau \operatorname{sh}((\pi - \varepsilon)\tau) K_{\tau}(x) g(\tau) d\tau, \quad \varepsilon \in (0, \pi), \quad (7)$$

причем предел в (5), (6) понимается по норме (3) пространства $L_{\nu,p}(\mathbf{R}_+)$.

Двойной интеграл

$$(f * g)(t) = \frac{1}{2t} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-\frac{ty}{2u} - \frac{yu}{2t} - \frac{ut}{2y}} f(u) g(y) du dy \quad (8)$$

называется сверткой двух функций f и g для преобразования Конторовича – Лебедева (1).

Лемма 1 [3]. Свертка (8) функций $f(x)$ и $g(x) \in L_2(\mathbf{R}_+)$ существует и принадлежит пространству $L_{\nu,2}(\mathbf{R}_+)$ с параметром $\nu > 1/2$. Кроме того, если $1/2 < \nu < 1$, то для любого $x > 0$ справедливо факторизационное равенство

$$[K_{\tau}(f * g)](x) = [K_{\tau}f](x) [K_{\tau}g](x). \quad (9)$$

Подчеркнем, что свертку (8) можно определить как обратное преобразование Конторовича – Лебедева (7) функции $K_{\tau}[f] K_{\tau}[g]$.

В работе [4] построена свертка $(f \hat{*} g)$ двух функций f и g , определенная обратным преобразованием Конторовича – Лебедева функции $\hat{F}(\tau) K_{\tau}[g]$:

$$\begin{aligned} (f \hat{*} g)(x) &= \frac{2}{\pi^2 x} \times \\ &\times \int_0^{\infty} \tau \operatorname{sh}(\pi\tau) K_{\tau}(x) \hat{F}(\tau) K_{\tau}[g] d\tau. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь

$$\hat{F}(\tau) = \int_0^{\infty} M_{\tau}(u) f(u) du - \quad (11)$$

интегральное преобразование, где специальная функция ядра определяется интегралом

$$M_{\tau}(u) = \int_0^{\infty} e^{-u \operatorname{ch} t} \sin(\tau t) dt. \quad (12)$$

Заметим, что интеграл (12) напоминает интегральное представление (2) для функции Макдональда $K_{\tau}(x)$.

В работе [4] доказаны следующие свойства преобразования (11) и свертки (10). В частности, если $f(x) \in L_2(\mathbf{R}_+)$, то интеграл в (11) существует и $\hat{F}(x) \in L_2(\mathbf{R}_+)$.

Лемма 2. Пусть $f(x), g(x) \in L_2(\mathbf{R}_+)$, $G(x) \in L_1(xe^{(\pi-\delta)x}, \mathbf{R}_+)$, где $G(x)$ – преобразование (1) функции $g(y)$ и $0 \leq \delta < \pi/2$. Тогда свертка (10) функций $f(x)$ и $g(x)$ существует и принадлежит пространству $L_{\nu,2}(\mathbf{R}_+)$, где $\nu > 1$.

Для функций $f(x) \in L_{\nu,2}(\mathbf{R}_+)$ с параметром $1 \leq \nu < 1 + \varepsilon_0$, $\varepsilon_0 > 0$, определим преобразование Конторовича – Лебедева следующим образом:

$$\begin{aligned} K_{\tau}[f] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \int_0^{\infty} K_{\tau}(x) f(x) x^{\varepsilon} dx, \\ &0 < \varepsilon \leq \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (13)$$

Лемма 3. Пусть $f(x), g(x) \in L_2(\mathbf{R}_+)$. Тогда преобразование (13) свертки (10) существует и справедливо факторизационное равенство

$$K_{i\tau}[(f \hat{*} g)] = \hat{F}(\tau)K_{i\tau}[g]. \quad (14)$$

2. Аналитическое продолжение интеграла Конторовича – Лебедева. Рассмотрим функцию комплексного переменного z

$$K_{iz}[f] = \int_0^\infty K_{iz}(x)f(x)dx. \quad (15)$$

Теорема 1. Пусть $f(x) \in L_{v,2}(\mathbf{R}_+)$, $0 < v < 1$. Тогда $K_{iz}[f]$ – аналитическая функция в полосе $|\operatorname{Im} z| < 1 - v$.

Доказательство. Используем формулу [3]

$$K_{iz}(x) = \frac{1}{2} \int_{i\delta - \infty}^{i\delta + \infty} e^{-x \operatorname{ch} \beta + iz\beta} d\beta, \quad \delta \in [0, \pi/2). \quad (16)$$

Сделав замену переменной $\beta = u + i\delta$, оценим:

$$\left| \frac{\partial}{\partial z} K_{iz}(x) \right| = C \frac{e^{-\delta|\operatorname{Re} z|}}{2} < \infty. \quad (17)$$

Применяя неравенство Гёльдера, оценку (17) и обобщенное неравенство Минковского, имеем:

$$\left| \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial z} K_{iz}(x)f(x)dx \right| \leq C e^{-\delta|\operatorname{Re} z|} \|f\|_{v,2} \times \int_{-\infty}^\infty e^{-u|\operatorname{Im} z|} \operatorname{ch}^{v-1} u \sqrt{u^2 + \delta^2} du.$$

Интеграл в последнем равенстве сходится, если $|\operatorname{Im} z| < 1 - v$. Следовательно, функция $K_{iz}[f]$ является непрерывно дифференцируемой и аналитической в этой полосе. Теорема доказана.

3. Связь интеграла Конторовича – Лебедева (1) с интегралом типа Коши [5]. В силу четности функции Макдональда возьмем $\tau \in \mathbf{R}$.

Пусть $f(x) \in L_2(\mathbf{R}_+)$. Тогда

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{F(\tau)}{\tau - z} d\tau = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{d\tau}{\tau - z} \int_0^\infty K_{i\tau}(t)f(t)dt.$$

Воспользовавшись представлением (16) при $\delta = 0$, в силу абсолютной сходимости поменяв порядок интегрирования в полученном повторном интеграле, можем представить интеграл типа Коши в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{F(\tau)}{\tau - z} d\tau = \\ & = \frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) dt \int_{-\infty}^0 e^{-t \operatorname{ch} u} du \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{i\tau u}}{\tau - z} d\tau + \\ & + \frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) dt \int_0^\infty e^{-t \operatorname{ch} u} du \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{i\tau u}}{\tau - z} d\tau. \end{aligned}$$

В зависимости от того, в какой полуплоскости лежит z , возможны два случая:

1) пусть $\operatorname{Im} z > 0$, тогда

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{F(\tau)}{\tau - z} d\tau = \frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) \int_0^\infty e^{-t \operatorname{ch} u + iuz} du dt;$$

2) пусть $\operatorname{Im} z < 0$, тогда

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{F(\tau)}{\tau - z} d\tau = -\frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) \int_{-\infty}^0 e^{-t \operatorname{ch} u + iuz} du dt.$$

Поскольку интеграл типа Коши представляет собой аналитическую функцию в плоскости с разрезом по действительной оси, то функции, определенные по формулам

$$F^+(z) = \frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) \int_0^\infty e^{-t \operatorname{ch} u + iuz} du dt, \quad (18)$$

$$F^-(z) = -\frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) \int_{-\infty}^0 e^{-t \operatorname{ch} u + iuz} du dt, \quad (19)$$

будут аналитическими соответственно в верхней и нижней полуплоскостях.

Кроме того, справедливы формулы Сохоцкого:

$$F^+(x) - F^-(x) = F(x), \quad (20)$$

$$F^+(x) + F^-(x) = i\hat{F}(x). \quad (21)$$

Введем следующие два класса функций:

$$(KL)^\pm = \left\{ F^\pm(x) = \pm \frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) \int_{0(-\infty)}^{0(\infty)} e^{-t \operatorname{ch} u + iux} du dt \right\},$$

где $f(t)$ из класса функций (4).

Теорема 2. Для того чтобы заданная на действительной оси функция $F(x)$ из (KL) принадлежала классу $(KL)^+ ((KL)^-)$, необходимо и достаточно, чтобы выполнялось следующее условие:

$$\int_0^\infty f(t) \int_{-\infty(0)}^{0(\infty)} e^{-t \operatorname{ch} u + iux} du dt = 0, \quad \forall x \in \mathbf{R}. \quad (22)$$

Доказательство. Необходимость. Пусть $F(x) \in (KL)^+$. Тогда

$$\begin{aligned} F(x) = F^+(x) &= \frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) \int_0^\infty e^{-t \operatorname{ch} u + iux} du dt = \\ &= \frac{1}{2} F(x) + \frac{i}{2} \hat{F}(x). \end{aligned}$$

Отсюда имеем: $F(x) = i\hat{F}(x)$, и из второй формулы Сохоцкого (21) следует, что $F^-(x) = 0$, т. е. выполняется условие (22).

Достаточность. Если выполняется условие (22), тогда из первой формулы Сохоцкого (20) следует, что функция $F^+(x) = F(x)$ принадлежит классу $(KL)^+$. Теорема доказана.

4. Постановка задачи. Пусть $t > 0$. Рассмотрим интегральное уравнение вида

$$f(t) + (f * m_1)(t) + (f \hat{*} m_2)(t) = g(t) \quad (23)$$

в классе функций

$$L_2(\mathbf{R}_+) \cap L_{v,2}(\mathbf{R}_+) \cap L_{\mu,2}(\mathbf{R}_+), \quad (24)$$

где $1/2 < v < 1$, $1 \leq \mu < 1 + \varepsilon_0$, $\varepsilon_0 > 0$, а свертки $(f * m_1)$ и $(f \hat{*} m_2)$ определяются по формулам (8) и (10) соответственно.

Пусть $M_k(x) = K_{i\tau}[m_k]$ – преобразование (1) функций $m_k(t)$, $k = 1, 2$. Предположим, что $M_2(x) \in L_1(xe^{(\pi-\delta)x}; \mathbf{R}_+)$, $0 \leq \delta < \pi/2$, и

$$1 + M_1(x) \pm iM_2(x) \neq 0. \quad (25)$$

5. Решение задачи. Используя свойства свертки (8), (10), леммы 1, 2, 3, формулы (9), (14), применим преобразование Конторовича – Лебедева (1), (13) к уравнению (23) и сведем его при $-\infty < x < \infty$ к виду

$$F(x) + M_1(x)F(x) + M_2(x)\hat{F}(x) = G(x) \quad (26)$$

в классе функций

$$KL(L_2(\mathbf{R}_+) \cap L_{v,2}(\mathbf{R}_+) \cap L_{\mu,2}(\mathbf{R}_+)), \quad (27)$$

где $1/2 < v < 1$, $1 \leq \mu < 1 + \varepsilon_0$, $\varepsilon_0 > 0$.

Уравнения (23) и (26) равносильны, так как оператор Конторовича – Лебедева, действующий из пространства (24) в пространство (27), можно рассматривать как сужение прежнего оператора $K_{i\tau}[f]: L_{v,2}(\mathbf{R}_+) \rightarrow KL(L_{v,2}(\mathbf{R}_+))$, $0 < v < 1$, и обратный оператор может быть определен по формуле (6) со сходимостью по норме пространства $L_2(\mathbf{R}_+)$.

Введем кусочно аналитическую функцию, заданную интегралом типа Коши, плотностью которого служит решение уравнения (26):

$$F(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(\tau)}{\tau - z} d\tau. \quad (28)$$

Согласно формулам (18), (19), теореме 2, предельные значения функции $F(z)$ принадлежат классам $(KL)^+$ и $(KL)^-$. Внося значения $F(x)$ и $\hat{F}(x)$ из (20), (21) в уравнение (26) и решая его относительно $F^+(x)$, получим, что кусочно аналитическая функция $F(z)$ должна являться решением краевой задачи Римана:

$$F^+(x) = D(x)F^-(x) + H(x), \quad (29)$$

$$-\infty < x < \infty,$$

$$D(x) = \frac{1 + M_1(x) + iM_2(x)}{1 + M_1(x) - iM_2(x)}, \quad (30)$$

$$H(x) = \frac{G(x)}{1 + M_1(x) - iM_2(x)}.$$

Уравнение (26) и задача (29) равносильны в следующем смысле: если $F(z)$, представимая в виде (18), (19), есть общее решение краевой задачи (29), то функция $F(x)$ из (20) есть решение уравнения (26); наоборот, если $F(x)$ – общее решение уравнения (26), то интеграл типа Коши (28) есть решение задачи Римана (29), представимое в виде (18), (19).

Краевая задача Римана подробно изучена в [4]. Пусть κ – индекс задачи (29). Учитывая, что выполнено условие нормальности (25), выпишем все необходимые формулы:

$$F(z) = X(z) \left[\Psi(z) + \frac{P_{\kappa-1}(z)}{(z+i)^\kappa} \right], \quad (31)$$

где $P_{\kappa-1}(z)$ – многочлен степени $\kappa-1$,

$$X^+(z) = e^{\Gamma^+(z)}, \quad X^-(z) = \left(\frac{z-i}{z+i} \right)^{-\kappa} e^{\Gamma^-(z)}, \quad (32)$$

$$\Gamma^\pm(z) = \pm \frac{1}{2} \int_0^\infty \gamma(t) \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} e^{iuz-tchu} du dt, \quad (33)$$

$$\gamma(x) = \frac{2}{\pi^2 x} \times$$

$$\times \int_0^\infty \tau \operatorname{sh}(\pi\tau) K_{i\tau}(x) \ln \left[\left(\frac{\tau-i}{\tau+i} \right)^{-\kappa} D(\tau) \right] d\tau, \quad (34)$$

$$\Psi^\pm(z) = \pm \frac{1}{2} \int_0^\infty \psi(t) \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} e^{iuz-tchu} du dt, \quad (35)$$

$$\psi(x) = \frac{2}{\pi^2 x} \int_0^\infty \tau \operatorname{sh} \pi\tau K_{i\tau}(x) \frac{H(\tau)}{X^+(\tau)} d\tau. \quad (36)$$

В работе [3] показано, что функция, представимая интегралом Конторовича – Лебедева (1), исчезает на бесконечности и является бесконечно дифференцируемой функцией и, следовательно, удовлетворяет условию Гёльдера [5] с любым показателем $\lambda \leq 1$. Используя результаты задачи Римана для полуплоскости в классе исчезающих на бесконечности функций [5], сформулируем следующий результат исследования.

Теорема 3. Если индекс задачи

$$\kappa = \operatorname{Ind} \frac{1 + M_1(x) + iM_2(x)}{1 + M_1(x) - iM_2(x)}$$

положителен, то однородное уравнение (23) ($g = 0$) имеет ровно k линейно независимых решений, а неоднородное уравнение безусловно разрешимо и его решение зависит от k произвольных комплексных постоянных.

В случае $k \leq 0$ однородное уравнение не имеет отличных от нуля решений. Неоднородное уравнение при $k = 0$ безусловно разрешимо, причем решение единственно. Если индекс задачи отрицателен, то условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{H(t)}{X^+(t)(t+i)^m} dt = 0, \\ m = 1, \dots, |k|,$$

являются необходимыми и достаточными для разрешимости неоднородного уравнения.

Во всех случаях, когда решение уравнения (23) существует, его можно найти по формулам (6), (7), если $g(\tau) = F^+(\tau) - F^-(\tau)$, где $F^+(x)$, $F^-(x)$ – предельные значения построенного по формулам (31)–(36) решения задачи (29).

Заключение. Построено решение для интегрального уравнения второго рода с двумя ядрами типа свертки Конторовича – Лебедева с достаточными условиями разрешимости. Установлена связь между интегралом типа Коши и интегралом Конторовича – Лебедева. Получены аналоги формул Сохоцкого.

Литература

1. Лебедев Н. Н. Сингулярные интегральные уравнения, связанные с интегральными представлениями математической физики // Доклады АН СССР. 1949. Т. 65, № 1. С. 621–624.
2. Yakubovich S. B., Luchko Yu. F. The hypergeometric approach to integral transforms and convolutions. Ser. Mathematics and its Applications. Vol. 287. Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1994. 336 p.
3. Yakubovich S. B. Index transforms. Singapore: World Scientific Publ., 1996. 252 p.
4. Яроцкая Л. Д. Об одной интегральной свертке, связанной с преобразованием Конторовича – Лебедева // Труды БГТУ. 2012. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 31–33.
5. Гахов Ф. Д. Краевые задачи. М.: Наука, 1977. 640 с.

References

1. Lebedev N. N. Some singular integral equations connected with the integral representations of mathematical physics. *Doklady AN SSSR* [Proceedings of the USSR Academy of Sciences], 1949, vol. 65, no. 1, pp. 621–624 (In Russian).
2. Yakubovich S. B., Luchko Yu. F. The hypergeometric approach to integral transforms and convolutions. Ser. Mathematics and its Applications. Vol. 287. Dordrecht, Kluwer Acad. Publ., 1994. 336 p.
3. Yakubovich S. B. Index transforms. Singapore, World Scientific Publ., 1996. 252 p.
4. Yarotskaya L. D. On one integral convolution related to the Kontorovich – Lebedev transform. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2012, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 31–33 (In Russian).
5. Gakhov F. D. *Kraevyye zadachi* [Boundary value problems]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 640 p.

Информация об авторе

Яроцкая Людмила Дмитриевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: yarockaya@belstu.by

Information about the authors

Yarotskaya Lyudmila Dmitrievna – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: yarockaya@belstu.by

Поступила 10.03.2016

УДК 531.19

П. Аргиракис¹, П. Гиазитзидис¹, Я. Г. Грода²

¹Университет имени Аристотеля (г. Салоники, Греция)

²Белорусский государственный технологический университет

КИНЕТИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА ПЛОСКОЙ КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ С БЛОКИРОВАННЫМИ УЗЛАМИ

Рассмотрен процесс диффузии решеточного флюида на плоской квадратной решетке, содержащей некоторое число заблокированных узлов. Предложен алгоритм и выполнено компьютерное моделирование процесса миграции частиц по методу Монте-Карло.

Исследована зависимость кинетического коэффициента диффузии от концентрации заблокированных узлов и концентрации примесных частиц. Определена средняя энергия активации кинетической диффузии и рассмотрена ее зависимость от концентрации примесных частиц. Установлено, что при $k_B T > |J|$ кинетический коэффициент диффузии может быть оценен с достаточной степенью точности с помощью соотношения Жданова, на основе информации о равновесных значениях термодинамических параметров системы.

Ключевые слова: решеточный флюид, кинетический коэффициент диффузии, энергия активации, моделирование по методу Монте-Карло, алгоритм Метрополиса.

P. Argyrakis¹, P. Giazitzidis¹, Ya. G. Groda²

¹Aristotle University of Thessaloniki (Greece)

²Belarusian State Technological University

JUMP DIFFUSION COEFFICIENT OF LATTICE FLUIDS ON A PLANE SQUARE LATTICE WITH BLOCKED SITES

The process of diffusion of lattice fluid on the simple square lattice with blocked sites is considered. The algorithm of Monte Carlo simulation of migration process of particles on the lattice is proposed. The computer simulation of diffusion process is realized.

The dependences of the jump diffusion coefficient versus concentration of blocked sites and concentration of particles are investigated. The average activation energy of the jump diffusion is determined. The dependence of activation energy versus concentration of particles is studied. It has been established that at $k_B T > |J|$ the jump diffusion coefficient can be estimated with help of Zhdanov's expression on the basis of information about equilibrium characteristics of the lattice system.

Key words: lattice fluid, jump diffusion coefficient, activation energy, Monte Carlo simulation, Metropolis algorithm.

Введение. Ранее в работе [1] рассматривалась модель решеточного флюида на решетке, содержащей заблокированные узлы. В рамках данной модели каждый узел некоторой решетки, например плоской квадратной, может находиться в одном из трех возможных состояний: быть занятым примесной частицей, быть вакантным либо заблокированным. Занятие узла более чем одной частицей считается невозможным. При этом примесные частицы, занимающие ближайшие решеточные узлы, могут взаимодействовать друг с другом.

С практической точки зрения построенная модель пригодна для описания свойств ансамб-

ля примесных частиц, адсорбированных на некоторой кристаллической поверхности [2, 3].

Рассмотрение наряду с исходной системой подобной ей базисной системы, которая определяется одночастичными средними потенциалами, позволило построить квазихимическое приближение для определения равновесных характеристик модели. В рамках данного приближения для таких величин, как свободная энергия F , химический потенциал μ , термодинамический фактор χ_T и вероятность двум ближайшим узлам решетки быть занятыми частицами $F(1; 1)$, были получены замкнутые аналитические выражения:

$$\beta F = \theta \ln \theta + (1 - \theta - c) \ln(1 - \theta - c) + c \ln c - \frac{z}{2} \ln Y + \frac{z}{2} (1 - 2c) \ln \eta, \quad (1)$$

$$\beta \mu = \ln \frac{c}{1 - \theta - c} - z \ln \frac{Y - c}{1 - c}, \quad (2)$$

$$\chi_T = \frac{1 - \theta}{1 - \theta - c} + z \frac{c}{1 - 2Y} \left(\frac{W}{Y - c} - \frac{1}{1 - c} \right), \quad (3)$$

$$F(1; 1) = \frac{c^2(1 - c)}{Y(Y - c)} W, \quad (4)$$

где

$$Y = 0,5 \left(1 + \sqrt{1 + 4c(1 - c)(W - 1)} \right), \quad \eta = \frac{Y - c}{1 - c}, \quad W = \exp(-\beta J), \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (5)$$

c и θ – концентрации частиц и заблокированных узлов соответственно; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; J – энергия взаимодействия двух примесных частиц, занимающих ближайшие решеточные узлы ($J < 0$ в случае системы с притяжением между частицами).

Сопоставление результатов аналитических расчетов и данных моделирования системы по методу Монте-Карло показало, что в случае системы с притяжением ближайших соседей результаты обоих подходов находятся в достаточно хорошем качественном соответствии друг с другом.

Целью настоящей работы является исследование транспортных процессов в рассматриваемой модели, в частности, определение кинетического коэффициента диффузии и изучение его зависимости от концентрации заблокированных узлов.

Необходимо отметить, что при рассмотрении равновесных характеристик заблокированные узлы оказываются подобны вакантным, поскольку занимающая решеточный узел примесная частица не взаимодействует ни с вакантным, ни с заблокированным узлами. В то же время ситуация становится абсолютно иной при изучении процесса диффузии, поскольку эти заблокированные узлы остаются неподвижными, тогда как вакансии могут перемещаться.

Алгоритм моделирования. Диффузионный процесс в решеточном флюиде может быть смоделирован в рамках метода Монте-Карло с помощью стандартного алгоритма Метрополиса [4], модифицированного с целью учета наличия в системе заблокированных узлов.

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 либо является заблокированным, 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:

$$P_{ij} = P_0^{-1} \exp(\beta J_s), \quad (6)$$

где P_0 – нормировочный коэффициент, равный 1 для системы с притяжением ближайших соседей и $\exp(3\beta J)$ для системы с отталкиванием, его физический смысл состоит в том, чтобы наиболее энергетически выгодный переход частицы осуществлялся с вероятностью, равной 1; s – число ближайших соседей частицы, находящейся в исходном узле i .

Это означает, что если $P_r > P_{ij}$, 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 $30^3 = 900$ решеточных узлов. Процедура моделирования состояла из 50 000 МКШ. Дополнительно первые 10 000 МКШ отводились на эквилибризацию 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 .

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

Также необходимо отметить, что при вычислении каждой из описанных выше траекторий происходит новая расстановка заблокированных узлов на решетке в соответствии с заданной их концентрацией.

Результаты моделирования. На рис. 1 представлена зависимость от времени измеренного в МКШ среднего квадрата смещения центра масс ансамбля примесных частиц, полученная при параметре взаимодействия $\beta J = -1,479$, концентрации примесных частиц $c = 0,50$ и двух различных концентрациях заблокированных узлов $\theta = 0,3$ (кривая 1) и $0,4$ (кривая 2).

Анализ полученных зависимостей позволяет сделать вывод о качественных различиях в

процессе миграции частиц в двух рассмотренных случаях. При концентрации заблокированных узлов, равной 0,3, рассматриваемая зависимость является с высокой степенью точности линейной и ее аппроксимация позволяет определить кинетический коэффициент диффузии системы. При приближении концентрации заблокированных узлов к перколяционному пределу [5] подвижность частиц не только резко снижается, но изменяется и сам характер зависимости среднего квадрата смещения центра масс системы от времени, который становится нелинейным и достаточно хорошо может быть аппроксимирован степенной функцией. Это позволяет говорить об аномальной диффузии в системе при данных условиях.

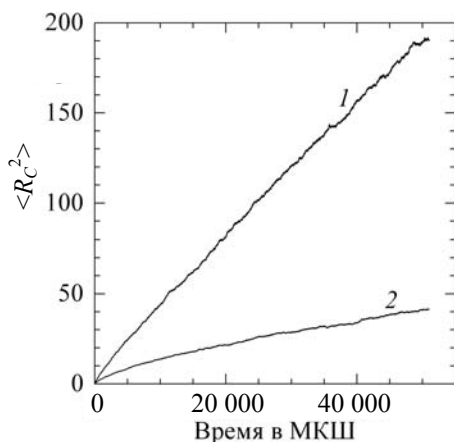


Рис. 1. Зависимость среднего квадрата смещения центра масс системы примесных частиц от времени, измеренного в МКШ при $\beta J = -1,479$, $c = 0,50$, $\theta = 0,3$ (кривая 1) и $0,4$ (кривая 2)

Зависимость кинетического коэффициента диффузии от концентрации примесных частиц при $\beta J = -1,479$ и $\theta = 0,2$ показана рис. 2. Здесь же проводится сравнение полученных результатов с аналогичными данными для решеточного флюида на решетке, не содержащей заблокированных узлов [6].

Коэффициент D_0 в данном случае представляет собой коэффициент диффузии лэнгмюровского решеточного газа:

$$D_0 = \frac{z_1 w a^2}{2d}, \quad (7)$$

где z_1 – число ближайших соседних узлов ($z_1 = 4$ для плоской квадратной решетки); w – вероятность прыжка частицы в свободный соседний узел; a – расстояние между узлами решетки (длина прыжка частицы); d – размерность пространства.

Проведенное сравнение показывает, что хотя качественный вид зависимости кинетическо-

го коэффициента диффузии от концентрации сохраняется, наличие заблокированных узлов приводит к его снижению. Наиболее существенным данное снижение становится при больших концентрациях мигрирующих частиц.

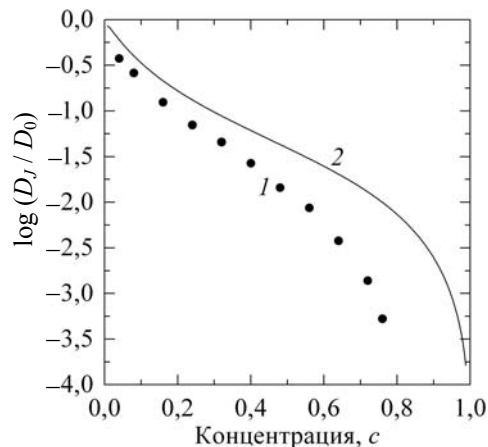


Рис. 2. Зависимость концентрации кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида при $\beta J = -1,7627$ на решетке с $\theta = 0,2$ (кривая 1) и на решетке, не содержащей заблокированных узлов (кривая 2)

Такое поведение коэффициента диффузии может быть объяснено тем, что заблокированные узлы снижают число позиций, куда может перейти примесная частица, при этом, очевидно, их влияние будет наиболее заметным именно в области высоких концентраций, где число доступных узлов и так мало.

В явном виде влияние концентрации заблокированных узлов на величину коэффициента диффузии отражено на рис. 3, где представлена зависимость от концентрации заблокированных узлов кинетического коэффициента диффузии.

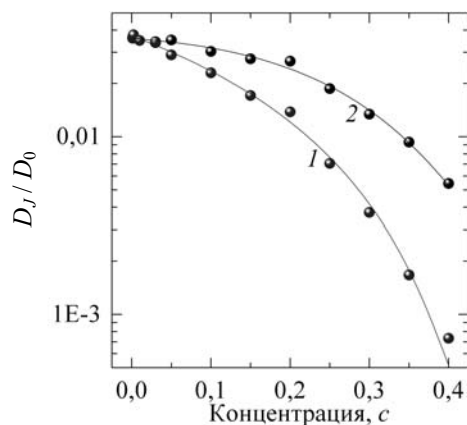


Рис. 3. Зависимость от концентрации заблокированных узлов кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида при $\beta J = -1,479$ и $c = 0,5$ (кривая 1) и $c / (1 - \theta) = 0,5$ (кривая 2)

Приведенная на рис. 3 кривая 1 соответствует системам с одинаковыми значениями как параметра взаимодействия ($\beta J = -1,479$), так и концентрации ($c = 0,5$). Однако в этом случае необходимо учесть, что рост числа заблокированных узлов при сохранении числа узлов, занятых частицами, приводит к уменьшению числа вакантных положений, что и будет играть определяющую роль в снижении концентрации.

Для устранения отмеченной особенности было проведено повторное моделирование, при котором концентрация примесных частиц при различных значениях концентрации заблокированных узлов принималась различной, но такой, что

$$\frac{c}{1-\theta} \approx 0,5. \quad (8)$$

Фактически это означало введение новой концентрации, определяемой не по полному числу решеточных узлов, а по числу узлов решетки, которые могут быть заняты примесными частицами.

Результаты данного моделирования представлены в виде кривой 2 (рис. 3). Как и в первом случае, имеет место снижение кинетического коэффициента диффузии с ростом концентрации заблокированных узлов. Однако можно отметить, что данное снижение является существенно более малым.

Аналитическое выражение для оценки кинетического коэффициента диффузии. При рассмотрении диффузионного процесса в решеточном флюиде на решетке, не содержащей заблокированных узлов, для оценки кинетического коэффициента диффузии было предложено соотношение Жданова [7], позволяющее определить коэффициент диффузии через коэффициент диффузии ленгмюровского газа и равновесные характеристики системы:

$$D_J = D_0 \frac{\exp[\beta\mu]}{c} F(0; 0), \quad (9)$$

где $F(0; 0)$ – вероятность двум ближайшим решеточным узлам быть вакантными.

В дальнейшем было показано [6], что предложенное соотношение соответствует приближению, в котором не учитывается влияние эффектов памяти на миграцию частиц.

Рассмотренное выше квазихимическое приближение (1)–(5) позволяет определить равновесные значения химического потенциала. Однако с его помощью может быть найдена лишь функция $F(1; 1)$, а определение вероятности $F(0; 0)$ из условий нормировки, как это было сделано для системы, не содержащей заблокированных узлов, является невозможным. Поэтому для сопоставления результатов использования аналитического выражения и данных моделирования может быть

предложен подход, в котором равновесные значения термодинамических величин определяются в ходе моделирования равновесных свойств системы по методу Монте-Карло.

Закключение. Проведенное на рис. 4 сопоставление данных моделирования диффузионного процесса в решеточном флюиде с результатами использования соотношения (9) показало, что последнее при низких температурах ($\beta J = -1,679$ и $-1,479$) приводит к заметному завышению значения коэффициента диффузии. Однако уже при $\beta J = -1$ его точность становится вполне достаточной для адекватной оценки значения кинетического коэффициента диффузии.

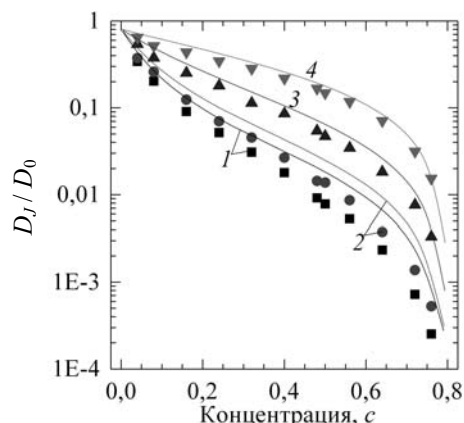


Рис. 4. Зависимость от концентрации примесных частиц кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида при $\beta J = -1,679$ (кривая 1); $-1,479$ (кривая 2); $-0,881$ (кривая 3) и $-0,294$ (кривая 4).

Точками представлены результаты прямого моделирования диффузионного процесса, сплошными линиями – результаты применения соотношения (10)

Анализ зависимости кинетического коэффициента диффузии от обратной температуры позволяет определить соответствующую среднюю энергию активации, которая представлена на рис. 5.

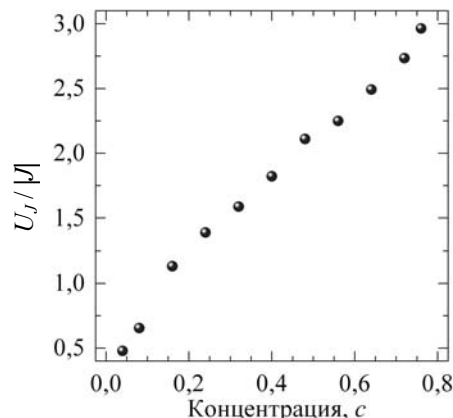


Рис. 5. Зависимость от концентрации примесных частиц энергии активации кинетической диффузии

Как видно из рис. 5, средняя энергия активации приблизительно линейно возрастает с увеличением концентрации примесных частиц на решетке. Данный рост объясняется, с одной стороны, тем, что при увеличении числа частиц на решетке снижается число вакантных узлов, а значит,

затрудняются переходы частиц из одного решеточного узла в другой. С другой стороны, при этом возрастает роль межчастичных взаимодействий, которые в случае системы с притяжением между частицами непосредственно увеличивают глубины энергетических ям, в которых находятся частицы.

Литература

1. Аргиракис П., Гиазитзидис П., Грода Я. Г. Термодинамические и структурные свойства решеточного флюида на плоской квадратной решетке с заблокированными узлами: квазихимическое приближение // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 48–52.
2. Tringides M., Gomer R. A Monte Carlo study of oxygen diffusion on the (110) plane of tungsten // *Surface Science*. 1984. Vol. 145, no. 1. P. 121–144.
3. Tringides M., Gomer R. Models of surface diffusion: I. Anisotropy in activated diffusion // *Surface Science*. 1986. Vol. 166, no. 2–3. P. 419–439.
4. Uebing C., Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions // *The Journal of Chemical Physics*. 1991. Vol. 95, no. 10. P. 7626–7652.
5. Lee M. J. Pseudo-random-number generators and the square site percolation threshold // *Phys. Rev. E*. 2008. Vol. 78. Art. no. 031131.
6. Bokun G. S., Groda Ya. G., Uebing C., Vikhrenko V. S. Statistical-mechanical description of diffusion in interacting lattice gases // *Physica A*. 2001. Vol. 296. P. 83–105.
7. Zhdanov V. P. General equation for description of surface diffusion in the framework of the lattice gas model // *Surf. Sci.* 1985. Vol. 149, no. 1. P. L13–L17.

References

1. Argyrakis P., Giazitzidis P., Groda Ya. G. Thermodynamic and structural properties of lattice fluids on a plane square lattice with a blocked sites: quasi-chemical approximation. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 48–52 (In Russian).
2. Tringides M., Gomer R. A Monte Carlo study of oxygen diffusion on the (110) plane of tungsten. *Surface Science*, 1984, vol. 145, no. 1, pp. 121–144.
3. Tringides M., Gomer R. Models of surface diffusion: I. Anisotropy in activated diffusion. *Surface Science*, 1986, vol. 166, no. 2–3, pp. 419–439.
4. Uebing C., Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. *The Journal of Chemical Physics*, 1991, vol. 95, no. 10, pp. 7626–7652.
5. Lee M. J. Pseudo-random-number generators and the square site percolation threshold. *Phys. Rev. E.*, 2008, vol. 78, art. no. 031131.
6. Bokun G. S., Groda Ya. G., Uebing C., Vikhrenko V. S. Statistical-mechanical description of diffusion in interacting lattice gases. *Physica A*, 2001, vol. 296, pp. 83–105.
7. Zhdanov V. P. General equation for description of surface diffusion in the framework of the lattice gas model. *Surf. Sci.*, 1985, vol. 149, no. 1, pp. L13–L17.

Информация об авторах

Аргиракис Панос – доктор наук, профессор, профессор отделения физики. Университет имени Аристотеля (54124, г. Салоники, Греция). E-mail: panos@auth.gr

Гиазитзидис Параскевас – аспирант отделения физики. Университет имени Аристотеля (54124, г. Салоники, Греция). E-mail: pgiazi@auth.gr

Грода Ярослав Геннадьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: groda@belstu.by

Information about the authors

Argyrakis Panos – DSc, Professor, Professor, the Department of Physics. Aristotle University of Thessaloniki (AUTH, 54124, Thessaloniki, Greece). E-mail: panos@auth.gr

Giazitzidis Paraskevas – PhD student, the Department of Physics. Aristotle University of Thessaloniki (AUTH, 54124, Thessaloniki, Greece). E-mail: pgiazi@auth.gr

Groda Yaroslav Gennad'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Head of the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: groda@belstu.by

Поступила 10.03.2016

УДК 531.19

Г. С. Бокун, В. С. Вихренко

Белорусский государственный технологический университет

**ХИМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ В ФОРМЕ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ИМПЕДАНСА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ**

Для описания распределения заряда по пространству твердого электролита используется модифицированная система уравнений Нернста – Планка – Пуассона (НПП). Исследуется случай малых отклонений от однородности. Потенциал рассматривается не как функция, а как функционал поля плотности. При этом в уравнениях переноса появляется градиентная составляющая, вносящая определяющий вклад в областях с большими градиентами плотности, в частности в приэлектродных областях и областях межзеренных границ. Этим достигается применимость уравнений НПП для описания распределения плотности заряда, в частности в области двойного слоя. Анализируется отклик электрохимической системы на гармоническое возмущение в простейшем случае распространения тока по объему электролита, при котором не образуется двойной электрический слой Гельмгольца между электродами и электролитом. Это означает, что электроды, к которым подводится напряжение, имеют такие же электрофизические свойства, как и электролит. Для электрического потенциала получена система двух дифференциальных уравнений первого порядка по времени и четвертого порядка по пространственной координате для областей между и за пределами электродов. Для исследования частотных характеристик выполнено преобразование Лапласа полученных модифицированных уравнений НПП. Найдены решения сформулированных уравнений, позволяющие вычислить зависимости разности потенциалов и тока от частоты, а следовательно, и импеданс системы.

Ключевые слова: уравнения Нернста – Планка – Пуассона, электрохимическая система, импеданс, химический потенциал, двойной слой, распределение заряда.

G. S. Bokun, V. S. Vikhrenko

Belarusian State Technological University

**CHEMICAL POTENTIAL AS A DENSITY FUNCTIONAL
TO DESCRIBE THE IMPEDANS OF AN ELECTROCHEMICAL SYSTEM**

To describe the charge distribution in space of the solid electrolyte a modified system of Nernst – Planck – Poisson (NPP) equations is used. The case of small deviations from uniformity is considered. The potential is considered not as a function but as a functional of the density field. In the transport equation a gradient summand appears, making a decisive contribution in areas with large gradients of density, in particular to the areas of the electrode regions and grain boundaries. This ensures applicability of NPP equations to describe the distribution of the charge density in particular in the area of the double layer. We consider the response of an electrochemical system to harmonic disturbance in the simplest case of electric current over the electrolyte in which the Helmholtz double layer between the electrodes and the electrolyte is not formed. This means that the electrodes, to which voltage is applied, have the same electrical properties as the electrolyte. For electric potential, a system of two differential equations of the first order in time and fourth order in the spatial coordinate for the areas between and outside the electrodes is deduced. To investigate the frequency characteristics Laplace transform of the obtained modified NPP equations is performed. The solutions of the formulated equations are found that allow us to calculate the dependence of the potential difference and the current on the frequency and the system impedance as well.

Key words: Nernst – Planck – Poisson equation, electrochemical system, chemical potential, stationary conditions, double layer, charge distribution.

Введение. Нахождение распределения заряда и электрического потенциала в электрохимических системах является одной из важнейших проблем, на решениях которой в существенной мере основываются многие технологические процессы. Надежным теоретическим базисом для решения этой проблемы является система уравнений Нернста – Планка – Пуассона (НПП), включающая уравнение переноса заряда и уравнение связи электрического потен-

циала с плотностью распределения заряда [1]. Эта система уравнений использовалась для изучения релаксации распределения плотности ионных зарядов [2], исследования распределения заряда в приэлектродных двойных слоях [3] и в других задачах.

При традиционном применении уравнений НПП предполагается, что градиенты концентраций компонентов не слишком велики, и можно использовать локальную связь между

плотностью и химическим потенциалом. Однако в ионных кристаллах зачастую концентрации носителей заряда велики, что приводит в приэлектродных или межзеренных областях к большим градиентам концентрации и необходимости учета нелокальных зависимостей. В этом случае химический потенциал следует рассматривать как функционал поля плотности и в первом приближении использовать вклад в свободную энергию, пропорциональный квадрату градиента плотности [4, 5]. В работе [6] использована модифицированная система уравнений НПП, когда в выражении для химического потенциала были учтены градиентные составляющие свободной энергии и рассмотрены задачи установления равновесного распределения зарядов при контакте двух ионных проводников и равновесного распределения заряда в электрохимической системе. Ниже изучается отклик электрохимической системы на приложенное гармоническое возмущение и возможность исследования импедансных характеристик при учете градиентной составляющей.

Дифференциальное уравнение эволюции электрического потенциала. При применении модифицированного уравнения НПП для описания импеданса твердого электролита рассмотрим случай одномерной неоднородности вдоль оси x .

Поток числа частиц найдем из уравнения диффузии:

$$J(x) = -D \frac{\partial \mu}{\partial x}, \quad (1)$$

где μ – химический потенциал; D – кинетический коэффициент диффузии.

Тогда скорость изменения плотности ρ числа частиц дивергенцией потока определяется:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x}. \quad (2)$$

После преобразования Лапласа по времени с частотой ω получим:

$$i\omega \rho = -\frac{\partial J}{\partial x}. \quad (3)$$

Интегрирование по координате позволяет записать:

$$J(x) = J_0 - i\omega \int_0^x \rho(x) dx, \quad (4)$$

где J_0 – ток через левую границу ($x = 0$) системы.

Для того чтобы связать ток, определяемый по уравнению (4), с электрическим потенциалом ϕ , используем уравнение Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{\partial E}{\partial x} = -C_q \rho, \quad (5)$$

где E – напряженность электрического поля,

$$C_q = \frac{q}{\epsilon \epsilon_0}, \quad (6)$$

q – заряд частицы; ϵ – диэлектрическая проницаемость среды; ϵ_0 – электрическая постоянная.

Применяем соотношение (5) в уравнении (4):

$$J(x) = J_0 - \frac{i\omega}{C_q} (E(x) - E_0). \quad (7)$$

Интегрирование уравнения (7) по координате приводит к результату:

$$\int_0^x J(x) dx = \left(J_0 + \frac{i\omega}{C_q} E_0 \right) x + \frac{i\omega}{C_q} (\phi - \phi_0). \quad (8)$$

Интегрируя уравнение (1) и используя соотношение (8), получаем связь между химическим и электрическим потенциалами в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mu(x) - \mu_0 &= -\frac{1}{D} \int_0^x J(x) dx = \\ &= -\frac{i\omega(\phi - \phi_0) + (J_0 C_q + i\omega E_0) x}{C_q D}. \end{aligned} \quad (9)$$

Выразим химический потенциал через электрический, опираясь на функциональную формулу для его представления [6]:

$$\mu(x) = \mu_{\text{ch}}(x) + q\phi(x) + \alpha \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \quad (10)$$

где q – эффективный заряд носителей тока; α – параметр взаимодействия; $\mu_{\text{ch}}(x)$ – локально-равновесная составляющая химического потенциала, рассчитываемая без учета электростатического взаимодействия частиц. Для последней используем разложение:

$$\mu_{\text{ch}}(x) = \mu_{\text{ch}}(\bar{\rho}) + \gamma \delta \rho(x). \quad (11)$$

Здесь $\bar{\rho}$ – равновесная плотность числа частиц в однородной системе; $\gamma = \partial \mu / \partial \rho$; $\delta \rho$ – отклонение плотности от ее равновесного значения.

С учетом соотношения (5) из уравнения (10) получим:

$$\mu(x) = \mu_{\text{ch}}(\bar{\rho}) + q\phi - (\gamma \phi^{(2)} + \alpha \phi^{(4)}) C_q. \quad (12)$$

Подставив соотношение (12) в выражение (9) и обозначив $\psi = \phi - \phi_0$, находим:

$$\begin{aligned} -\frac{\alpha}{C_q} \psi^{(4)} + \left(q + \frac{i\omega}{C_q D} \right) \psi - \frac{\gamma \psi^{(2)}}{C_q} = \\ = \mu_0 - \mu_{\text{ch}}(\bar{\rho}) - \left(J_0 C_q + i\omega E_0 \right) \frac{x}{DC_q} - q\phi_0. \end{aligned} \quad (13)$$

Перепишем полученное уравнение в виде

$$\begin{aligned} & \psi^{(4)} + \frac{\gamma}{\alpha} \psi^{(2)} - \left(\frac{C_q q}{\alpha} + \frac{i\omega}{\alpha D} \right) \psi = \\ & = \frac{C_q}{\alpha} \left(\mu_{\text{ch}}(\bar{\rho}) + q\phi_0 + \left(J_0 + \frac{i\omega E_0}{C_q} \right) \frac{x}{D} - \mu_0 \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Согласно соотношениям (5) и (10),

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \mu_{\text{ch}}(0) + q\phi_0 + \alpha \left. \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right|_{x=0} = \\ &= \mu_{\text{ch}}(\bar{\rho}) - \frac{\gamma}{C_q} \phi_0^{(2)} + q\phi_0 - \frac{\alpha}{C_q} \phi_0^{(4)}. \end{aligned} \quad (15)$$

С учетом соотношения (15) уравнение (14) преобразуется к виду

$$\psi^{(4)} + \frac{\gamma}{\alpha} \psi^{(2)} - B\psi = \psi_0^{(4)} + \frac{\gamma}{\alpha} \psi_0^{(2)} + Fx, \quad (16)$$

где

$$B = \left(C_q q + \frac{i\omega}{D} \right) \alpha^{-1}, \quad F = \frac{J_0 C_q + i\omega E_0}{\alpha D}, \quad (17)$$

которое и определяет поведение электрического потенциала в системе.

Далее рассмотрим ситуацию, когда начало отсчета выбрано по центру между электродами, так что решение должно быть нечетной функцией координаты. В этом случае $\psi_0^{(2)} = 0$ и $\psi_0^{(4)} = 0$, так что уравнение (16) упрощается:

$$\psi^{(4)} + \frac{\gamma}{\alpha} \psi^{(2)} - B\psi = Fx. \quad (18)$$

Определение импеданса системы. Решение неоднородного дифференциального уравнения (18) имеет вид

$$\psi(x) = C_1 \text{sh}(k_1 x) + C_2 \text{sh}(k_2 x) - Gx, \quad (19)$$

где

$$G = \frac{F}{B} = \frac{J_0 C_q + i\omega E_0}{q D C_q + i\omega}, \quad (20)$$

а корни характеристического уравнения –

$$k_{1,2}^2 = \frac{-\gamma}{2\alpha} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4 \frac{\alpha}{\gamma^2} \left(C_q q + \frac{i\omega}{D} \right)} \right). \quad (21)$$

Правильность выполненных преобразований проверяется тем, что подстановки приводят к условию (7), из которого вычисляем величину электродного тока на правой границе:

$$J(L) = J_0 - \frac{i\omega}{C_q} (E(L) - E_0). \quad (22)$$

Импеданс системы получим по формуле

$$Z(L) = \frac{\Psi(L)}{J(L)}. \quad (23)$$

В настоящей работе рассматривается простейший случай распространения тока по объему электролита, при котором не образуется двойной электрический слой Гельмгольца между электродами и электролитом. Это означает, что электроды, к которым подводится напряжение, имеют такие же электрофизические свойства, как и электролит. К электродным щупам с такими свойствами и расположенными на расстоянии $2L$ друг от друга подводится напряжение, порождающее постоянный ток в электролите величиной J_0 . Для описания указанного эксперимента помещаем начало координат посередине между электродами и приходим к симметричному случаю, когда значение электрического потенциала и плотности распределения заряда обращаются в нуль при нулевом значении координаты x . Соответственно, распределение электрического потенциала будет описываться дифференциальным уравнением (18) при условии $\omega = 0$, т. е. уравнение будет иметь вид

$$\psi^{(4)} + \frac{\gamma}{\alpha} \psi^{(2)} - \frac{C_q q}{\alpha} \psi = \frac{J_0 C_q}{\alpha D} x, \quad (24)$$

решение которого

$$\psi_1(x) = C_1 \text{sh}(k_1 x) + C_2 \text{sh}(k_2 x) - \frac{J_0}{qD} x \quad (25)$$

будет удовлетворять условиям эксперимента при $x = 0$. Постоянные интегрирования в выражении (25) необходимо определить из условий сшивки решений в точке установки электродов при $x = \pm L$, т. е. необходимо учесть, что при $|x| \geq L$ ток отсутствует. Тогда дифференциальное уравнение для ψ примет вид

$$\psi^{(4)} + \frac{\gamma}{\alpha} \psi^{(2)} - \frac{C_q q}{\alpha} \psi = \frac{J_0 C_q}{\alpha D} L. \quad (26)$$

Решение этого уравнения запишем с учетом ограниченности функций при возрастании координаты x . В этом случае вместо решения (25) запишем:

$$\psi_2(x) = C_3 e^{-k_1(x-L)} + C_4 e^{-k_2(x-L)} - \frac{J_0 L}{qD}. \quad (27)$$

Здесь, чтобы избежать чрезмерно малых значений экспонент, за счет произвольных постоянных интегрирования переопределена пространственная координата.

Как было отмечено ранее, значения постоянных интегрирования устанавливаем из условий равенства между собой в точке сшивки функций ψ , ее первых, вторых и третьих производных. Система уравнений для нахождения постоянных интегрирования является линейной, откуда следует пропорциональность значений

функции в точке сшивки и величины тока. Величина импеданса

$$Z(\omega=0) = \frac{\Psi(L)}{J_0} \quad (28)$$

будет величиной неизменной и при $L \gg 1$ пропорциональной L . При этом локальное удельное сопротивление будет оставаться переменным. Отмеченные свойства полученного решения позволяют проводить расчеты, приняв за исходный параметр задачи не величину тока, а напряжение между электродами, которое, не ограничивая общности, можно положить равным единице. Соответственно, параметр J_0 будет находиться как дополнительная неизвестная из условий сшивки решений, которые дополняются условием

$$\Psi(L) = 1. \quad (29)$$

Рассмотрим расчет сопротивления среды при действии переменного внешнего напряжения частоты ω с единичным амплитудным значением. Дифференциальное уравнение на участке $x > L$ будет аналогичным уравнению (16) с тем отличием, что на этом участке F рассчитывается согласно уравнению (17) по значениям G_L и E_L , вычисленным при $x = L$. Однако из условия ограниченности правой части уравнения (16) эту величину следует положить равной нулю. Поэтому

$$\Psi^{(4)} + \frac{\gamma}{\alpha} \Psi^{(2)} - B\Psi = \Psi_L^{(4)} + \frac{\gamma}{\alpha} \Psi_L^{(2)}, \quad x > L, \quad (30)$$

где $\Psi_L^{(2)}$ и $\Psi_L^{(4)}$ – соответственно вторая и четвертая производные потенциала в точке $x = L$.

Для определения пяти неизвестных величин из соотношения (29) и условий сшивки решений при $x = L$ запишем систему уравнений:

$$GL = C_1 \text{sh}(k_1 L) + C_2 \text{sh}(k_2 L) - 1, \quad (31)$$

$$\left(B - k_1^2 - \frac{\gamma}{\alpha} k_1^4 \right) C_3 + \left(B - k_2^2 - \frac{\gamma}{\alpha} k_2^4 \right) C_4 = B, \quad (32)$$

$$C_1 k_1 \text{ch}(k_1 L) + C_2 k_2 \text{ch}(k_2 L) - G = -C_3 k_1 - C_4 k_2, \quad (33)$$

$$C_1 k_1^2 \text{sh}(k_1 L) + C_2 k_2^2 \text{sh}(k_2 L) = C_3 k_1^2 + C_4 k_2^2, \quad (34)$$

$$C_1 k_1^3 \text{ch}(k_1 L) + C_2 k_2^3 \text{ch}(k_2 L) = -C_3 k_1^3 - C_4 k_2^3. \quad (35)$$

Решение системы уравнений (31)–(35) позволяет определить зависимость постоянных интегрирования и параметра G от частоты. Отметим, что сперва с учетом уравнения (31) решается система четырех уравнений (32)–(35) относительно четырех неизвестных C_j , а затем определяется параметр G .

Таким образом, окончательно все электрофизические величины оказываются выраженными через разность потенциалов, налагаемую

на систему, которая выше выбрана в виде гармонической функции с единичной амплитудой. После определения зависимости $G = G(\omega)$ находим, используя выражение (20), зависимость величин J_0 и E_0 от частоты, которые ввиду линейности соотношения (20) будут пропорциональны приложенной разности потенциалов и которые в соответствии с (7) и (20) должны удовлетворять закону сохранения:

$$J(x)C_q + i\omega E(x) = J_0 C_q + i\omega E_0 = -G(\omega)(qDC_q + i\omega). \quad (36)$$

Из выражений (1) и (12) следует:

$$J(x) = \frac{D\alpha}{C_q} \Psi^{(5)} + \frac{D\gamma}{C_q} \Psi^{(3)} - qD\Psi^{(1)}. \quad (37)$$

После дифференцирования уравнения (18) по координате с учетом второго из соотношений (17) получим:

$$D\alpha \Psi^{(5)} + D\gamma \Psi^{(3)} - (C_q qD + i\omega) \Psi^{(1)} = J_0 C_q + i\omega E_0. \quad (38)$$

С учетом первого из соотношений (17) уравнение (37) принимает вид

$$J(x) - \frac{i\omega}{C_q} \Psi^{(1)} = J_0 + \frac{i\omega E_0}{C_q}. \quad (39)$$

Отметим, что без решения системы уравнений (31)–(35) названные параметры теории не могут быть определены. E_0 и J_0 можно найти через G после вычисления постоянных интегрирования.

Из изложенного вытекает алгоритм проведения расчетов. Из системы уравнений (31)–(35) вычисляем неизвестные постоянные интегрирования и величину параметра G . Далее по формуле (19) находим распределение электрического потенциала. Затем по формуле (37) рассчитываем величину тока при нулевом значении координаты. По первой производной от функции (19) вычисляем значение напряженности поля в нуле. Определенные таким образом параметры подставляем в формулу (20). Найденное в результате значение G должно совпасть с таковым, вычисленным из системы (31)–(35). При выполнении указанного требования рассчитываем из формулы (39) величину электродного тока при граничном значении координаты x . По формуле (22) с учетом (20) вычисляем комплексную величину электрического сопротивления электролита. Выделяем мнимую и действительную составляющие полученной величины при каждом выбранном значении частоты, благодаря чему можно построить диаграмму Нернста.

Заключение. Полученные в работе результаты носят достаточно общий характер, так как позволяют моделировать импедансные характеристики твердых электролитов. Последовательное применение линеаризованной системы уравнений НПП при неравновесных либо стационарных условиях показало, что оно достаточно полно описывает все особенности распределения заряда и электрического потенциала в области двойного слоя.

Разработанный вариант модификации уравнений НПП применим также для описания двойных слоев в межзеренных областях токо-

проводящих керамик. Теория становится конструктивной, когда химический потенциал является функционалом поля плотности. В результате получено дифференциальное уравнение со специальной правой частью, пригодное для описания стационарных и нестационарных процессов. Рассмотрен случай распространения потенциала и тока, когда в приэлектродной области влиянием двойного электрического слоя можно пренебречь. При названных условиях процесс переноса тока описывается дифференциальными уравнениями в каждой области, дополненными специальными условиями сшивки.

Литература

1. Computer simulations of electrodiffusion problems based on Nernst – Planck – Poisson equations / J. J. Jasielec [et al.] // *Computational Materials Science*. 2012. Vol. 63, no. 1. P. 75–90.
2. Buck R. P. Diffuse layer charge relaxation at the ideally polarized electrode // *Journ. Electroanal. Interfacial Chem.* 1969. Vol. 23. P. 219–240.
3. Bazant M. Z., Thornton K., Ajdari A. Diffuse-charge dynamics in electrochemical systems // *Phys. Rev. E*. 2004. Vol. 70, no. 2. Art. # 021506.
4. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
5. Cahn J. W., Hillard J. E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy // *Journ. Chem. Phys.* 1958. Vol. 28, no. 1. P. 258–267.
6. Бокун Г. С. Асимптотическое решение уравнений Нернста – Планка – Пуассона для ионного кристалла // *Труды БГТУ*. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 32–34.

References

1. Jasielec J. J., Filipek R., Szyszkiwicz K., Fausek J., Danielewski M., Lewenstam A. Computer simulations of electrodiffusion problems based on Nernst – Planck – Poisson equations. *Computational Materials Science*, 2012, vol. 63, no. 1, pp. 75–90.
2. Buck R. P. Diffuse layer charge relaxation at the ideally polarized electrode. *Journ. Electroanal. Interfacial Chem.*, 1969, vol. 23, pp. 219–240.
3. Bazant M. Z., Thornton K., Ajdari A. Diffuse-charge dynamics in electrochemical systems. *Phys. Rev. E.*, 2004, vol. 70, no. 2, art. # 021506.
4. Lifshits E. M., Pitaevskiy L. P. *Fizicheskaya kinetika* [Physical Kinetics]. Moscow, Nauka Publ., 1979. 527 p.
5. Cahn J. W., Hillard J. E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *Journ. Chem. Phys.*, 1958, vol. 28, no. 1, pp. 258–267.
6. Bokun G. S. Asymptotic solution of the Nernst – Planck – Poisson equation for the ionic crystal. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2014, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 32–34 (In Russian).

Информация об авторах

Бокун Георгий Станиславович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gBokun@mail.ru

Вихренко Вячеслав Степанович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: vvikhre@mail.ru

Information about the authors

Bokun George Stanislavovich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gBokun@mail.ru

Vikhrenko Vyacheslav Stepanovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vvikhre@mail.ru

Поступила 02.03.2016

УДК 531.19

Я. Г. Грода, В. С. Вихренко

Белорусский государственный технологический университет

**ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ СЛУЧАЙНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЫСОТ
МЕЖУЗЕЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ НА ЭНЕРГИЮ АКТИВАЦИИ ПРОВОДИМОСТИ
В КВАЗИОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ ТОПЛИВНОЙ ЯЧЕЙКИ**

Рассматривается квазиодномерная решеточная модель топливной ячейки на основе иттрий-стабилизированного диоксида циркония, в которой ионы кислорода совершают термоактивированные переходы в вакантные решеточные узлы, а ионы иттрия и циркония принимаются неподвижными. Активационный барьер, преодолеваемый частицей при переходе, полагается состоящим из случайного межузельного барьера, величина которого подчиняется распределению Гаусса с заданными средним значением и дисперсией, и электростатической части, обусловленной взаимодействием между ионами. Для численного моделирования переноса заряда в системе использовался динамический метод Монте-Карло. Показано, что электропроводность обратно пропорциональна температуре, что позволяет определить ее энергию активации. Электростатическое взаимодействие приводит к возрастанию энергии активации электропроводности, в то время как увеличение среднеквадратичного отклонения высот межузельных барьеров от среднего значения вызывает ее снижение. Установлено, что при заблокированных электродах в приэлектродных областях образуются двойные электрические слои толщиной не более нескольких постоянных решетки, которая слабо зависит от температуры и дисперсии гауссовского распределения барьеров.

Ключевые слова: топливная ячейка, решеточная модель, динамический метод Монте-Карло, вероятность перехода, энергия активации.

Ya. G. Groda, V. S. Vikhrenko

Belarusian State Technological University

**INFLUENCE OF RANDOM DISTRIBUTION PARAMETERS
OF INTERSITE BARRIER HEIGHTS ON CONDUCTIVITY ACTIVATION ENERGY
IN QUASI-ONE-DIMENSIONAL LATTICE MODEL OF FUEL CELL**

The quasi-one-dimensional lattice model of an oxide fuel cell is considered. Oxygen ions can perform thermally activated jumps over vacant lattice sites while positive yttrium and zirconium ions are considered as immobile. The activation barrier for particle jumps consists of a host system contribution that can fluctuate with Gaussian distribution around some energy level and electrostatic interactions between ions. Kinetic Monte Carlo algorithm is used for numerical simulation of charge transfer in the system. It is shown that the electrical conductivity is proportional to inverse temperature that allows us to evaluate the conductivity activation energy. The electrostatic interactions increase the latter while the host barrier fluctuations decrease it. It is found that for blocked electrodes an electric double layer is formed near the electrodes. The thickness of the double layer is of a few lattice constants and weakly depends on the temperature and Gaussian distribution dispersion.

Key words: fuel cell, lattice model, kinetic Monte Carlo, transition probability, activation energy.

Введение. В работе [1] было отмечено, что применение динамического метода Монте-Карло (ДМК) при моделировании твердотельных топливных элементов оказывается значительно более выгодным с точки зрения временных затрат по сравнению с молекулярно-динамическим (МД) моделированием. Это обусловлено в первую очередь тем, что в рамках ДМК время измеряется в абстрактных шагах алгоритма Монте-Карло (МКШ). Это позволяет рассмотреть такие явления, как адсорбция или диффузия, за один МКШ в отличие от МД-моделирования, в котором используются временные шаги малой величины и отслеживаются промежуточные состояния атомов.

С целью применения ДМК к изучению электрофизических свойств топливной ячейки на основе иттрий-стабилизированного диоксида циркония в работе [1] была предложена квазиодномерная решеточная модель системы, представленная на рис. 1.

В рамках этой модели весь массив электролита разбит на укрупненные ячейки, каждая из которых содержит по одной вакансии в подрешетке кислорода и по два иона иттрия, что обеспечивает электронейтральность системы. Ионы иттрия и циркония малоподвижны, тогда как ионы кислорода могут перемещаться в вакантные узлы. На рис. 1 укрупненные ячейки показаны вертикальными слоями, в каждом из кото-

рых положительные ионы представлены одним темным кружком. В используемой ниже модификации этой модели предполагается, что в каждой ячейке имеется два узла, доступных ионам кислорода (серые кружки), что обеспечивает дополнительные пути их миграции и возможность перестановки ионов вдоль горизонтальной оси, отсутствующей в чисто одномерных моделях. В каждом слое могут находиться либо два иона кислорода, либо две вакансии (светлые кружки), либо одна вакансия и один ион кислорода. Ионы кислорода могут совершать термоактивированные, с учетом действия электрического поля, переходы из одного слоя в другой.

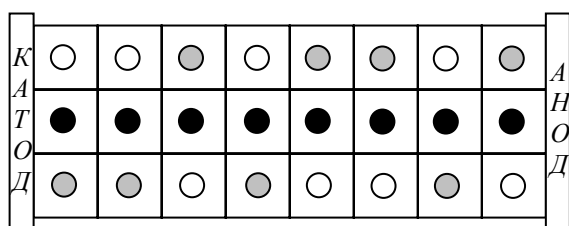


Рис. 1. Квазиодномерная решеточная модель топливного элемента на основе иттрий-стабилизированного циркония.

Темными кружками показаны положительные ионы, серыми – отрицательные, белыми – вакансии. Отрицательно заряженные ионы могут переходить в соседние (слева либо справа) ячейки

Проведенное в работах [2, 3] моделирование описанных систем с равномерным и экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров показало, что электростатическое взаимодействие между ионами вносит значительный вклад в энергию активации миграции частиц. В свою очередь, флуктуации энергетических барьеров влияют на энергию активации незначительно. Также было установлено, что при блокированных электродах в приэлектродных областях образуются двойные электрические слои толщиной не более нескольких постоянных решетки. В настоящей работе представлены результаты моделирования системы с нормальным (гауссовским) распределением высот межузельных барьеров и исследовано влияние дисперсии распределения на энергию активации системы.

Вычисление энергии активации в рамках динамического метода Монте-Карло. Как было отмечено ранее [2], основное отличие ДМК от классического алгоритма Метрополиса [4] состоит в явном вычислении энергии активации E_a , которая определяет вероятность перехода частицы в соседний слой и является ключевым понятием данного подхода.

При объемной диффузии вероятность перехода частицы в соседнее положение P определяется выражением аррениусовского вида

$$P = P_0^{-1} \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где P_0 – нормировочный предэкспоненциальный фактор; k_B – постоянная Больцмана; T – температура.

Поскольку мигрирующие частицы не являются электронейтральными, необходимо учитывать влияние на энергию активации как неоднородности кристаллического поля, вызванное, например, наличием межзеренных границ в электролите, так и электрических полей. Это позволяет представить энергию активации в следующем виде:

$$E_a = E_B(E_0, \sigma) + E_F, \quad (2)$$

где величина межузельного барьера E_B представляет собой случайную величину, подчиняющуюся нормальному распределению с математическим ожиданием E_0 и среднеквадратичным отклонением (дисперсией) σ .

Вклад E_F электрических полей в энергию активации определяется электростатическим взаимодействием ионов и может быть записан как:

$$E_{jF} = h(U + E_{jion}) + E_{jsheet}, \quad (3)$$

где $h = \pm 1$ и определяется направлением прыжка отрицательно заряженного иона со слоя j на слой $j - 1$ либо $j + 1$ соответственно; U – энергия внешнего электрического поля; E_{jion} – вклад в общее электрическое поле со стороны подвижных и неподвижных ионов электролита всех его слоев, за исключением слоя j ; E_{jsheet} – вклад в общее электрическое поле со стороны ионов, расположенных в слое j , т. е. в том же слое, что и движущийся ион [1, 3]:

$$E_{jion} = \frac{\Delta E}{2} \left(\sum_{k=j+1}^N Q(k) - \sum_{k=1}^{j-1} Q(k) \right), \quad (4)$$

$$E_{jsheet} = \frac{\Delta E}{2} (Q(j) - q), \quad (5)$$

где ΔE – энергия взаимодействия двухзарядных ионов кислорода, находящихся в соседних плоскостях в расчете на один ион; $Q(k)$ – заряд k -го слоя модели.

Алгоритм моделирования. Для моделирования рассматриваемой системы по методу Монте-Карло используется алгоритм, в котором случайным образом выбирается произвольный отрицательно заряженный ион, занимающий слой j . После этого определяется направление его возможного перехода. Если ячейка-приемник k оказывается занятой другим отрицательным ионом, то переход считается

невозможным, так как двойное занятие ячеек не допускается. Тем не менее попытка этого перехода учитывается. Если ячейка-приемник свободна, то переход считается происходящим с вероятностью, определяемой соотношением (1), в котором нормировочная вероятность P_0 подбирается из условия недопущения $P > 1$ непосредственно в ходе моделирования. Для принятия либо отклонения рассматриваемого перехода генерируется случайное число P_r из диапазона $[0; 1]$, которое сопоставляется с P . Если $P \geq P_r$, то переход считается произошедшим, если $P < P_r$, то переход отклоняется.

Повторение описанной процедуры N раз, где N – число рассматриваемых слоев, формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

В процессе моделирования некоторое начальное количество МКШ отводится для эквilibризации системы, т. е. перехода системы в равновесное состояние, и не учитывается при последующем анализе результатов моделирования. Для процедуры усреднения результатов, полученных по различным реализациям предложенной модельной системы, использовался алгоритм, в котором после некоторого числа МКШ происходит перестройка моделируемой системы, заключающаяся в задании нового случайного распределения значений энергий межузельных барьеров.

Для определения величины заряда, проходящего через анод, а следовательно, и тока, протекающего через электролит, применяются периодические граничные условия.

Если же отказаться от периодических граничных условий и запретить ионам покидать моделируемую систему, то путем усреднения зарядов в слоях по времени может быть определено равновесное пространственное распределение отрицательно заряженных ионов во внешнем поле.

При установлении величин межузельных барьеров E_B , входящих в соотношение (2), следует отметить, что с помощью встроенных стандартных средств языков программирования можно, как правило, выбрать лишь равномерно распределенное псевдослучайное число x_r из диапазона $[0; 1]$. Следовательно, необходимо осуществить переход от равномерно распределенной случайной величины к случайным числам E_B , распределенным согласно заданной функции распределения.

В случае нормального распределения такой переход может быть выполнен с помощью преобразования Бокса – Мюллера [5]:

$$\begin{aligned} z_1 &= \cos(2\pi\phi)\sqrt{-2\ln r}, \\ z_2 &= \sin(2\pi\phi)\sqrt{-2\ln r}, \end{aligned} \quad (6)$$

где ϕ , r – независимые случайные величины, равномерно распределенные на интервале $(0; 1]$.

Это преобразование является точным, однако его использование предъявляет повышенные требования к качеству генератора псевдослучайных чисел. Для одномерной последовательности случайных нормально распределенных чисел стандартный генератор языка Fortran 90 оказывается вполне применимым. Дополнительно псевдослучайные числа могут быть сделаны «более случайными» в процессе моделирования путем периодического сброса генератора и введения нового затравочного параметра, основанного на текущем системном времени. В результате будут получены два независимых числа z_1 и z_2 , удовлетворяющих стандартному нормальному распределению с математическим ожиданием 0 и дисперсией 1.

Случайная величина барьера, распределенная нормально с заданным математическим ожиданием E_0 и среднеквадратичным отклонением σ , находится по формуле

$$E_B = E_0 + \sigma z, \quad (7)$$

где в качестве z выступают последовательно z_1 и z_2 для перехода в данный узел из двух разных узлов соседнего слоя, выбранных с одинаковыми вероятностями, и для каждого узла последовательно разыгрываются новые числа z_1 и z_2 .

Параметры модели. Параметр укрупненной решетки a_0 и средняя величина межузельного барьера E_0 могут быть приняты, согласно данным работы [1], равными 0,737 нм и 0,83 эВ соответственно.

Напряженность внешнего электрического поля E полагается равной 10^6 В/м, что приводит к следующему значению энергии U :

$$U = 2eEa_0 = 2,36 \cdot 10^{-22} \text{ Дж} \approx 1,5 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}. \quad (8)$$

Энергия взаимодействия двухзарядных ионов кислорода ΔE в соседних слоях определяется в соответствии с соотношением

$$\Delta E = \frac{2e^2}{\epsilon\epsilon_0 a_0} = 7,87 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} \approx 5 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}, \quad (9)$$

где e – заряд электрона; ϵ_0 – электрическая постоянная, а диэлектрическая постоянная среды $\epsilon = 1000$ принята с учетом частичной экранировки ионов электронной подсистемой твердого электролита.

Моделируемая решетка содержит 128 слоев. Сама процедура моделирования состоит из 10^7 МКШ. При этом дополнительные первые $2 \cdot 10^4$ шагов отводятся для перехода системы в равновесное состояние (эквilibризация сис-

темы) и не учитываются при последующем усреднении результатов моделирования. После выполнения каждых 100 шагов производится перестройка решетки, заключающаяся в новой расстановке случайных межзельных барьеров в соответствии с выбранным распределением.

Результаты моделирования и их обсуждение. Рассмотрение «закрытой» системы, в которой невозможно движение мигрирующих частиц через границы, позволяет изучить равновесное распределение зарядов в электролите (рис. 2).

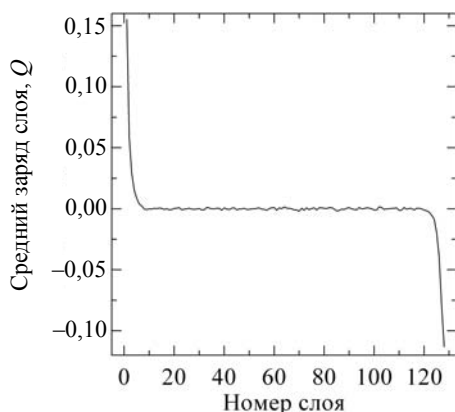


Рис. 2. Распределение заряда в модели при $\sigma = 0,12$ эВ и $T = 1000$ К

Анализ данного распределения показывает, что вблизи каждого из электродов образуется двойной электрический слой. Также можно отметить, что суммарный заряд такого двойного слоя и его ширина практически не зависят ни от температуры, ни от флуктуаций высот межзельных барьеров.

При пользовании в алгоритме моделирования периодических граничных условий появляется возможность определить суммарный заряд, проходящий через электрод за все время моделирования, т. е. фактически ток, протекающий через электролит.

На рис. 3 представлена зависимость от обратной температуры логарифма заряда, прошедшего через электроды, при различных значениях среднеквадратичного отклонения. Полученные зависимости являются практически линейными, так что углы наклона полученных прямых позволяют установить энергию активации электропроводности рассматриваемой модели.

Необходимо отметить, что для оптимизации временных затрат и повышения точности результатов моделирование при различных значениях параметра σ велось при разных значениях нормировочной константы P_0 или, что эквивалентно, при различных значениях средней величины межзельного барьера.

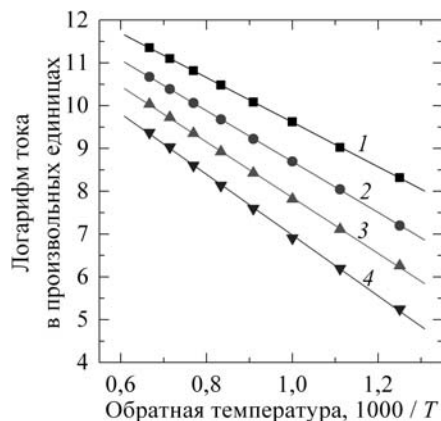


Рис. 3. Зависимость логарифма суммарного заряда, прошедшего через электрод, от обратной температуры для системы с $\sigma = 0,01$ эВ и $E_0 = 0,4$ эВ (линия 1), $\sigma = 0,06$ эВ и $E_0 = 0,5$ эВ (линия 2), $\sigma = 0,09$ эВ и $E_0 = 0,6$ эВ (линия 3), $\sigma = 0,11$ эВ и $E_0 = 0,7$ эВ (линия 4). Точками обозначены результаты моделирования, сплошными линиями – результаты линейной аппроксимации данных моделирования

На рис. 4 показана зависимость средней энергии активации от дисперсии σ . Представленные здесь данные приведены к единой системе, соответствующей средней величине межзельного барьера, равной 0,83 эВ. Это значение на рис. 4 показано пунктирной линией.

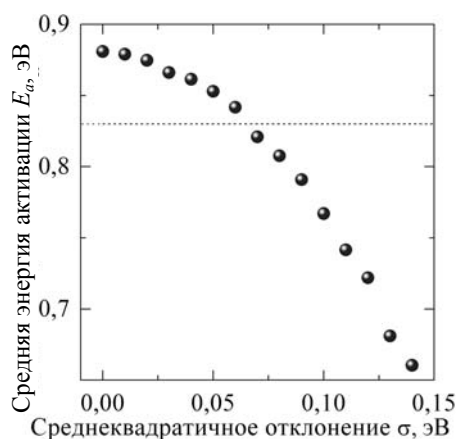


Рис. 4. Зависимость средней энергии активации от дисперсии

Заключение. Электростатическое взаимодействие приводит к незначительному (около 0,05 эВ при $\sigma = 0$) повышению энергии активации. Увеличение же дисперсии σ , напротив, вызывает снижение энергетического барьера. При $\sigma \approx 0,065$ эВ средняя энергия активации становится равной средней величине межзельного барьера.

Полученная зависимость энергии активации от параметра σ может быть объяснена тем, что при его увеличении возрастает число межзельных

барьеров с высотой, значительно меньшей средней. Тем самым у частиц появляется возможность мигрировать по системе, преодолевая

преимущественно относительно низкие энергетические барьеры, что и проявляется в снижении средней энергии активации.

Литература

1. Modak A. U., Lusk M. T. Kinetic Monte Carlo simulation of a solid-oxide fuel cell: I. Open-circuit voltage and double layer structure // *Solid State Ionics*. 2005. Vol. 176. P. 2181–2191.
2. Грода Я. Г. Квазиодномерная решеточная модель топливной ячейки // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 38–42.
3. Charge Distribution Around Nanoscale Nonhomogeneities in Solid State Ionics / G. S. Bokun [et al.] // *Nanomaterials: Applications and Properties*. 2015. Vol. 4, no. 1. Art. # 01PCSI07 (4 p.).
4. Uebing C., Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions // *The Journal of Chemical Physics*. 1991. Vol. 95, no. 10. P. 7626–7652.
5. Box G. E. P., Muller M. E. A note on the generation of random normal deviates // *The Annals of Mathematical Statistics*. 1958. Vol. 29. P. 610–611.

References

1. Modak A. U., Lusk M. T. Kinetic Monte Carlo simulation of a solid-oxide fuel cell: I. Open-circuit voltage and double layer structure. *Solid State Ionics*, 2005, vol. 176, pp. 2181–2191.
2. Groda Ya. G. Quasi-one-dimensional lattice model of a fuel cell. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 38–42 (In Russian).
3. Bokun G. S., Groda Ya. G., Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Charge distribution around nanoscale nonhomogeneities in solid state ionics. *Nanomaterials: Applications and Properties*, 2015, vol. 4, no. 1, art. # 01PCSI07 (4 p.).
4. Uebing C., Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. *The Journal of Chemical Physics*, 1991, vol. 95, no. 10, pp. 7626–7652.
5. Box G. E. P., Muller M. E. A note on the generation of random normal deviates. *The Annals of Mathematical Statistics*, 1958, vol. 29, pp. 610–611.

Информация об авторах

Грода Ярослав Геннадьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: groda@belstu.by

Вихренко Вячеслав Степанович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: vvikhre@belstu.by

Information about the authors

Groda Yaroslav Gennad'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Head of the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: groda@belstu.by

Vikhrenko Vyacheslav Stepanovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vvikhre@belstu.by

Поступила 10.03.2016

УДК 535.37+541.65+543.4

Н. Н. Крук, А. Б. Крылов

Белорусский государственный технологический университет

ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ В ДЕНДРИМЕРАХ С ПОРФИРИНОВЫМ ЯДРОМ

Изучен внутримолекулярный перенос энергии электронного возбуждения для семейства асимметричных дендримеров нулевого поколения с порфириновым ядром. Дендримерная оболочка с архитектурой АВВВ, ААВВ, АВ АВ и АААВ сформирована индолокарбазольными фрагментами, присоединенными к *мезо*-положениям тетрапиррольного макроцикла через фенильные спейсеры. Предложен новый метод определения эффективности переноса энергии, основанный на сравнении интенсивности флуоресценции акцептора, измеренной при возбуждении на двух длинах волн. Установлено, что в дендримерах происходит перенос энергии электронного возбуждения от индолокарбазольных фрагментов на Zn-порфирин. Показано, что эффективность переноса энергии существенно зависит от состояния лигандирования хелатированного иона Zn. Для переноса энергии на Zn-порфирин в нелигандированной форме эффективность переноса варьируется от 0,26 до 0,48, в то время как лигандирование порфиринового ядра молекулами тетрагидрофурана приводит к возрастанию эффективности переноса до 0,68–0,82, а в случае лигандирования молекулами диметилформамида – до 0,94–1,00. В последнем случае происходит практически полный перенос энергии электронного возбуждения индолокарбазольных дендронов на Zn-порфирин. Изменение эффективности переноса энергии предложено объяснить в рамках механизма Ферстера за счет варьирования интеграла перекрытия спектров флуоресценции донора и поглощения акцептора.

Ключевые слова: порфирин, дендример, перенос энергии, флуоресценция, аксиальное лигандирование.

M. M. Kruk, A. B. Krylov

Belarusian State Technological University

ENERGY TRANSFER IN DENDRIMERS WITH PORPHYRIN CORE

The intramolecular energy transfer for the family of zero generation asymmetric dendrimers with porphyrin core has been studied. Dendritic shell of АВВВ, ААВВ, АВ АВ и АААВ architecture is formed with indolocarbazole fragments which are attached to the *meso*-positions of porphyrin macrocycle via phenyl spacers. A new method of the energy transfer measurements was proposed, which is based on the comparison of the acceptor fluorescence intensities which were measured with excitation at two wavelengths. It was found, that the energy transfer takes place in dendrimers from indolocarbazole dendrons to the Zn-porphyrin core. It was shown, that energy transfer efficiency depends substantially on the ligation state of chelated Zn ion. For energy transfer to the nonligated Zn-porphyrin the energy transfer efficiency varies in range from 0.26 to 0.48, whereas the ligation of the porphyrin core with tetrahydrofuran molecules leads to increase in the transfer efficiency up to 0.68–0.82, and in case of ligation with dimethylformamide – up to 0.94–1.00. In the last case almost full energy transfer from indolocarbazole dendrons to the Zn-porphyrin takes place. Changes of the energy transfer efficiency are proposed to be due to the variations of the overlap integral of fluorescence spectra of donor and absorption spectra of acceptor in the framework of the Förster energy transfer mechanism.

Key words: porphyrin, dendrimer, energy transfer, fluorescence, axial ligation.

Введение. Структурная организация периферических заместителей в дендримерной оболочке способна влиять на реакционную способность и спектрально-люминесцентные характеристики ядра дендримера. Так, например, для дендримеров с порфириновым ядром и (индоло)карбазольными дендронами, которые

присоединялись к тетрапиррольному макроциклу в *мезо*-положениях, обнаружена существенная взаимосвязь архитектуры дендримерной оболочки и спектрально-люминесцентных характеристик порфиринового ядра [1–3]. Для дендримеров с порфириновым ядром, в которых дендроны присоединены к порфириновому ядру

через арильные мостики, было показано, что дендримерная оболочка не оказывает существенного стерического воздействия на хромофор. Когда дендримеры содержат порфириновое ядро в виде Zn^{2+} -комплекса, для них следовало ожидать взаимодействие с кислородом либо азотсодержащими основаниями Льюиса в качестве аксиальных лигандов для хелатированного иона металла. Установлено, что формирование дендримерной оболочки не препятствует лигандированию Zn^{2+} -порфирина, хотя и приводит к определенным изменениям в величине константы комплексообразования [4]. Известно, что порфириновый макроцикл является планарным в четырехкоординированной форме, в то время как в лигандированной пятикоординированной форме макроцикл претерпевает существенные неплоскостные искажения куполообразного типа. Изменение конформации макроцикла неизбежно должно повлечь за собой изменения во взаимодействии ядра с дендримерной оболочкой. Мы предположили, что это явление может быть использовано для управления переносом энергии между дендримерной оболочкой и порфириновым ядром.

Для установления закономерностей переноса энергии в дендримерах в зависимости от состояния лигандирования хелатированного иона металла в порфириновом макроцикле был синтезирован набор соединений, который включал дендримеры с архитектурой замещения порфиринового ядра по мезо-положениям типов АВВВ, ААВВ, АВАВ и АААВ, молекулярная структура которых показана на рис. 1, а также эталонное соединение 5,10,15,20-тетраметилпорфирин. В качестве дендронов в исследуемых соединениях использованы индокарбазольные фрагменты. Выбор данных молекул в качестве дендронов при синтезе дендримеров обусловлен тем, что индокарбазол обладает интенсивной флуоресценцией в спектральной области 400–450 нм. На рис. 2 приведены спектры поглощения и флуоресценции индокарбазола. Свободные основания порфиринов и их металлокомплексы обладают интенсивной полосой поглощения (полосой Soret) в этой же области, что обеспечивает выполнение необходимых условий для обменно-резонансного переноса энергии. Согласно механизму Ферстера, одним из ключевых факторов, определяющих эффективность переноса энергии, является величина интеграла перекрытия спектров флуоресценции донора и поглощения акцептора [5].

Цель настоящей работы заключается в изучении внутримолекулярного переноса энергии в порфирин-индокарбазольных дендримерах и исследовании возможности управления эф-

фективностью переноса энергии с помощью аксиального лигандирования металлопорфирина.

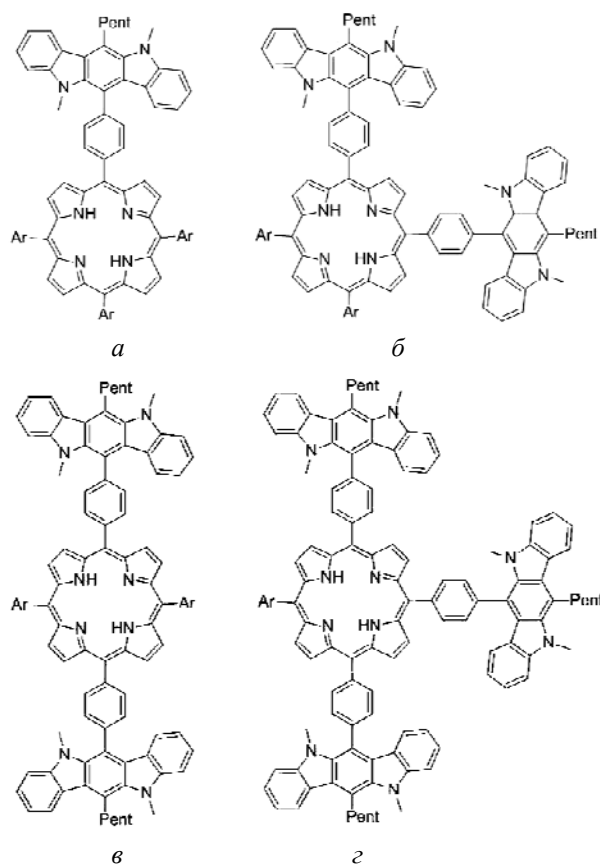


Рис. 1. Молекулярная структура порфирин-индокарбазольных дендримеров с архитектурой АВВВ (а), ААВВ (б), АВАВ (в) и АААВ (г). Ar – мезитил

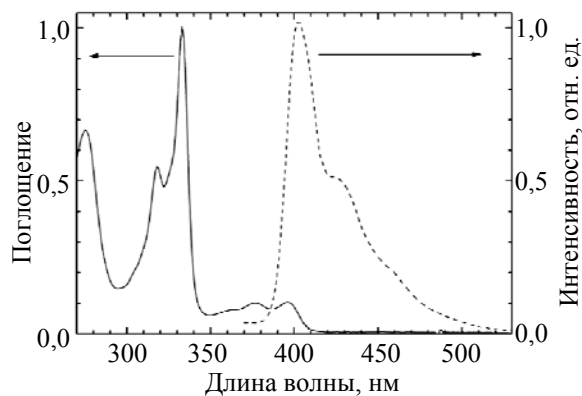


Рис. 2. Спектры поглощения и флуоресценции индокарбазола. Длина волны возбуждения флуоресценции 335 нм

Основная часть. Электронные спектры поглощения порфирин-индокарбазольных дендримеров определяются суммой спектров поглощения порфиринового ядра и дендронов. При переходе от исходного порфирина к дендримерам наблюдаются небольшие (<2 нм) сдвиги

ги полос поглощения порфиринового ядра, которые обусловлены перераспределением электронной плотности между макроциклом и периферическими заместителями из-за слабого увеличения электронодонорной способности последних (рис. 3). Такая спектральная картина характерна для супрамолекулярных систем со слабым взаимодействием между фрагментами, в результате чего сохраняется индивидуальность их электронной структуры.

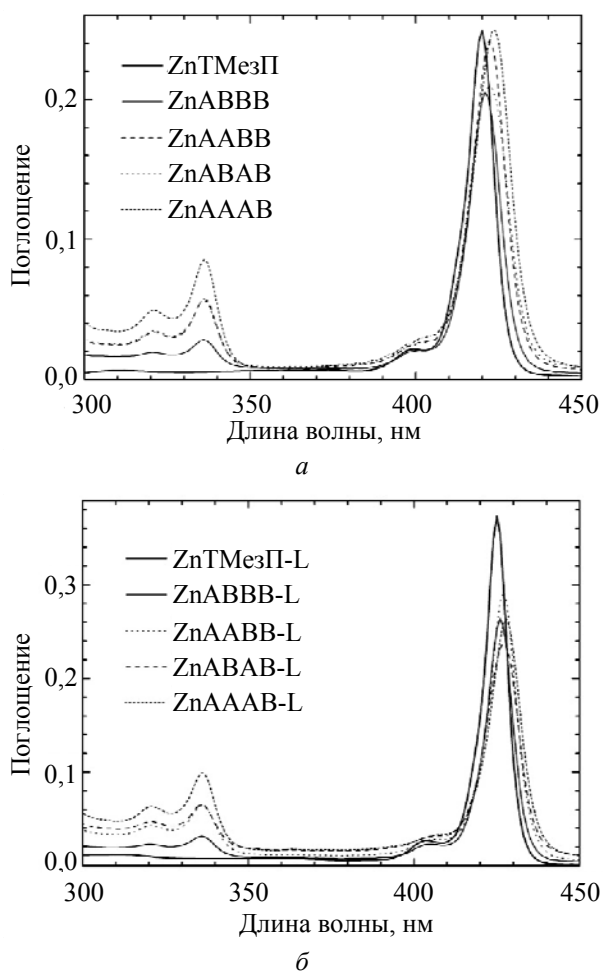


Рис. 3. Электронные спектры поглощения порфирин-индокарбазольных дендримеров с нелигандированным ядром (а) и при его лигандировании тетрагидрофураном (б). Растворитель – дихлорметан

Эффективность переноса энергии электронного возбуждения от молекулы донора D к молекуле акцептора A , как правило, определяют путем анализа либо уменьшения интенсивности люминесценции донора (интегральной по всему спектру или пиковой в максимумах полос), либо сокращения времени жизни люминесценции донора в присутствии молекул акцептора [5]. При обработке результатов, полученных методами стационарной люминесценции, величину эффективности переноса рассчитывают по уравнению

$$E = 1 - \frac{I_{DA}}{I_D}, \quad (1)$$

где I_{DA} и I_D – интенсивность люминесценции донора в присутствии и в отсутствии акцептора соответственно. Для корректного применения данного соотношения необходимо, чтобы спектры поглощения донора и акцептора энергии не перекрывались, а поглощение акцептора было умеренным, чтобы избежать искажения формы спектра люминесценции донора.

Однако встречаются ситуации, когда спектры поглощения донора и акцептора сильно перекрываются и невозможно найти область для фотовозбуждения только молекул донора. У молекул акцептора в этой же спектральной области также есть поглощение, которым при расчете эффективности переноса энергии пренебречь нельзя. Для дендримеров с порфириновым ядром и индокарбазольными дендронами имеет место именно такая ситуация: индокарбазольные фрагменты поглощают в ближней ультрафиолетовой области, где порфирины также обладают существенным поглощением (см. рис. 3). Анализ спектров флуоресценции индокарбазола и поглощения порфирина показывает, что энергия электронного возбуждения нижнего синглетного S_1 -состояния индокарбазола может переноситься на верхние возбужденные состояния (В-состояния) порфирина, причем В-полоса (полоса Core) порфирина обладает высоким коэффициентом экстинкции ($>10^5 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). Поэтому определение эффективности переноса энергии в исследуемых дендримерах представляет собой нетривиальную задачу.

Нами предложен новый способ измерения эффективности переноса энергии в таких молекулярных системах, основанный на измерении интенсивности флуоресценции акцептора I_A при фотовозбуждении дендримера в двух спектральных областях, причем в первой (ультрафиолетовой – УФ) области поглощает как акцептор (порфирин), так и донор (индокарбазол) с долями поглощенного света соответственно β_1 и β_2 , причем $\beta_1 + \beta_2 = \beta$. Во второй (видимой) области поглощает только акцептор (порфирин) с долей поглощенного света β_0 . Доля поглощенного света рассчитывается по формуле

$$\beta = 1 - 10^{-OD}, \quad (2)$$

где OD – оптическая плотность раствора на длине волны фотовозбуждения.

Эффективность переноса энергии с индокарбазольных дендронов на порфирин определим как

$$E = \frac{I_D}{I_{A1} - I_A}, \quad (3)$$

где I_D – интенсивность флуоресценции порфирина при возбуждении индолокарбазола в УФ-области; I_{A1} и I_A – интенсивность флуоресценции порфирина, если доля поглощенного им света равна β_2 и β_1 соответственно. С учетом равенств (4) и (5) уравнение (3) перепишем в виде (6):

$$\frac{I_{A1}}{\beta_2} = \frac{I_A}{\beta_1}, \quad (4)$$

$$I_D = I - I_A, \quad (5)$$

где I – экспериментально измеренная интенсивность флуоресценции порфирина при возбуждении в УФ-области:

$$E = \frac{I - I_A}{I_A(\beta_2 / \beta_1 - 1)}. \quad (6)$$

После того, как разделим числитель и знаменатель (6) на I_A и учтем равенство (7), получим (8):

$$\frac{I_A}{\beta_1} = \frac{I_Q}{\beta_Q} \Rightarrow I_A = I_Q \frac{\beta_1}{\beta_Q} = I_Q C, \quad (7)$$

$$E = \frac{I / I_Q C - 1}{\beta_2 / \beta_1 - 1}. \quad (8)$$

В уравнении (8) величины β_1 и β_2 заменим их значениями, выраженными через экспериментальные величины: $\beta_1 = \beta_Q C$, $\beta_2 = \beta - \beta_Q C$. Теперь можем записать окончательное выражение для эффективности переноса энергии (9), которое содержит только экспериментально измеряемые величины:

$$E = \frac{I / I_Q C - 1}{\beta / \beta_Q C - 2}. \quad (9)$$

Использование выражения (9) при анализе величины интегральной интенсивности флуоресценции Zn-порфирина, измеренной при фотовозбуждении порфириин-индолокарбазольных дендримеров на длинах волн 335 и 558 нм, позволило определить эффективность внутримолекулярного переноса энергии E . Полученные значения величины E представлены на рис. 4.

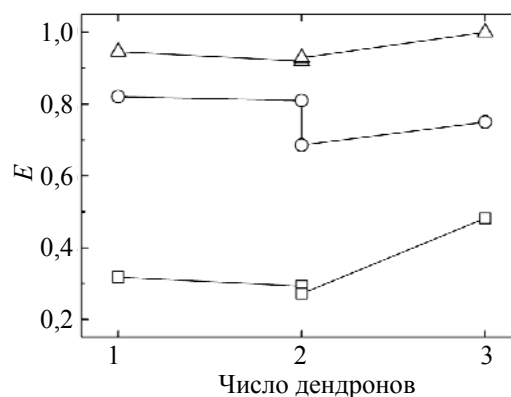


Рис. 4. Зависимость эффективности переноса энергии от числа индолокарбазольных дендронов:

□ – нелигандированная форма;
○ – L = тетрагидрофуран;
△ – L = диметилформамид

Анализ приведенных на рис. 4 зависимостей позволяет заключить, что аксиальное лигандирование способно существенно влиять на эффективность внутримолекулярного переноса энергии. Спектры поглощения акцептора при формировании лигандированной формы испытывают bathochromный сдвиг с одновременным увеличением коэффициента экстинкции. В результате, согласно механизму Ферстера для обменно-резонансного переноса энергии, величина обменного интеграла увеличивается благодаря росту перекрытия спектров флуоресценции донора и поглощения акцептора. Следует отметить, что эффективность переноса энергии слабо зависит от архитектуры дендримерной оболочки. Это значит, что взаимное расположение любого из дендронов и порфиринового ядра остается практически одинаковым при изменении дендримерной оболочки.

Заключение. Таким образом, полученные результаты показывают, что путем аксиального лигандирования хелатированного иона металла в порфириновом макроцикле можно изменять величину эффективности переноса энергии. Увеличение эффективности переноса в случае лигандированных дендримеров может быть объяснено в рамках механизма Ферстера для обменно-резонансного переноса энергии электронного возбуждения.

Литература

1. Meso-indolo[3,2-b]carbazolyl-substituted porphyrinoids: synthesis, characterization and effect of the number of indolocarbazole moieties on the photophysical properties / W. Maes [et al.] // Eur. Journal of Organic Chemistry. 2010. No. 13. P. 2576–2586.
2. Click reaction synthesis and photophysical studies of dendritic metalloporphyrins / N. T. Nguyen [et al.] // Eur. Journal of Organic Chemistry. 2014. No. 8. P. 1766–1777.
3. Porphyrin core dendrimers with ether-linked carbazole dendrons: dual luminescence of core and conformational flexibility of dendritic shell / N. T. Nguyen [et al.] // Macroheterocycles. 2014. Vol. 7, no. 3. P. 240–248.

4. Binding ability of Zn-tetraarylporphyrins with two, four and eight 4-(4-(3,6-bis(t-butyl)carbazole-9-phenyl)1,2,3-triazole end groups towards *N*-containing substrates of different nature / N. T. Nguyen [et al.] // *Supramolecular Chemistry*. 2013. Vol. 25, no. 2. P. 180–188.
5. Lakowicz J. R. *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. New York: Springer: LLC, 2006. 496 p.

References

1. Maes W., Ngo T. H., Rong G., Starukhin A. S., Kruk M. M., Dehaen W. Meso-indolo[3,2-b]carbazolyl-substituted porphyrinoids: synthesis, characterization and effect of the number of indolocarbazole moieties on the photophysical properties. *Eur. Journal of Organic Chemistry*, 2010, no. 13, pp. 2576–2586.
2. Nguyen N. T., Hofkens J., Scheblykin I. G., Kruk M., Dehaen W. Click reaction synthesis and photophysical studies of dendritic metalloporphyrins. *Eur. Journal of Organic Chemistry*, 2014, no. 8, pp. 1766–1777.
3. Nguyen N. T., Coutino-Gonzalez E., Hofkens J., Scheblykin I. G., Dehaen W., Kruk M. Porphyrin core dendrimers with ether-linked carbazole dendrons: dual luminescence of core and conformational flexibility of dendritic shell. *Macroheterocycles*, 2014, vol. 7, no. 3, pp. 240–248.
4. Nguyen N. T., Mamardashvili G. M., Gruzdev M., Mamardashvili N. Zh., Dehaen W. Binding ability of Zn-tetraarylporphyrins with two, four and eight 4-(4-(3,6-bis(t-butyl)carbazole-9-phenyl)1,2,3-triazole end groups towards *N*-containing substrates of different nature. *Supramolecular Chemistry*, 2013, vol. 25, no. 2, pp. 180–188.
5. Lakowicz J. R. *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. New York, Springer, LLC, 2006. 496 p.

Информация об авторах

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by

Крылов Андрей Борисович – кандидат биологических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: krylovab@belstu.by

Information about the authors

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by

Krylov Andrey Borisovich – PhD (Biology), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: krylovab@belstu.by

Поступила 05.03.2016

УДК 535.37+541.65

Д. В. Кленецкий, Н. Н. Крук

Белорусский государственный технологический университет

**ВЛИЯНИЕ ТРИПЛЕТНОГО СОСТОЯНИЯ
НА ИНТЕНСИВНОСТЬ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ КРАСИТЕЛЕЙ
ПРИ СТАЦИОНАРНОМ ФОТОВОЗБУЖДЕНИИ**

Составлена и решена система кинетических балансных уравнений, учитывающая излучательные процессы поглощения, флуоресценции, фосфоресценции и безызлучательные процессы интеркомбинационной и внутренней конверсии. Анализ системы уравнений показывает, что при фотовозбуждении красителя прямоугольными импульсами населенность первого возбужденного синглетного уровня энергии удовлетворяет неоднородному дифференциальному уравнению второго порядка с постоянными коэффициентами, которые зависят от констант скоростей рассматриваемых процессов. Из решения этого уравнения следует, что населенность первого возбужденного синглетного уровня энергии после включения фотовозбуждения резко возрастает, а затем быстро падает к стационарному значению, которое определяется константами скорости фотовозбуждения и процессов, вовлеченных в дезактивацию нижнего возбужденного синглетного состояния. В работе исследована также временная зависимость населенностей основного и триплетного состояний при различных значениях константы скорости фотовозбуждения. Установлена взаимосвязь стационарных значений интенсивности флуоресценции и квантового выхода в триплетное состояние, которая может быть использована для экспериментального определения квантового выхода интеркомбинационной конверсии в триплетное состояние.

Ключевые слова: флуоресценция, триплетное состояние, безызлучательные переходы, константа скорости, квантовый выход интеркомбинационной конверсии.

D. V. Klenitsky, M. M. Kruk

Belarusian State Technological University

**THE TRIPLET STATE INFLUENCE ON THE DYES FLUORESCENCE INTENSITY
UPON STEADY-STATE PHOTOEXCITATION**

The system of kinetic balance equations, which takes into account the radiative processes of absorption, fluorescence, phosphorescence, and radiationless processes of intersystem crossing and internal conversion, is compiled and solved. The analysis of the system of equations demonstrates that upon photoexcitation with rectangular pulses the population of the first excited singlet state satisfies to inhomogeneous differential equation of the second order with constant coefficients, which depend on the rate constants of considered processes. From the solution of this equation, it follows that the population of the first excited singlet state increases sharply after the photoexcitation and then falls down quickly to the steady-state value, which is determined by the rate constants of the photoexcitation and the rate constants of the processes involved in the deactivation of the lowest excited singlet state. In the work the time dependence of the population of the ground and the lowest triplet states is studied as a function of the photoexcitation rate constant. The relationship between the steady state values of the fluorescence intensity and the quantum yield of the triplet state formation, which can be used for the experimental determination of the quantum yield of the intersystem crossing to the triplet state.

Key words: fluorescence, triplet state, radiationless transitions, rate constant, quantum yield of intersystem crossing.

Введение. Для анализа динамики дезактивации энергии электронного возбуждения в органических молекулах необходимо определить константы скоростей внутримолекулярных переходов и квантовые выходы флуоресценции и интеркомбинационной конверсии. В то время как квантовый выход для излучательных процессов (флуоресценции либо фосфоресценции) определяется по простой методике с помощью стандартных приборов, измерение квантового выхода безызлучательной интеркомбинационной конверсии представляет собой достаточно

сложную задачу. К настоящему времени предложен ряд методов определения квантового выхода интеркомбинационной конверсии, каждый из которых имеет свои достоинства и ограничения [1]. Разработка новых доступных способов определения квантовых выходов безызлучательной интеркомбинационной конверсии является весьма актуальной задачей.

Процессы поглощения, флуоресценции и фосфоресценции в органических молекулах описываются схемой электронных уровней, представленных на рис. 1. Возможные перехо-

ды между уровнями показаны вертикальными стрелками: сплошными стрелками – излучательные (радиационные) переходы, штриховыми стрелками – безызлучательные переходы. Каждый из этих процессов характеризуется константой скорости (рис. 1).

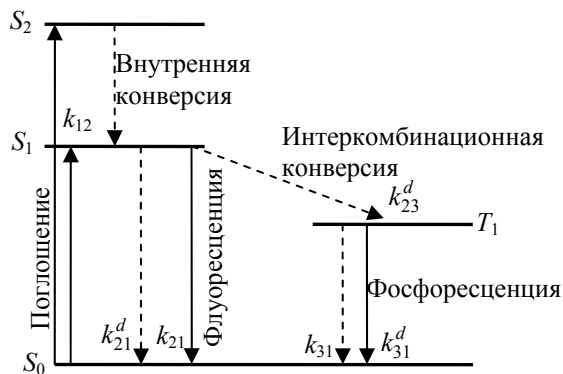


Рис. 1. Схема электронных состояний сложных органических молекул и переходов между ними

При поглощении фотона возбуждающего света молекула переходит из основного синглетного состояния \$S_0\$ в возбужденное состояние на более высокий энергетический уровень той же мультиплетности. С высших уровней \$S_n\$ (\$n > 1\$) вследствие внутренней конверсии (переходов между состояниями с одинаковой мультиплетностью) молекула очень быстро переходит на первый возбужденный уровень \$S_1\$, откуда она может перейти в основное состояние \$S_0\$ либо без испускания фотона (безызлучательно), либо с испусканием фотона флуоресценции. В результате интеркомбинационной конверсии (переходов между состояниями с разной мультиплетностью) молекула может также перейти в возбужденное триплетное состояние \$T_1\$, откуда возможен безызлучательный переход в основное синглетное состояние или с испусканием фотона фосфоресценции.

Константа скорости интеркомбинационной конверсии \$k_{23}^d\$ у большинства люминесцирующих органических молекул сравнима по величине с константами флуоресценции \$k_{21}\$ и безызлучательного перехода \$k_{21}^d\$, так что обычно заметная доля поглотивших свет молекул находится в триплетном состоянии. Константа скорости \$k_{31}\$ фосфоресценции оказывается много меньше константы скорости \$k_{21}\$ для флуоресценции. Фосфоресценция конкурирует с безызлучательной дезактивацией триплетного состояния в основное. Константа скорости фотовозбуждения молекул \$k_{12}\$ зависит от плотности потока фотонов возбуждающего излучения и сечения поглощения, определяющего вероятность перехода молекул из основного синглетного состояния \$S_0\$ в первое возбужденное со-

стояние \$S_1\$ под действием потока фотонов [2]. В случае возбуждающего импульса света с резким фронтом нарастания и спада плотность потока фотонов является постоянной величиной. Поэтому можно считать, что возбуждение происходит прямоугольными импульсами с длительностью импульса \$\tau_{имп}\$. В этом случае константа скорости фотовозбуждения также не зависит от времени, т. е. \$k_{12} \approx const\$.

В работах [3, 4] было показано, что при возбуждении растворов красителей световыми импульсами с длительностью, превышающей время жизни триплетного состояния красителя, интенсивность его флуоресценции испытывает релаксацию и при достаточно больших временах стремится к некоторой постоянной величине. Данный процесс является переходным и обусловлен установлением равновесия между населенностями электронных состояний, вовлеченных в процессы дезактивации энергии электронного возбуждения, при стационарном фотовозбуждении. В данной работе изучается влияние триплетного состояния на закон затухания флуоресценции, когда длительность импульса возбуждающего излучения во много раз превосходит время жизни синглетного и триплетного состояний: \$\tau_{имп} \gg \tau_{сингл}\$ и \$\tau_{имп} \gg \tau_T\$.

Основная часть. Введем в рассмотрение переменные, которые определяют долю молекул в состояниях \$S_0, S_1, T_1\$ от их общего количества:

$$x(t) = \frac{N_1(t)}{N_0}, y(t) = \frac{N_2(t)}{N_0}, z(t) = \frac{N_3(t)}{N_0}, \quad (1)$$

где \$N_1, N_2, N_3\$ – концентрации молекул в момент времени \$t\$ на уровнях энергии \$S_0, S_1, T_1\$ соответственно; \$N_0\$ – концентрация молекул.

Пренебрегая процессами переноса энергии между молекулами, переменные \$x(t), y(t), z(t)\$ характеризуются системой кинетических балансных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -k_{12}x + k_2y + k_3z, \\ \frac{dy}{dt} = k_{12}x - (k_2 + k_{23}^d)y, \\ \frac{dz}{dt} = k_{23}^d y - k_3z, \end{cases} \quad (2)$$

где \$k_2 = k_{21} + k_{21}^d\$, \$k_3 = k_{31} + k_{31}^d\$. Положительные слагаемые в этих уравнениях определяют скорость поступления молекул на данный уровень энергии, а отрицательные слагаемые – скорость ухода молекул с уровня.

Предполагая, что в начальный момент времени все молекулы находятся в основном

состоянии, начальные условия для системы (2) имеют вид

$$x(0) = 1, y(0) = z(0) = 0. \quad (3)$$

Кроме того, в любой момент времени переменные x, y, z должны удовлетворять уравнению, отражающему закон сохранения частиц:

$$x(t) + y(t) + z(t) = 1. \quad (4)$$

Моделируя фотовозбуждение прямоугольными импульсами, из системы линейных дифференциальных уравнений (2) с учетом закона сохранения частиц (4) следует, что переменная y , определяющая населенность N_2 первого возбужденного уровня S_1 , удовлетворяет неоднородному уравнению второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + a \frac{dy}{dt} + by = c, \quad (5)$$

где y удовлетворяет начальным условиям $y(0) = 0, y'(0) = k_{12}$, а коэффициенты вычисляются по следующим соотношениям:

$$a = k_{12} + k_2 + k_3 + k_{23}^d, \quad (6)$$

$$b = k_{12}(k_3 + k_{23}^d) + k_3(k_2 + k_{23}^d), \quad c = k_{12}k_3. \quad (7)$$

Общее решение уравнения (5) имеет вид

$$y = C_1 e^{-\alpha_1 t} + C_2 e^{-\alpha_2 t} + y_0, \quad (8)$$

где α_1, α_2 и постоянные интегрирования C_1, C_2 сложно зависят от коэффициентов a, b, c .

Стационарное значение y_0 в (8) связано с константами скоростей соотношением

$$y_0 = \frac{c}{b} = \frac{k_{12}k_3}{k_{12}(k_3 + k_{23}^d) + k_3(k_2 + k_{23}^d)}. \quad (9)$$

Подставляя формулу (8) во второе уравнение системы (2), найдем зависимость переменной x от времени:

$$x = A_1 e^{-\alpha_1 t} + A_2 e^{-\alpha_2 t} + x_0, \quad (10)$$

где постоянные значения A_1, A_2, x_0 связаны с $\alpha_1, \alpha_2, C_1, C_2$.

Долю молекул в триплетном состоянии можно найти из (4) с учетом (8), (10).

На рис. 2–4 показаны зависимости населенностей основного, триплетного и первого возбужденного состояний от времени, нормированные на общее число частиц в системе. Параметры, при которых выполнялись вычисления, взяты из работы [5]: $k_2 = 10^8 \text{ с}^{-1}$, $k_3 = 10^3 \text{ с}^{-1}$, $k_{23}^d = 9 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$. Номера линий соответствуют следующим значениям константы скорости фотовозбуждения: 1 – $k_{12} = 250 \text{ с}^{-1}$; 2 –

$k_{12} = 500 \text{ с}^{-1}$; 3 – $k_{12} = 750 \text{ с}^{-1}$; 4 – $k_{12} = 1000 \text{ с}^{-1}$; 5 – $k_{12} = 1250 \text{ с}^{-1}$.

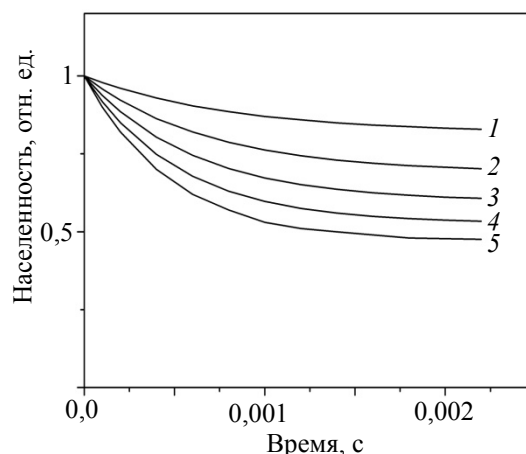


Рис. 2. Зависимость населенности основного состояния от времени при различных значениях константы скорости фотовозбуждения

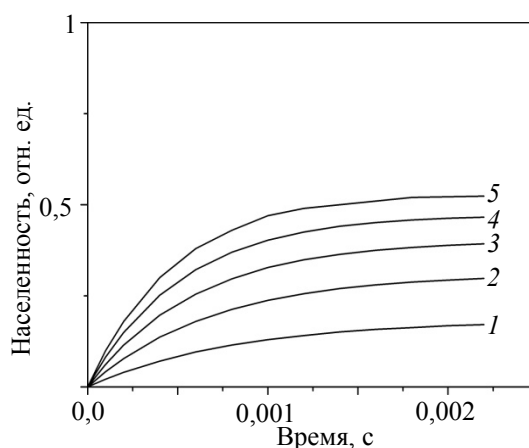


Рис. 3. Зависимость населенности триплетного состояния от времени при различных значениях константы скорости фотовозбуждения

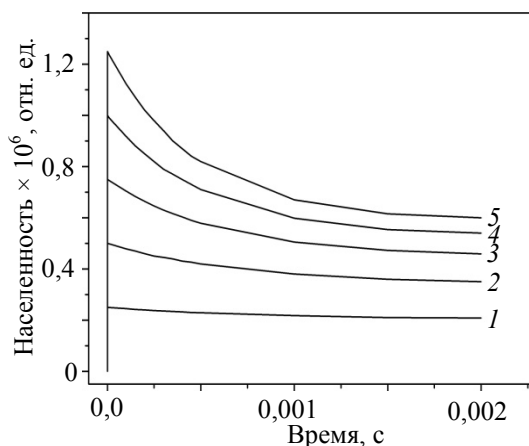


Рис. 4. Зависимость населенности первого возбужденного состояния от времени при различных значениях константы скорости фотовозбуждения

Число молекул в основном состоянии сразу после включения фотовозбуждения уменьшается, стремясь к некоторому постоянному значению. Доля молекул в триплетном состоянии увеличивается, также стремясь к некоторому постоянному значению. Причем при $k_{12} = 1250 \text{ с}^{-1}$ число молекул в триплетном состоянии оказывается больше, чем в основном состоянии. Населенность первого возбужденного состояния после включения фотовозбуждения резко возрастает, а затем относительно быстро спадает к стационарному значению.

Интенсивность флуоресценции прямо пропорциональна населенности первого возбужденного состояния, т. е. $I_{\text{фл}} \sim k_{21}N_2 = k_{21}yN_0$. Поэтому зависимость интенсивности флуоресценции от времени имеет характер, подобный зависимости населенности первого возбужденного состояния от времени. Принимая во внимание (9), стационарные значения интенсивности флуоресценции определяются соотношением

$$I_{\text{фл}} = \frac{k_{12}\Phi_{\text{фл}}}{k_{12}(\tau_{\text{T}}\Phi_{\text{T}} + \tau_{\text{фл}}) + 1}, \quad (11)$$

где $\Phi_{\text{фл}}$, Φ_{T} – квантовые выходы флуоресценции и в триплетное состояние; $\tau_{\text{фл}}$, τ_{T} – времена жизни флуоресценции и триплетного состояния, рассчитываемые по формулам

$$\Phi_{\text{фл}} = \frac{k_{21}}{k_2 + k_{23}^d}, \quad \Phi_{\text{T}} = \frac{k_{23}^d}{k_3 + k_{23}^d}. \quad (12)$$

$$\tau_{\text{фл}} = \frac{1}{k_2 + k_{23}^d}, \quad \tau_{\text{T}} = \frac{1}{k_3}. \quad (13)$$

Соотношение (11) может быть использовано для определения квантового выхода в триплет Φ_{T} на эксперименте. На рис. 5 показана

зависимость $I_{\text{фл}}$ от константы скорости фотовозбуждения k_{12} для двух случаев, когда квантовый выход в триплет равен нулю $\Phi_{\text{T}} = 0$ (линия 1) и когда квантовый выход близок к единице $\Phi_{\text{T}} \approx 1$ (линия 2).

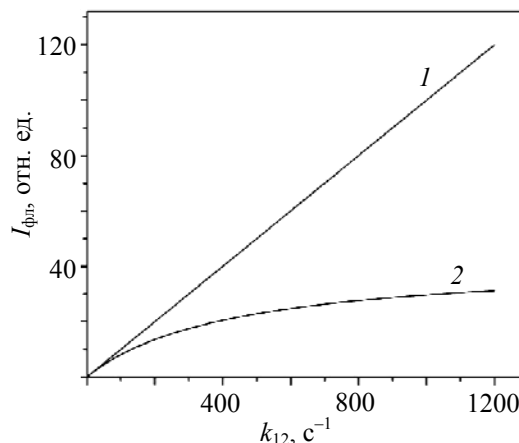


Рис. 5. Зависимость стационарного значения интенсивности флуоресценции $I_{\text{фл}}$ от константы скорости фотовозбуждения k_{12}

В первом случае, принимая во внимание, что при данных параметрах $k_{12}\tau_{\text{фл}} \ll 1$, имеет место линейная зависимость. Тангенс угла наклона численно равен квантовому выходу флуоресценции. Во втором случае, так как $k_{12}\tau_{\text{T}}\Phi_{\text{T}} \sim 1$, наблюдается отклонение от прямолинейной зависимости. Причем чем больше квантовый выход в триплет, тем это отклонение больше.

Закключение. Изучено влияние плотности потока возбуждающих фотонов на населенность основного, первого возбужденного и триплетного состояний. Установлена взаимосвязь стационарного значения интенсивности флуоресценции с квантовым выходом интеркомбинационной конверсии в триплетное состояние.

Литература

1. Крук Н. Н. Методы определения квантового выхода образования триплетного состояния тетрапиррольных молекул // Успехи химии порфиринов. В 5 т. Т. 5. СПб.: НИИ химии СПбГУ, 2007. С. 236–249.
2. Фадеев В. В. Нелинейная флуориметрия как метод диагностики природных органических комплексов // Вестник Московского университета. Сер. 3. Физика. Астрономия. 1998. № 4. С. 49–57.
3. Avarmaa R. Fluorescence detection study of molecular triplet states in chlorophyll and related compounds // Molecular Physics: An International Journal at the Interface Between Chemistry and Physics. 1979. Vol. 37, issue 2. P. 441–454.
4. Fluorescence-detected triplet kinetics study of the specifically solvated chlorophyll and protochlorophyll in frozen solutions / R. Avarmaa [et al.] // Spectrochimica Acta. Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy Section. 1987. Vol. 43, no. 4. P. 507–514.
5. Влияние нижнего триплетного состояния на кинетику уменьшения и восстановления интенсивности флуоресценции фотостойких органических флуорофоров / И. В. Станишевский [и др.] // ЖПС. 2013. Т. 80, № 3. С. 368–372.

References

1. Kruk M. M. Methods of the determination of the quantum yield of the triplet state formation of tetrapyrrolic molecules. *Uspekhi khimii porfirinov. V 5 tomakh. Tom 5* [Advances in Porphyrin chemistry, In 5 vol. Vol. 5]. St. Petersburg, NII khimii SPGU Publ., 2007. pp. 236–249 (In Russian).

2. Fadeev V. V. Nonlinear fluorimetry as a method of diagnostics of natural organic complexes. *Vestnik Moskovskogo universiteta* [Bulletin of the Moscow State University], series 3, Physics. Astronomy, 1988, no. 4, pp. 49–57 (In Russian).

3. Avarmaa R. Fluorescence detection study of molecular triplet states in chlorophyll and related compounds. *Molecular Physics: An International Journal at the Interface Between Chemistry and Physics*, 1979, vol. 37, issue 2, pp. 441–454.

4. Avarmaa R., Mairing K., Renge I., Sary P. Fluorescence-detected triplet kinetics study of the specifically solvated chlorophyll and protochlorophyll in frozen solutions. *Spectrochimica Acta. Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy Section*, 1987, vol. 43, no. 4, pp. 507–514.

5. Stanishevskiy I. V., Solov'yev K. N., Arabey S. M., Chernyavskiy V. A. The effect of the lower triplet state on the kinetics of the reduction and the recovery of fluorescence intensity photostability of organic fluorophores. *ZhPS [JAS (Journal of Applied Spectroscopy)]*, 2013, vol. 80, no. 3, pp. 368–372 (In Russian).

Информация об авторах

Кленицкий Дмитрий Викентьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: klen@belstu.by

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by

Information about the authors

Klenitsky Dmitry Vikentievich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: klen@belstu.by

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by

Поступила 02.03.2016

УДК 531.19; 538.911

И. И. Наркевич¹, Н. Т. Квасов², Е. Ю. Козич¹¹Белорусский государственный технологический университет²Белорусский государственный университет**ДВУХУРОВНЕВОЕ МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ
СТРУКТУРЫ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ОДНОРОДНЫХ МАКРОСКОПИЧЕСКИХ СИСТЕМ
И СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ**

В работе используется двухуровневый молекулярно-статистический подход к описанию равновесных свойств однородных и неоднородных систем. Он базируется на совместном использовании метода коррелятивных функций Боголюбова (ББГКИ), метода условных распределений Ротта и метода термодинамических потенциалов, которые в случае неоднородных систем являются функционалами поля плотности среды. При последовательной реализации двухуровневого подхода получены приближенные аналитические выражения для среднего одночастичного потенциала взаимодействия выделенной молекулы конденсированной среды с остальными молекулами, статистически распределенными по ячейкам, центры которых образуют соответствующую кристаллическую решетку – регулярную для однородных и нерегулярную для неоднородных макроскопических систем и систем из малого числа атомов или молекул (кластеров), представителями которых являются наночастицы. Эти потенциалы используются в качестве удобных аппроксимационных выражений для потенциалов средних сил двухуровневого подхода. В результате рассчитаны одночастичные функции распределения молекул в однородном макроскопическом кристалле с гранецентрированной решеткой и в наночастице из 13 молекул в форме икосаэдра.

Ключевые слова: двухуровневый молекулярно-статистический подход, коррелятивные функции, потенциал средних сил, неоднородная система, наночастица, температура плавления.

I. I. Narkevich¹, N. T. Kvasov², E. Yu. Kozich¹¹Belarusian State Technological University²Belarusian State University**TWO-LEVEL MOLECULAR-STATISTICAL DESCRIPTION
OF THE STRUCTURE AND THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS
OF HOMOGENEOUS MACROSCOPIC SYSTEMS
AND SPHERICAL NANOPARTICLES**

A two-level molecular-statistical approach to the description of equilibrium properties of homogeneous and heterogeneous systems is used. It is based on the joint application of Bogolyubov's method of correlative functions (BBGKI), Rott's method of conditional distributions and the method of thermodynamic potentials, which are functionals of the field density of the medium in the case of inhomogeneous systems. With the consistent implementation of the two-level approach, approximate analytical expressions for the average single-particle interaction potential of the selected molecule of condensed matter with other molecules statistically distributed in cells, whose centers form a corresponding lattice – a regular one for homogeneous and irregular for nonuniform macroscopic systems and systems of a small number of atoms or molecules (clusters), examples of which are the nanoparticles. These potentials are used as convenient approximate expressions for the potentials of average forces of the two-level approach. As a result the single-particle distribution functions of molecules of the homogeneous macroscopic crystal with a face-centered lattice and the icosahedron nanoparticle of 13 molecules were calculated.

Key words: two-level molecular-statistical approach, correlation function, mean force potential, inhomogeneous system, nanoparticle, melting point.

Введение. Двухуровневый молекулярно-статистический подход [1] к описанию равновесных свойств термодинамических систем базируется на совместном применении метода Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда (ББГКИ), метода условных распределений Ротта [2] и метода термодинамических потенциалов плотности. В этом подходе используются потенциалы

средних сил [1–4], которые в случае неоднородных систем являются функционалами от искомых полей средней плотности [1]. Они определяют одночастичные, двухчастичные и т. д. условные функции распределения частиц (атомов или молекул) в окрестности узлов элементарных ячеек (рис. 1), на которые разбивается весь объем V системы. Искомые потенциалы

удовлетворяют достаточно сложной системе интегральных уравнений, решение которой требует выполнения большого объема численных расчетов. Отсутствие аналитического выражения для этих потенциалов создает непреодолимые трудности для последующего их использования при решении соответствующих вариационных задач [1, 4] по определению, например, профилей плотности на границе раздела двух однородных сосуществующих фаз или наночастиц с неоднородным распределением плотности на их границе. Для решения этой проблемы в данной работе будут получены аппроксимационные формулы для искоемых потенциалов средних сил.

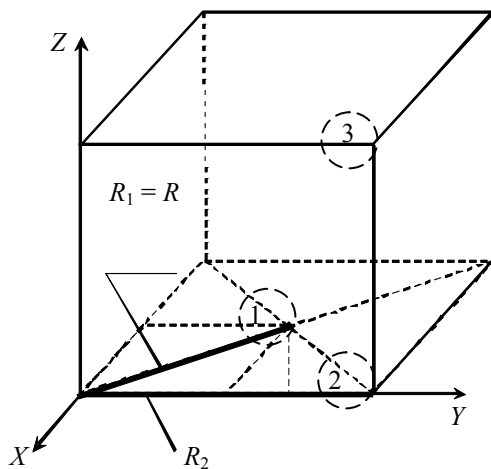


Рис. 1. Элементарная ячейка гранецентрированной кубической решетки

Основная часть. Аналитические преобразования и последующие численные расчеты будем проводить для систем в кристаллическом состоянии. В этом случае нормированную на единицу унарную функцию $\hat{F}_{11}(x, y, z)$ в F_{11} -приближении метода условных распределений, которая имеет резкие пики в окрестности узлов, заменим на вспомогательную функцию \hat{F}_{11}^* с равномерным распределением молекул внутри сфер с радиусами b_i , центры которых совпадают с узлами решетки ($i = 1, 2, \dots, M$). Параметры b_i подбираем так, чтобы среднеквадратичные отклонения σ_i молекул от узлов решетки были равными для функций \hat{F}_{11} и \hat{F}_{11}^* :

$$\sigma_i = \int_{\omega_i} r^2 \hat{F}_{11}(x, y, z) d\omega_i = \sqrt{\frac{3}{5}} b_i, \quad (1)$$

$$\text{где } \hat{F}_{11}(\vec{q}_i) = A_i \exp \left\{ -\beta \sum_{j \neq i}^M \phi_{ij}(\vec{p}_i) \right\}.$$

Здесь A_i – нормирующий множитель для функции $\hat{F}_{11}(\vec{q}_i)$; $\beta = 1/\theta$ – обратная температура; $\theta = kT$; \vec{p}_i – радиус-вектор молекулы в ячейке ω_i

по отношению к системе координат, начало которой совмещено с узлом ячейки ω_j , а суммирование проводится по всем узлам решетки.

Для короткодействующих потенциалов можно ограничиться суммированием по узлам, принадлежащим нескольким ближайшим координационным сферам по отношению к центру ячейки ω_i . Введенная функция \hat{F}_{11}^* позволяет аналитически выполнить усреднение потенциала Леннарда – Джонса с параметрами σ и ϵ , который запишем в безразмерных переменных ($r^* = r/\sigma$ и $\Phi^*(r) = \Phi(r)/\epsilon$, далее звездочки опускаем):

$$\Phi(r) = 4(r^{-12} - r^{-6}). \quad (2)$$

Средний потенциал $\phi(\rho)$ находим путем усреднения (2) с учетом корреляции в расположении двух молекул внутри своих сфер радиусами b и β . Поэтому при усреднении учитывается, что они не могут находиться на расстояниях меньше, чем d (d – параметр обрезания, который в дальнейших расчетах принимается равным 0,9).

Для потенциала $\phi(\rho, b, d)$ получим:

$$\phi(\rho) = n_{ij} \frac{\int_{V_b} \Phi(r) E(r-d) dV_b}{\int_{V_b} E(r-d) dV_b} = n_{ij} \frac{I(r, b, d)|_{r_1}^{\rho}}{V(r, b, d)|_{r_1}^{\rho}}. \quad (3)$$

Здесь n_{ij} – двухъячеечные числа заполнения ячеек с номерами i и j ; $E(r-d)$ – единичная ступенчатая функция Хевисайда:

$$E(r-d) = \begin{cases} 0 & \text{при } r \leq d, \\ 1 & \text{при } r > d. \end{cases} \quad (4)$$

После вычисления в сферической системе определенных интегралов в (3) по углу φ (от нуля до π) и углу θ (от нуля до θ_{\max}), а также неопределенного интеграла по r находим:

$$I(r, b, d) = 8\pi \left[\frac{1}{r^{10}} \left(\frac{\rho^2 - b^2}{20\rho} - \frac{r}{9} + \frac{r^2}{16\rho} \right) - \frac{1}{r^4} \left(\frac{\rho^2 - b^2}{8\rho} - \frac{r}{3} + \frac{r^2}{4\rho} \right) \right], \quad (5)$$

$$V(r, b, d) = -2\pi \left[\frac{r^2(\rho^2 - b^2)}{4\rho} - \frac{r^3}{3} + \frac{r^4}{8\rho} \right]. \quad (6)$$

После подстановки пределов r_1 и r_2 по координате r , которые зависят от соотношения между расстоянием ρ и параметрами b и d , получим аналитические выражения для среднего потенциала:

$$\varphi^*(\rho, b, d) = \frac{\Phi(\rho, b, d)}{n_{ij}}$$

$$= \begin{cases} \frac{I(\rho+b, b, d) - I(\rho-b, b, d)}{4\pi b^3 / 3} & \text{при } \rho \geq b+d; \\ \frac{I(\rho+b, b, d) - I(d, b, d)}{V(\rho+b, b, d) - V(d, b, d)} & \text{при } d-b < \rho < b+d; \\ \Phi(\rho+b) & \text{при } \rho \leq d-b. \end{cases} \quad (7)$$

1. Изучение микроструктуры и расчет средней энергии однородного молекулярного кристалла с гранцентрированной кубической (ГЦК) решеткой. При изучении распределения молекул вблизи узлов ГЦК решетки в сильно сжатом однородном кристалле концентрация вакансий $c_i = 1 - n_i \sim 10^{-3}$, поэтому можно принять, что $n_{ij} \approx n_i n_j \approx 1$ и рассчитать среднеквадратичное отклонение σ_0 для молекулы в некоторой его ячейке объемом ω_0 , рассматривая ее как центральную ячейку, центр которой находится в начале используемой системы координат (рис. 1). Для этого нужно решить уравнение (1), которое перепишем с учетом взаимодействия молекулы в центральной ячейке ω_0 только с двенадцатью первыми и шестью вторыми ближайшими соседями:

$$A_0 \int_{\omega_0} r^2 \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{i=1}^{18} \varphi_{0i}^*(\rho_i, b_0, d)\right\} d\omega_0 = \sqrt{\frac{3}{5}} b_0. \quad (8)$$

Наличие аналитических выражений для среднего потенциала позволяет рассчитать с учетом корреляции среднюю энергию двух молекул, распределенных внутри сфер с радиусами b и β (R – расстояние между их центрами):

$$E^*(R, b, \beta) = \frac{\int_{R-\beta}^{R+\beta} \left(\rho^2 - \frac{\rho^3}{2R} - \frac{(R^2 - b^2)\rho}{2R} \right) \varphi^*(\rho) d\rho}{\int_{R-\beta}^{R+\beta} \left(\rho^2 - \frac{\rho^3}{2R} - \frac{(R^2 - b^2)\rho}{2R} \right) V(\rho) d\rho}. \quad (9)$$

С учетом (9) запишем выражение для средней энергии кристалла, отнесенной к одному узлу решетки, которая согласно (8) зависит от температуры θ :

$$E^*(R, b_0, \theta) = \frac{1}{2} [12E(R_1, b_0) + 6E(R_2, b_0)]. \quad (10)$$

Здесь $b = \beta = b_0$, $R_1 = R$ и R_2 – расстояния между центральным узлом и узлами первой и второй координационных сфер.

Результаты численного решения системы (8) и последующего расчета средней энергии приведены в табл. 1.

Таблица 1

Среднеквадратичное отклонение σ_0 и энергия E_0^* при разных значениях параметра R решетки и температуры θ

R	$\theta = 0$		$\theta = 0,9$		
	σ_0	E_0^*	σ_0	b_0	E_0^*
1,0	0	-1,264	0,041	0,053	-2,046
1,1	0	-6,687	0,076	0,098	-5,587
1,2	0	-5,826	0,136	0,176	-4,805

В качестве примера на рис. 2 изображены профили нормированной унарной функции $\hat{F}_{11}(x, y, z)$, определяющей распределение молекулы вблизи центрального узла решетки. Из рис. 2 видно, что функция распределения \hat{F}_{11} в центральной ячейке симметрична по отношению к осям x, y, z (рис. 1), причем ее профиль при $x=y=z$ значительно уже, чем для $\hat{F}_{11}(x)$, $\hat{F}_{11}(y)$ и $\hat{F}_{11}(z)$.

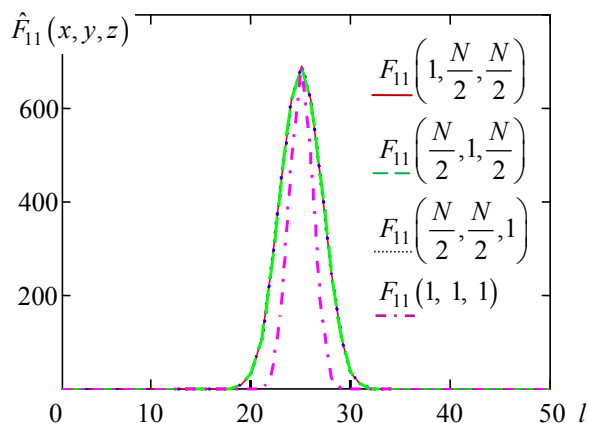


Рис. 2. Профили сечений для функции $\hat{F}_{11}(x, y, z)$ в центральной ячейке ω_0 (N – число точек на осях x, y, z при интегрировании по объему ω_0 , $\theta = 0,9$; $R = 1,1$; $N = 50$; $b_0 = 0,098$)

2. Расчет энергии и функций распределения молекул в кристаллических наночастицах на примере икосаэдра. Для исследования характеристик наночастиц будем использовать полученные выше уравнения и формулы, приняв во внимание тот факт, что в этом случае параметры функций распределения зависят от положения узлов в решетке наночастицы. Для наночастицы из 13 молекул в форме икосаэдра полагаем $n_{ij} \approx n_i n_j = 1$ и рассчитываем среднеквадратичное отклонение σ_0 для молекулы в его центральной ячейке ω_0 и аналогичное отклонение σ_1 для молекул, распределенных в двенадцати ячейках ω_i ($i = 1, 2, \dots, 12$), центры которых находятся на расстоянии R от

центра икосаэдра. Для получения средних потенциалов $\varphi^*(\rho, b, d) = \varphi(\rho, b, d) / n_{ij}$ нужно решить следующую систему двух уравнений:

$$\begin{cases} A_0 \int_{\omega_0} r^2 \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{i=1}^{12} \varphi_{0i}^*(\rho_i, b_1, d)\right\} d\omega_0 = \sqrt{\frac{3}{5}} b_0, \\ A_1 r^2 \int_{\omega_1} r^2 F_{11}(\bar{q}_1) d\omega_1 = \sqrt{\frac{3}{5}} b_1, \end{cases} \quad (11)$$

где

$$F_{11}(\bar{q}_1) = \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \left[\varphi_{10}^*(\rho_0, b_0, d) + \sum_{i=2}^{12} \varphi_{1i}^*(\rho_i, b_1, d) \right]\right\}.$$

По формуле (9) рассчитана средняя энергия двух молекул, распределенных внутри любых двух сфер икосаэдра с радиусами β и b (рис. 3) и получено выражение для средней энергии икосаэдра с параметрами R, a, b_0, b_1 (a – длина ребра икосаэдра):

$$E^*(R, b_0, b_1, \theta) = 6[E(R, b_0, b_1) + \sum_{i=2}^{12} E(R_i, b_1, b_1) + E(R_0, b_1, b_0)]. \quad (12)$$

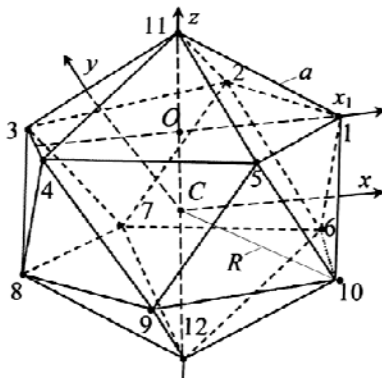


Рис. 3. Икосаэдр

Результаты численных расчетов приведены в табл. 2.

Таблица 2

Среднеквадратичные отклонения σ_0, σ_1 и энергия E^* икосаэдра для разных значений его радиуса R и температуры θ

R	$\theta = 0$			$\theta = 0,3$			$\theta = 0,5$
	σ_0	σ_1	E^*	σ_0	σ_1	E^*	
1,00	0	0	-28,1	Решения не найдены			Решения не найдены
1,05	0	0	-42,6	Решения не найдены			
1,10	0	0	-43,9	0,042	0,131	-31,2	
1,12	0	0	-42,8	0,047	0,120	-32,3	
1,15	0	0	-40,2	0,056	0,124	-34,4	
1,20	0	0	-34,9	0,076	0,149	-29,6	

На рис. 4 и 5 изображены профили нормированной унарной функции $\hat{F}_{11}(x, y, z)$, опре-

деляющей распределение молекулы вблизи узла в центральной ячейке ω_0 (рис. 4), и аналогичной функции для молекулы, распределенной вблизи вершины 1 икосаэдра с координатами x_1, y_1, z_1 (рис. 5), которая является одной из 12 симметрично расположенных его вершин.

Из рис. 4 видно, что функция распределения \hat{F}_{11} в центральной ячейке ω_0 симметрична по отношению к осям x, y, z (рис. 3), причем ее профиль при $x = y = z$ значительно уже, чем для $\hat{F}_{11}(x)$, $\hat{F}_{11}(y)$ и $\hat{F}_{11}(z)$.

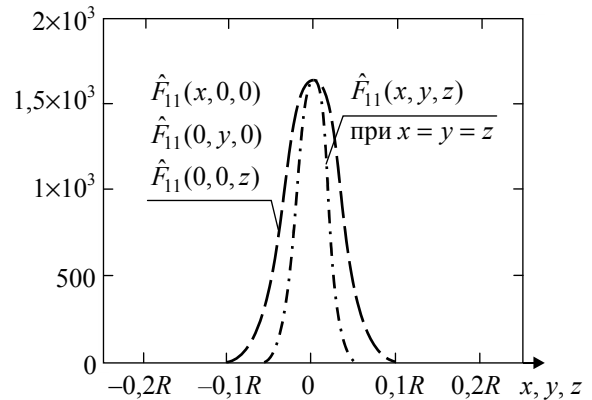


Рис. 4. Профили $\hat{F}_{11}(x, y, z)$ в центральной ячейке

Профили для функции $\hat{F}_{11}(x, y, z)$ в ячейке ω_1 , приведенные на рис. 5, отличаются друг от друга, что указывает на сильно выраженную анизотропию в распределении молекул вблизи 12 периферийных узлов икосаэдра.

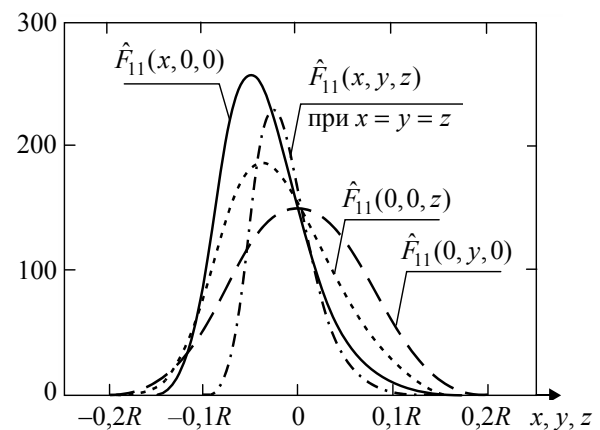


Рис. 5. Профили $\hat{F}_{11}(x, y, z)$ в периферийной ячейке

Отсутствие решений при температуре $\theta = 0,5$ можно интерпретировать как фазовый переход (при $\theta > 0,3$) кристаллической наночастицы в некоторое другое состояние. В работе [5] для кластера из 13 атомов определена температура плавления, которая оказалась равной 0,58 (уточненное значение $\theta = 0,3$). Апробированная здесь методика статистического описания структуры наночастицы в форме ико-

саэдра будет использоваться в дальнейшем при описании наночастиц разных размеров и при разных температурах, в частности углеродных наночастиц (с учетом релаксации алмазной решетки на границе наночастицы).

Заключение. В работе показано, что с помощью двухуровневого подхода можно последовательно теоретически исследовать микроструктуру кристаллических наночастиц и определять температуру их плавления.

Исследования проведены в соответствии с «Координационным планом работ, выполняемых в Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна, РФ) с участием организаций и учреждений Республики Беларусь в 2015 г.». Авторы благодарны главному научному сотруднику лаборатории теоретической физики (ОИЯИ) В. Б. Приезжеву за возможность детального обсуждения полученных результатов и выбор нанообъектов для дальнейших статистических исследований.

Литература

1. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. СПб., 1993. 242 с.
2. Rott L. A., Vikhrenko V. S. Statistical method of conditional distributions // *Fortschr. Phys.* 1975. Vol. 23, no. 3. P. 133–164.
3. Thermodynamics and diffusion of a lattice gas on a simple cubic lattice / P. Argyrakis [et al.] // *Phys. Rev. E.* 2001. Vol. 64, no. 6. Art. # 066108.
4. Бокун Г. С., Вихренко В. С., Наркевич И. И. Применение вариационных методов для описания структурных и термодинамических характеристик наночастиц // Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов: материалы Междунар. науч. конф., 22–24 окт. 2015 г. Минск, 2015. С. 239–243.
5. Берри Р. С., Смирнов В. М. Моделирование конфигурационных переходов в атомных системах // *УФН.* 2013. Т. 183, № 10. С. 1029–1057.

References

1. Narkevich I. I. *Molekulyarno-statisticheskaya teoriya neodnorodnykh kondensirovannykh sred. Dis. dokt. fiz.-mat. nauk* [Molecular-statistical theory of the non-homogeneous condensed matter. Doct. Diss.]. St. Petersburg, 1993. 242 p.
2. Rott L. A., Vikhrenko V. S. Statistical method of conditional distributions. *Fortschr. Phys.*, 1975, vol. 23, no. 3, pp. 133–164.
3. Argyrakis P., Groda Ya. G., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Thermodynamics and diffusion of a lattice gas on a simple cubic lattice. *Phys. Rev. E.*, 2001, vol. 64, no. 6, art. # 066108.
4. Bokun G. S., Vikhrenko V. S., Narkevich I. I. [Application of variational methods to describe the structural and thermodynamic properties of nanoparticles] *Materialy mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii (Avtomaticheskii kontrol' i avtomatizatsiya proizvodstvennykh protsessov* [Materials of the Internat. Sci. Conf. (Automatic control and automation of production processes)]. Minsk, 2015, pp. 239–243 (In Russian).
5. Berri R. S., Smirnov V. M. Modeling of configurational transitions in atomic systems. *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Successes of physical sciences], 2013, vol. 183, no. 10, pp. 1029–1057 (In Russian).

Информация об авторах

Наркевич Иван Иванович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: Narkevich@belstu.by

Квасов Николай Трофимович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник. Белорусский государственный университет (220030, г. Минск, пр-т Независимости, 4, Республика Беларусь).

Козич Екатерина Юрьевна – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь).

Information about the authors

Narkevich Ivan Ivanovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Narkevich@belstu.by

Kvasov Nikolay Trofimovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Chief Researcher, the Department of Physics. Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus).

Kozich Ekaterina Yur'yevna – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus).

Поступила 10.03.2016

УДК 531.19; 538.911

Е. В. Фарафонтова, Е. Ю. Козич

Белорусский государственный технологический университет

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЕДИНОЙ МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ
ДЛЯ РАСЧЕТА СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ, ЭНТРОПИИ
И ТЕПЛОЕМКОСТИ ВЕЩЕСТВА В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ**

Для описания структуры и термодинамических свойств макроскопической системы используется ранее предложенная единая статистическая модель кристалла, жидкости и газа. Молекулярная система с парным взаимодействием молекул описывается с помощью межмолекулярного потенциала Леннарда-Джонса.

Полученное с помощью этой модели статистическое выражение для свободной энергии позволило рассчитать энтропию, внутреннюю энергию и теплоемкость молекулярной системы. В результате решения интегральных уравнений для потенциалов средних сил проанализировано влияние температуры и молекулярного объема на унарную функцию распределения и определены среднеквадратичные отклонения молекулы от узлов решетки в кристаллическом состоянии. Построены изотермы энергоэнтропийного параметра единого уравнения состояния и свободной энергии системы в области существования кристалла и жидкости при температурах, которые меньше температуры критической точки, но больше температуры тройной точки в различных агрегатных состояниях.

В численных расчетах энтропия и теплоемкость находились с помощью первых разностных производных от свободной энергии и энтропии соответственно. С их помощью построена изохора свободной энергии для молекулярного объема $\nu = 0,9$. Среднее значение теплоемкости при этом молекулярном объеме в интервале температур от 0,8 до 1,3 приблизительно равно 2,9, что согласуется с литературными данными.

Ключевые слова: статистическая модель, потенциал средних сил, свободная энергия, энтропия, молекулярная теплоемкость.

E. V. Farafontova, E. Yu. Kozich

Belarusian State Technological University

**USING A SINGLE MOLECULAR-STATISTIC MODEL
TO CALCULATE FREE ENERGY, ENTROPY AND HEAT CAPACITY
OF THE SUBSTANCE IN THE CONDENSED STATE**

To describe the structure and thermodynamic properties of a macroscopic system, a single statistical model of a crystal, liquid and gas is used. The molecular system with a pair interaction of molecules is described with the Lennard-Jones potential.

We used this model to get statistical expression for the free energy which made it possible to calculate the entropy, the internal energy and the heat capacity of a molecular system. As a result of the solution of integral equations for the potentials of average forces the effect of temperature and the molecular volume on the unary distribution function were analysed. The standard deviations from the lattice sites of the molecule in the crystalline state were calculated. Isotherms of the energy-entropy parameter of the single state equation and the free energy of the system in the region of existence of crystal and liquid at different temperatures were constructed. These temperatures lie between the temperature of the critical point and the temperature of the triple point.

In the numerical calculations the entropy and heat capacity were calculated with the help of the first derivative of the free energy and entropy, respectively. With their help the isochore of free energy for the molecular volume in size of $\nu = 0.9$ was built. The average value of the heat capacity for a given the molecular volume at temperatures ranging from 0.8 to 1.3 is approximately 2.9, which result is consistent with the literature data.

Key words: statistical model, potential of medium forces, free energy, entropy, molecular heat capacity.

Введение. Для описания структуры и расчета термодинамических характеристик макроскопической системы используется единая статистическая модель кристалла, жидкости и газа [1], которая разработана в рамках двухуровневого

молекулярно-статистического подхода [2]. Методика полного учета взаимодействия выделенной молекулы конденсированной среды со всеми остальными молекулами макроскопической системы реализована в компьютерной

программе в интегрированной системе Mathematica. Взаимодействие этой молекулы с ближайшими соседями в первой и второй координационных сферах гранецентрированной решетки определяется с помощью потенциалов средних сил модифицированного за счет вакансий метода условных распределений [3]. Взаимодействие с молекулами на достаточно больших расстояниях, соответствующих третьей и четвертой сферам, описывается с помощью средних потенциалов, которые рассчитываются аналитически [4]. Система молекул, состоящая из выделенной молекулы и молекул, распределенных в четырех первых координационных сферах, образует малую подсистему по отношению к остальным молекулам всей макроскопической системы. Влияние этого окружения на распределение молекул в малой подсистеме учитывается в приближении среднего молекулярного поля [5], которое рассчитано с помощью принципа суперпозиции для однородной сплошной среды.

Система интегральных и алгебраических уравнений решалась с помощью метода последовательных приближений [6].

Основная часть. Свободная энергия в единой статистической модели однородной молекулярной системы с центральным взаимодействием определяется по формуле

$$F = F_q + Nf_p = -\theta \ln Q_N + Nf_p, \\ F_q = \theta \frac{N}{n} (n \ln n + (1-n) \ln(1-n)) - N \frac{An}{2} + Nf_p, \quad (1)$$

где N – число молекул системы; $f_p = -3/2\theta \ln(2\pi\theta/m)$ – классическое выражение импульсной части свободной энергии для одной молекулы; $\theta = kT$ – приведенная температура; k – постоянная Больцмана; Q_N – конфигурационный интеграл в F_{11} -приближении метода условных распределений [3]; $n = N/M$ – концентрация молекул на пространственной сетке из M ячеек, на которые разделен весь объем V системы; A – энергоэнтропийный параметр.

Статистическое выражение для энергоэнтропийного параметра A имеет следующий вид [1]:

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

где Q – величина, обратная нормировочному множителю унарной функции распределения молекулы в ячейке объемом ω ($\omega = V/M$); $\Phi_{ij}(\bar{q}_{ij})$ – потенциал средних сил взаимодейст-

вия молекулы в ячейке ω_i ($\bar{q}_i \subset \omega_i$) с молекулой, распределенной в ячейке ω_j ; угловыми скобками $\langle \dots \rangle_i^*$ обозначено статистическое усреднение по координатам молекулы в ячейке ω_i , выполненное с помощью вспомогательной нормированной на единицу одночастичной функции $\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i)$, описывающей распределение молекулы в ячейке ω_j при условии, что ячейка ω_j является вакантной; $n_{ij}^{\mu\nu}$ – двухъячеечные числа заполнения для всевозможных пар ячеек ($i, j = 1, 2, \dots, M$); n_μ или n_ν – числа заполнения ячеек частицами сорта μ или ν , т. е. концентрации молекул ($\mu, \nu = a, n_a = N/M = n$) и вакантных ячеек ($\mu, \nu = \delta, n_\delta = (M-N)/M = 1-n$).

Наличие статистического выражения (1) для свободной энергии позволяет рассчитать энтропию S , внутреннюю энергию U и теплоемкость C_V системы:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V, \quad U = F + TS, \\ C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V. \quad (3)$$

Молекулярные энтропия $s = S/N$ и теплоемкость $c_v = C_V/N$ находились путем дифференцирования конфигурационной части свободной энергии F_q , приходящейся на одну молекулу ($f = F_q/N$):

$$s = - \left(\frac{\partial f}{\partial \theta} \right)_v, \quad c_v = \theta \left(\frac{\partial s}{\partial \theta} \right)_v = -\theta \frac{\partial^2 f(\theta, v)}{\partial \theta^2}. \quad (4)$$

В численных расчетах энтропия s и теплоемкость c_v вычислялись с помощью первых разностных производных от свободной энергии f и энтропии s соответственно:

$$s \approx - \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta\theta} = \frac{f_i - f_{i+1}}{\Delta\theta}, \quad (5)$$

$$c_v \approx \theta \frac{s_{i+1} - s_i}{\Delta\theta} = \frac{\theta}{(\Delta\theta)^2} (2f_i - f_{i-1} - f_{i+1}). \quad (6)$$

Разработанная методика решения системы интегральных и алгебраических уравнений позволила провести расчеты в широкой области температур и молекулярных объемов (табл. 1 и 2), построить три изотермы свободной энергии молекулярной системы (рис. 1) и проанализировать влияние температуры θ и молекулярного объема v на вид унарной функции распределения в кристаллическом состоянии. Для этого с ее помощью были рассчитаны среднеквадратичные отклонения r_{KB} молекул от узлов кристаллической решетки с тепловыми вакансиями, значения которых также приведены в табл. 1 и 2.

Таблица 1

Результаты численных расчетов энтропийного параметра A , свободной энергии f и среднеквадратичного отклонения $r_{\text{кв}}$ для трех значений температуры (изотермы при $\theta = 0,8; 1,0; 1,2$)

θ	0,8			1,0			1,2		
ν	0,8	0,9	0,98	0,8	0,9	0,95	0,8	0,9	0,95
A	4,3408	7,2057	8,0237	2,1317	5,3431	6,1242	-0,1017	3,6424	4,6202
f	-2,1710	-3,6030	-4,0141	-1,0667	-2,6723	-3,1085	0,0508	-1,8213	-2,3104
$r_{\text{кв}}$	0,0837	0,1098	0,1488	0,0979	0,1276	0,1647	0,1001	0,1533	0,1771

Таблица 2

Результаты численных расчетов энтропийного параметра A , свободной энергии f и среднеквадратичного отклонения $r_{\text{кв}}$ (изохора при молекулярном объеме $\nu = 0,9$)

θ	0,8	0,85	0,9	0,95	1,0	1,2	1,4	1,5
A	7,2057	6,8017	6,2511	5,7956	5,3431	3,6424	1,9776	1,1477
f	-3,6030	-3,3637	-3,1289	-2,8984	-2,6723	-1,8213	-0,9530	-0,5740
$r_{\text{кв}}$	0,1098	0,1141	0,1185	0,1230	0,1276	0,1533	0,1607	0,1643

По результатам численных расчетов, которые содержатся в табл. 1 и 2, построены зависимости свободной энергии кристалла (рис. 2) и среднеквадратичного отклонения (рис. 3) от температуры при молекулярном объеме $\nu = 0,9$.

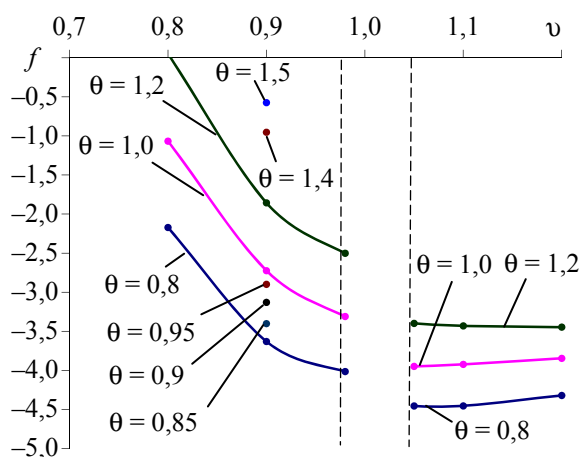


Рис. 1. Изотермы конфигурационной части свободной энергии при разных температурах

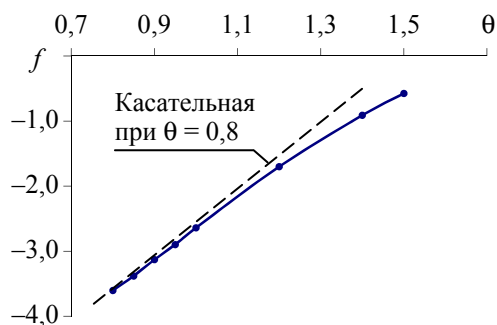


Рис. 2. Изохора конфигурационной части свободной энергии для молекулярного объема $\nu = 0,9$

Из рис. 1 видно, что в узкой области объемов решение системы интегральных уравнений

методом итераций не найдено. Это означает, что в этой области молекулярная система не может находиться в однородном (гомогенном) состоянии, т. е. имеет место фазовый переход кристалл – жидкость.

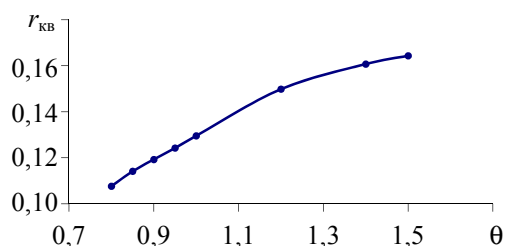


Рис. 3. Изохора среднеквадратичного отклонения для молекулярного объема $\nu = 0,9$

В результате численного дифференцирования свободной энергии f (рис. 2) построена приближенная изохора молекулярной конфигурационной энтропии кристалла при объеме $\nu = 0,9$ (рис. 4) и проведена оценка среднего значения молекулярной конфигурационной теплоемкости c_ν в интервале $\Delta\theta = 0,5$:

$$c_\nu \approx \theta \left(\frac{\Delta s}{\Delta \theta} \right)_\nu \approx 1 \cdot \frac{4,6 - 3,9}{0,5} = 1 \cdot \frac{0,7}{0,5} = 1,4.$$

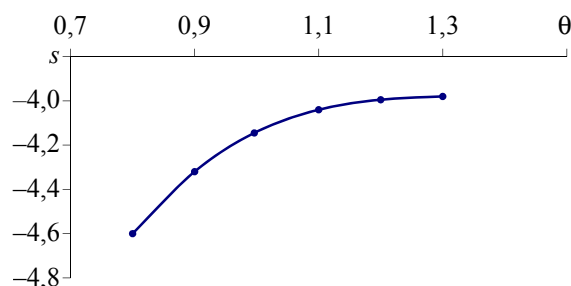


Рис. 4. Изохора конфигурационной энтропии для молекулярного объема $\nu = 0,9$

Выполненные численные решения системы интегральных уравнений и последующие расчеты показали, что для более детального анализа зависимости f , s и c_v от температуры θ следует значительно улучшить алгоритм численного решения системы интегральных уравнений.

В таблицах и рисунках приведены данные для конфигурационных частей свободной энергии, энтропии и теплоемкости, т. е. без учета вкладов от импульсной части молекулярной свободной энергии f_p системы, которая содержится в формуле (1) и имеет следующий вид:

$$f_p = -\frac{3}{2}\theta \ln\left(\frac{2\pi\theta}{m}\right). \quad (7)$$

Соответственно, импульсная часть молекулярной энтропии

$$s_p = -\frac{df_p}{d\theta} = \frac{3}{2}\left(\frac{m}{2\pi} + \ln\left(\frac{2\pi}{m}\right) + \ln\theta\right) \quad (8)$$

для молекулярной теплоемкости дает постоянное значение, равное 1,5.

Таким образом, среднее значение теплоемкости c_v при $\nu = 0,9$ в интервале температур от $\theta_1 = 0,8$ до $\theta_2 = 1,3$ равно приблизительно 2,9.

Заключение. В развиваемом классическом статистическом подходе имеется возможность изучения зависимости конфигурационных частей свободной энергии, энтропии и молекулярной теплоемкости от молекулярного объема и температуры (на это указывает приведенная на рис. 3 изохора энтропии). Для этого следует увеличить точность численного решения замкнутой системы интегральных и алгебраических уравнений для потенциалов средних сил, с помощью которых определяется зависимость свободной энергии от термодинамических параметров системы.

Литература

1. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В. Единая статистическая модель кристаллического, жидкого и газообразного состояний вещества // Вести НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. 2011. № 3. С. 71–79.
2. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. СПб., 1993. 242 л.
3. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.
4. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Клышко В. Б. Полная система уравнений для расчета свободной энергии системы с учетом неоднородного распределения молекул в микрочайках метода условных распределений // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 41–43.
5. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В. Расчет потенциалов средних сил и двухъячеечных чисел заполнения малой подсистемы молекул во внешнем молекулярном поле // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 51–53.
6. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Козич Е. Ю. Итерационная процедура решения системы двух интегральных уравнений для малой подсистемы молекул в поле остальных молекул среды с учетом неоднородностей в их распределении по объемам микрочаек // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 73–77.

References

1. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Optional statistical model of crystalline, liquid and gaseous states of matter. *Vesti NAN Belarusi* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus]. Series Physical-mathematical sciences, 2011, no. 3, pp. 71–79 (In Russian).
2. Narkevich I. I. *Molekulyarno-statisticheskaya teoriya neodnorodnykh kondensirovannykh sred. Diss. dokt. fiz.-mat. nauk* [Molecular-statistical theory of the inhomogeneous condensed matter. Doct. Diss.]. St. Petersburg, 1993. 242 p.
3. Rott L. A. *Statisticheskaya teoriya molekulyarnykh sistem* [Statistical theory of molecular systems]. Moscow, Nauka Publ., 1979. 280 p.
4. Narkevich I. I., Farafontova E. V., Klyshko V. B. Full 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. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2014, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 41–43 (In Russian).
5. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Calculation of the potential of mean forces and occupation numbers for the small subsystem of molecules in the applied field. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2013, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 51–53 (In Russian).
6. Narkevich I. I., Farafontova E. V., Kozich E. Yu. Iterative procedure for solving the system of two integral equations for a small subsystem of molecules, located in the field of the rest of molecules considering

the heterogeneities in their distribution. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 73–77 (In Russian).

Информация об авторах

Фарафонтова Елена Валерьевна – кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: Farafontova@belstu.by

Козич Екатерина Юрьевна – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь).

Information about the authors

Farafontova Elena Valer'yevna – PhD (Physics and Mathematics), assistant, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Farafontova@belstu.by

Kozich Ekaterina Yur'yevna – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus).

Поступила 10.03.2016

УДК 531.19

Г. С. Бокун

Белорусский государственный технологический университет

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ ДВУХУРОВНЕВОГО МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОГО ПОДХОДА ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ СО СТРУКТУРОЙ АЛМАЗНОЙ РЕШЕТКИ

Для изучения структуры и термодинамических характеристик наночастиц используются общие статистико-механические формулы, полученные в рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода, который является модификацией метода условных распределений и используется при описании свойств неоднородных молекулярных систем с помощью потенциалов средних сил. Эти потенциалы являются функционалами от искомым полей плотности. С помощью одночастичных потенциалов рассчитываются младшие условные функции распределения. По последним определяются среднеквадратичные отклонения, описывающие распределение частиц возле узлов решетки. Найден способ приближенного решения полученной ранее сложной системы интегральных уравнений, требующей выполнения большого объема численных расчетов. В результате получены аналитические выражения для одночастичных потенциалов, которые использованы для исследования изменения степени локализации частиц в узлах решетки вдоль радиальных направлений в сферических наночастицах. Численные расчеты проведены для кристаллических наночастиц со структурой алмаза. Для этого осуществлено компьютерное построение алмазной решетки. Применение общей статистической теории неоднородных систем позволило разработать алгоритмы анализа взаимного расположения частиц в локальном и дальнем окружениях. Исследована структура углеродных нанообразований с алмазоподобной решеткой.

Ключевые слова: коррелятивные функции, потенциалы средних сил, неоднородная система, химический потенциал, функционал свободной энергии, наночастица.

G. S. Bokun

Belarusian State Technological University

THE ALGORITHMIZATION OF THE TWO-LEVEL MOLECULAR-STATISTICAL APPROACH FOR CALCULATION OF PARAMETERS OF CRYSTAL NANOPARTICLES WITH DIAMOND LATTICE

To describe the structure and thermodynamic characteristics of nanoparticles the general statistical-mechanical expressions are used that are obtained in the framework of the two-level molecular-statistical approach, which is a modification of the method of conditional distributions and is used to describe properties of non-uniform molecular systems using the potentials of average forces. The single-particle potentials are functionals of the density fields. The potentials are used for calculation of younger conditional distribution functions. The latter are used for calculating the parameters describing the particle distribution near the lattice sites. The way to approximately solve the system of integral equations is found for that, which requires the implementation of a large amount of numerical calculations. As a result, the analytical expressions for the single-particle average potentials used to determine changes in the degree of localization of particles around lattice sites along the radial directions of spherical nanoparticles are found. The numerical calculations for crystalline nanoparticles with the diamond structure are performed. To do this, a computer construction of the lattice with a diamond-like structure is carried out. The application of the general statistical theory of inhomogeneous systems allowed the development of algorithms for the analysis of the mutual arrangement of the particles in the local and distant environments. The structure of the carbon nanostructures with a diamond lattice is investigated.

Key words: correlation functions, approximation of the potential medium-strength, homogeneous system, chemical potential, free energy functional, limited system, nanoparticle.

Введение. Наряду со все более широким применением численных методов Монте-Карло и молекулярной динамики для моделирования и прогнозирования различных свойств вещества сохраняют значение подходы, основанные на сокращенном статистическом описании, к которым, в частности, относятся методы коррелятивных функций [1, 2]. Если в первом случае

коррелятивные функции находятся при усреднении результатов вычислений, то здесь они играют роль исходных объектов, для которых записывается система соответствующих уравнений. Как правило, это бесконечная цепочка интегро-дифференциальных уравнений, решение которой возможно при внесении приближений, позволяющих замкнуть цепочку на

первых уравнениях. Первоначально для замыкания применялись соотношения между младшими и старшими функциями распределения. В последующем цепочки записывались и аппроксимировались для некоторых характеристик этих функций. Конструктивной оказалась аппроксимация ячеечных потенциалов средних сил. На использовании этих одночастичных потенциалов основана настоящая работа, так как эта аппроксимация передает основные особенности макроскопической системы в конденсированном состоянии вещества. Идея дробления потенциалов, предопределившая успехи в рассмотрении однородных систем, была перенесена на описание неоднородных систем путем дополнительного дробления пространства конфигураций на подпространства. На каждом из подпространств вводятся наборы парциальных функций распределения, так что статистико-механическое описание приобретает двухуровневый характер [2]. Каждое отдельное подпространство характеризуется соответствующим полем плотности числа частиц во всем объеме системы.

Было показано, что суммарные равновесные характеристики системы в целом (при пренебрежении флуктуациями) соответствуют такому полю плотности, при котором функционал свободной энергии минимален [2, 3]. Очевидно, что рассматриваемый двухуровневый метод наиболее удобен для описания систем, содержащих малое число частиц (кластеров). При наличии центра симметрии структурные и термодинамические характеристики таких систем (например, наночастиц) зависят от расстояния до их центра.

Основная часть. В развиваемой теории для описания структуры нанобразований применяются три параметра: средняя заселенность узлов решетки, смещение узлов в связи с ее деформацией (пространственной релаксацией [4]) и среднеквадратичное отклонение молекул относительно узлов. В данной работе исследуется изменение величины среднеквадратичного отклонения молекул по мере удаления от центра наночастицы. В области кристаллического состояния функция распределения имеет резко выраженный пик. Для описания распределения частиц в этом случае достаточно ограничиться одночастичными ячейными потенциалами. Рассмотрим процедуру их вычисления, моделируя неоднородность в системе с помощью микроячеек разных объемов ω_i , удовлетворяющих условию

$$\sum_{i=1}^N \omega_i = V, \quad (1)$$

где V – полный объем системы; $i = 1, 2, \dots, N$; N – общее количество частиц в системе.

Рассмотрим одночастичное распределение частиц (атомов или молекул), отвечающее пер-

вому приближению метода условных распределений, которое описывается унарной ненормированной функцией распределения ($\beta = 1/kT$):

$$F_{11}(q^i) = \exp\left(-\beta \sum_{j(i)}^N \varphi_j(q^i)\right). \quad (2)$$

Для вычисления одночастичных потенциалов $\varphi_j(q^i)$ используем вариационный принцип Н. Н. Боголюбова, согласно которому

$$Q_N \geq Q_N^0 \exp(-\beta \langle (H - H_0) \rangle_0). \quad (3)$$

Угловые скобки в (3) означают усреднение с помощью базисной функции распределения (2); Q_N, Q_N^0 – конфигурационные интегралы исследуемой и базисной систем соответственно.

В соотношении (3) энергия взаимодействия молекул между собой определяется формулой

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \Phi(q^i - q^j), \quad i \neq j. \quad (4)$$

Энергия базисной системы представляется средними потенциалами в виде

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \varphi_j(q^i), \quad i \neq j. \quad (5)$$

Конфигурационный интеграл базисной системы записывается в факторизованной форме:

$$Q_N^0 = \prod_{i=1}^N Q_i, \quad (6)$$

$$Q_i = \int_{\omega_i} \exp\left(-\beta \sum_{j(i)}^N \varphi_j(q^i)\right) dq^i.$$

Варьирование (3) позволяет найти одночастичные потенциалы, которые определяют наилучшее приближение к конфигурационному интегралу Q_N . В результате получаем интегральное уравнение для расчета этих потенциалов:

$$\varphi_j(q_i) = \frac{1}{Q_j} \int_{\omega_j} \Phi(q^j - q^i) F_{11}(q^j) dq^j. \quad (7)$$

Преобразуем это уравнение в соотношение, связывающее между собой среднюю энергию системы с ее свободной энергией. Для этого умножим уравнение (7) на нормированную одночастичную функцию распределения (2) и, выполнив суммирование по j , получим:

$$\frac{1}{Q_i} \sum_{j(i)}^N \varphi_j(q^i) F_{11}(q^i) =$$

$$= \frac{1}{Q_i} \sum_{j(i)}^N \frac{1}{Q_j} \int_{\omega_j} \Phi(q^i - q^j) F_{11}(q^i) F_{11}(q^j) dq^j. \quad (8)$$

Из соотношения (8) находим, что внутренняя энергия системы определится выражением

$$\langle H \rangle_0 = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \prod_{i=1}^N Q_i^{\frac{1}{2}}. \quad (9)$$

Из соотношения (9) следует выражение для конфигурационного интеграла в форме

$$Q_N \approx \prod_{i=1}^N (Q_i \omega_i)^{\frac{1}{2}}. \quad (10)$$

Нормированные функции в \hat{F}_{11} -приближении метода условных распределений имеют резкие пики в окрестности узлов, поэтому заменим их на функции F_{11}^* с равномерным распределением молекул внутри сфер с радиусами b_i , центры которых совпадают с узлами решетки. Параметры b_i подбираем так, чтобы среднеквадратичные отклонения σ_i от узлов решетки были равны для функций \hat{F}_{11} и F_{11}^* :

$$\sigma_i = \int_{\omega_i} r^2 F_{11}(x, y, z) d\omega_i = \sqrt{\frac{3}{5}} b_i. \quad (11)$$

В этом случае для среднего потенциала (7) получается аналитическое выражение вида [5]:

$$\Phi^*(\rho) = 4 \left[\frac{1}{(\rho^2 - b^2)^6} + \frac{7,2b^2}{(\rho^2 - b^2)^7} + \frac{14,4b^4}{(\rho^2 - b^2)^8} \right], \quad (12)$$

где ρ – расстояние от молекулы в ячейке ω_i до узла ячейки ω_j ; Φ^* и ρ безразмерны с помощью параметров используемого здесь потенциала Леннарда-Джонса.

Задача, решаемая в работе, состояла в том, чтобы найти зависимость параметра b от расстояния до центра наночастицы. Для этого необходимо выполнить классификацию узлов используемой решетки. Рассмотрим случай решетки алмаза, которая состоит из двух гранцентрированных подрешеток, одна из которых смещена относительно основной подрешетки на четверть пространственной диагонали ее элементарной ячейки. Базис образовывается восьмью атомами с координатами (0, 0, 0; 0, 0,5, 0,5; 0,5, 0,5, 0; 0,5, 0, 0,5) для четырех атомов основной подрешетки и с координатами (0,25, 0,25, 0,25; 0,75, 0,25, 0,75; 0,25, 0,75, 0,75; 0,75, 0,75, 0,25) для атомов второй смещенной подрешетки. Молекулярный объем v для алмазной решетки определяется формулой $v = a^3 / 8$, где a – параметр основной решетки, равный длине ребра куба элементарной ячейки. Базисными векторами в каждой подрешетке являются векторы a_1, a_2, a_3 и b_1, b_2, b_3 со следующими одинаковыми координатами (0,5, 0,5, 0,5), (0,5, 0, 0,5), (0, 0,5, 0,5). По координатам базисных векторов построены массивы координат узлов

первой и второй подрешеток в основной (глобальной) системе координат:

$$\begin{aligned} x_n &= 0,5(m_1 + m_2); & x_m &= x_n + 0,25, \\ y_n &= 0,5(m_3 + m_2); & y_m &= y_n + 0,25, \\ z_n &= 0,5(m_1 + m_3); & z_m &= z_n + 0,25. \end{aligned} \quad (13)$$

В выписанных здесь формулах m_1, m_2, m_3 – целочисленные переменные, изменяющиеся в интервале $[-M, M]$, определяющем размеры наночастицы. Тогда общее число частиц в первой и второй подрешетках составляет величину $N = 2(2M + 1)^3$. Индекс n изменяется в интервале $1 \leq n \leq (2M + 1)^3$, следовательно, индекс m в (13) принимает значения в интервале $(2M + 1)^3 < m \leq 2(2M + 1)^3$. Расстояния от узлов первой и второй подрешеток до начала координат основной системы находились по формуле

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (14)$$

Для рассчитанных по формулам (13) и (14) координат и расстояний сформирована матрица A . Номера столбцов этой матрицы совпадают с номерами узлов. В первой, второй, третьей и четвертой строках матрицы записаны расстояния и координаты узлов решетки соответственно.

При выполнении суммирования в (2) удобно осуществлять сначала суммирование по узлам, принадлежащим координационной сфере с номером l , относительно центра ячейки ω_i , а затем по l ($0 \leq l \leq L$, здесь L – число учитываемых в расчетах ближайших координационных сфер). Для этого массив A был переформатирован в новый массив B , где узлы решетки переименованы так, чтобы с возрастанием их номера расстояние до центра наночастицы увеличивалось при переходе от одной координационной сферы к другой либо сохранялось в пределах координационной сферы.

Для дальнейшей классификации узлов решетки из массива B был сформирован новый массив C из трех строк и с числом столбцов, равных числу координационных сфер. В первой строке этого массива указывается номер последнего узла из матрицы B , принадлежащего выбранной координационной сфере. Во второй строке записывается количество узлов, принадлежащих этой сфере, а в третьей – расстояния до этих узлов.

В связи с тем, что искомый параметр b зависит от радиуса координационной сферы относительно центра наночастицы, необходимо установить, к какой координационной сфере принадлежит выбранный узел решетки. Указанную связь находили с помощью специального одномерного массива D , в котором номера узлов записаны в первом столбце, а номера соответствующих координационных сфер – во втором.

Для расчета коррелятивной функции $F_{11}(q^i)$ в окрестности узла с номером i необходимо выполнить суммирование по всем узлам j в локальном окружении узла i . Параметры b этих узлов зависят от их положения в основной (глобальной) системе координат. Для их определения по координатам узлов j , окружающих избранный узел i , устанавливались их номера в матрице B и соответствующие им номера координационных сфер относительно центра наночастицы. По номерам сфер определялись параметры b и вычислялись потенциалы средних сил, входящие в определение функции распределения (2). Найденные таким образом функции распределения использовались для вычисления среднеквадратичных отклонений и новых значений параметров b (радиусов сфер), моделирующих сферически симметричное распределение частицы в окрестности своего узла. В связи со сказанным представляется возможным интегрирование по молекулярному объему $v = a^3 / 8$ заменить интегрированием по объему шара, радиус которого вычисляется из условия равенства этих объемов, т. е.

$$\frac{4}{3}\pi r_v^3 = \frac{a^3}{8} \Rightarrow r_v = 0,308. \quad (15)$$

Все расчеты выполнялись в единицах параметра решетки a , соответственно, безразмерное расстояние между ближайшими соседними узлами составляло 0,432. Радиус r_v , определенный по (15), оказался больше радиуса сферы, вписанной в ячейку Вигнера – Зейтца, который равен 0,216.

Интегрирование выполнялось по 10 лучам, направленным на четыре ближайших узла, и вдоль трех координатных осей в положительном и отрицательном направлениях. Поскольку расчеты проводились в единицах параметра решетки a , то входящие в потенциал безразмерные расстояния пересчитывались путем умножения на параметр

$$\mu_v = 2,59 \left(\frac{v}{v_b} \right)^{1/3}, \quad (16)$$

где v_b – молекулярный объем, при котором расстояние между ближайшими узлами решетки соответствует минимуму потенциала Леннарда-Джонса с параметрами, определенными на основе характеристик монокристалла алмаза ($v_b = 5,1 \text{ \AA}^3$).

Парный межатомный потенциал Леннарда-Джонса учитывает зависимость энергии взаимодействия атомов углерода только от расстояния между ними. Поскольку атомы углерода, расположенные в ближайших ячейках, образуют прочную ковалентную связь, то необходимо учесть зависимость их энергии от всех валент-

ных углов в тетраэдрах, образующих сферическую наночастицу. Это взаимодействие описывалось трехчастичными добавками к парному потенциалу с помощью формулы $\Delta U = c(\Delta\phi)^2$. Коэффициент угловой жесткости связей c в тетраэдрах принимался в соответствии с данными работы [6]. При этом энергия угловых деформаций в тетраэдрах ограничивалась максимальным значением, которое достигалось при смещении атома из узла на величину, равную ширине ямы потенциала Леннарда-Джонса.

В результате расчетов (с учетом вкладов только от взаимодействия с ближайшими соседями) установлено, как изменяется микроструктура анализируемых наночастиц с ростом их размеров, и проведено сопоставление с аналогичными данными для случая неограниченного кристалла.

Полученные результаты свидетельствуют о высокой степени локализации колебаний атомов возле узлов в макрокристалле до безразмерной температуры θ , равной 0,1. При росте температуры вплоть до этого значения параметр b медленно увеличивается до 0,058. Как только температура превышает указанное значение, параметр b испытывает резкий скачок, связанный с делокализацией функции распределения.

Это можно интерпретировать как фазовый переход, вызванный плавлением кристалла. Рассчитанная таким образом температура близка к экспериментальному значению температуры плавления алмаза ($\theta \approx 0,05$).

Полученные характеристики микроструктуры для сферической наночастицы изменяются при удалении от ее центра и зависят от общего количества атомов в наночастице. При температурах, близких к температуре плавления, наночастицы сохраняют устойчивость при высокой степени делокализации поверхностных атомов за счет удержания их атомами, находящимися во внутренней области наночастицы.

Дальнейшие расчеты, с учетом вкладов во взаимодействие от вторых и последующих соседей, показали, что алмазоподобная кристаллическая структура не может существовать, если взаимодействие со вторыми и последующими соседями описывается тем же парным потенциалом, что и для первых соседей. Это следует из того, что при использовании одного и того же парного потенциала Леннарда-Джонса локализованных решений не существует, по крайней мере при температурах выше 0,004, для которых удалось провести вычисления по применяемой в этой работе программе. При описанном выше взаимодействии между атомами реализуется кристалл с гранцентрированной решеткой.

Алмазоподобная структура наночастицы может существовать при образовании прочной

(ковалентной) связи с первыми соседями при условии, что энергия связи со вторыми и последующими соседями будет, по крайней мере, на четыре порядка меньше, чем с первыми. Это означает, что взаимодействие со вторыми и последующими соседями носит лондоновский (ван-дер-ваальсовый) характер. Оценки, проведенные с использованием справочных данных по энергиям связи атомов углерода в молекулах и кристаллах, показывают, что для первых соседей глубина ямы должна соответствовать температуре порядка 60 000 К, а для остальных – 60 К, т. е. даже меньше, чем для случая взаимодействия между атомами аргона (110 К).

Заключение. Выполненная в работе алгоритмизация двухуровневого статистического описания наноструктур позволяет исследовать их свойства с помощью коррелятивных функций при различных термодинамических условиях.

Исследования проведены в соответствии с «Координационным планом работ, выполняемых в Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна, РФ) с участием организаций и учреждений Республики Беларусь в 2015 г.». Автор благодарен главному научному сотруднику лаборатории теоретической физики (ОИЯИ) В. Б. Приезжеву за рекомендации, высказанные при обсуждении проведенных исследований.

Литература

1. Rott L. A., Vikhrenko V. S. Statistical method of conditional distributions // *Fortschr. Phys.* 1975. Vol. 23, no. 3. P. 133–164.
2. Narkevich I. I. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory // *Physica*. 1982. Vol. 112A. P. 167–192.
3. Бокун Г. С., Вихренко В. С., Наркевич И. И. Применение вариационных методов для описания структурных и термодинамических характеристик наночастиц // Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов: материалы Междунар. науч. конф., 22–24 окт. 2015 г. Минск, 2015. С. 239–243.
4. Narkevich I. I. A statistical study of the defect crystal lattice relaxation // *Physica A*. 1988. Vol. 150. P. 659–671.
5. Наркевич И. И., Немцов В. Б., Ротт Л. А. Вычисление на ЭВМ коррелятивных функций молекулярного кристалла // *Известия высших учебных заведений. Физика*. 1973. № 4. С. 95–100.
6. Schröder C., Schwarzer D., Vikhrenko V. Molecular Dynamics Simulation of Heat Conduction through a Molecular Chain // *Journ. Phys. Chem. A*. 2009. Vol. 113, no. 51. P. 14039–14051.

References

1. Rott L. A., Vikhrenko V. S. Statistical method of conditional distributions. *Fortschr. Phys.*, 1975, vol. 23, no. 3, pp. 133–164.
2. Narkevich I. I. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory. *Physica*, 1982, vol. 112A, pp. 167–192.
3. Bokun G. S., Vikhrenko V. S., Narkevich I. I. [Application of variational methods to describe the structural and thermodynamic properties of nanoparticles] *Materialy mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii (Avtomaticheskiiy kontrol' i avtomatizatsiya proizvodstvennykh protsessov)* [Materials of the Internat. Sci. Conf. (Automatic control and automation of production processes)]. Minsk, 2015, pp. 239–243 (In Russian).
4. Narkevich I. I. A statistical study of the defect crystal lattice relaxation. *Physica A.*, 1988, vol. 150, pp. 659–671.
5. Narkevich I. I. Nemtsov V. B., Rott L. A. Computer calculations of correlation function of molecular crystals. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Fizika* [Izvsetiya of institution of higher education. Physics], 1973, no. 4, pp. 95–100 (In Russian).
6. Schröder C., Schwarzer D., Vikhrenko V. Molecular Dynamics Simulation of Heat Conduction through a Molecular Chain. *Journ. Phys. Chem. A.*, 2009, vol. 113, no. 51, pp. 14039–14051.

Информация об авторе

Бокун Георгий Станиславович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gBokun@mail.ru

Information about the author

Bokun George Stanislavovich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gBokun@mail.ru

Поступила 07.03.2016

УДК 535.14

Т. Б. Карлович

Белорусский государственный технологический университет

**МУЛЬТИПИКОВЫЙ СПЕКТР РЕЗОНАНСНОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ
В МОДЕЛИ ОДНОКУБИТНОГО ЛАЗЕРА**

Однокубитный лазер является квантовой системой, в которой реализуется взаимодействие одиночного искусственного атома и одиночной резонаторной моды поля. Такой лазер имеет ряд преимуществ по сравнению с одноатомным лазером: положение искусственного атома в нем фиксировано, искусственный атом обладает большим дипольным моментом и сильно взаимодействует с резонаторной модой. Кроме того, упругое и неупругое рассеяние излучения в однокубитном лазере осуществляется вдоль одной линии волновода в отличие от 3D-излучения одноатомного лазера, интенсивность которого низка. Уже экспериментально получен трехпиковый спектр резонансной флуоресценции однокубитного лазера (так называемый триплет Моллоу). Центральная компонента этого спектра возникает в результате неупругого рассеяния излучения при воздействии мощной когерентной накачки, а два других резонанса связаны с расщеплением Раби.

Однокубитный лазер состоит из одиночного сверхпроводящего кубита, взаимодействующего с модой поля копланарного волновода. Квантовый кубит характеризуется двумя зарядовыми состояниями: с избыточной электронной куперовской парой и без нее. Между этими состояниями в результате распада куперовской пары и туннелирования электронов возможны переходы с испусканием фотонов.

В данной работе нами рассчитывался спектр резонансной флуоресценции однокубитного лазера в виде Фурье-преобразования атомной корреляционной функции с использованием теоремы о регрессии. В случае малой интенсивности некогерентной накачки на основе модели Джейнса – Каммингса с затуханием аналитически определены положения линий спектра. Показано, что многопиковый спектр резонансной флуоресценции имеет место в случае небольшой интенсивности некогерентной накачки. Продемонстрировано, что параметр дефазировки не влияет на положение резонанса в спектре, а его рост приводит к увеличению ширины спектральной линии.

Ключевые слова: однокубитный лазер, высокодобротный резонатор, сверхпроводящий кубит, спектр резонансной флуоресценции, вакуумное расщепление Раби, матрица плотности, теорема о регрессии.

T. B. Karlovich

Belarusian State Technological University

**MULTIPEAKED SPECTRUM OF RESONANCE FLUORESCENCE
IN A SINGLE-QUBIT MODEL**

Single-qubit laser is the quantum system, which implements the interaction of an artificial single atom and a single cavity field mode. Such laser has the range of advantages compared with single-atom laser: the position of artificial atom is fixed in it, artificial atom has a great dipole moment and strongly interacts with the cavity field mode. Besides that elastic and inelastic radiation scattering in the single-qubit laser are realized with high efficiency in 1D transmission line compared with low efficiency interaction of real atom with cavity field mode in 3D-space. Three-peaked spectrum of resonance fluorescence (so-called triplet Mollow) has been experimentally obtained. The central component of this spectrum is a result of inelastic scattering under the action of strong coherent pump. The sidebands are connected with the vacuum Rabi splitting.

Single-qubit laser consists of single superconducting qubit coupled to the electromagnetic field confined in 1D transmission line. Quantum qubit is characterized by two charged states: with the excess Cooper pair and without it. As a result of the collapse of the Cooper pair and tunneling transitions of the electrons the emission of photons is possible.

In this work the resonance fluorescence spectrum is calculated on the basis of regression theorem as the Fourier transform of the atomic correlation function. In the case of low intensity of the incoherent pump on the basis of the Jaynes – Cummings model with dissipation the positions of spectrum lines are analytically defined. It is shown that multi-peaked spectrum takes place in the case of low intensity pump. It is demonstrated that the dephasing parameter doesn't affect the position of line in the spectrum and its growth leads to the increasing of the line width.

Key words: single-qubit laser, high- Q cavity, Josephson energy, superconducting qubit, density matrix, resonance fluorescence, vacuum Rabi oscillations, regression theorem.

Введение. Однокубитный лазер является примером макроскопической квантовой системы, интенсивно исследуемой в настоящее время. В работе [1] было продемонстрировано действие однокубитного лазера в режиме генерации. В статье [2] реализованы квантовые алгоритмы на основе двухкубитного квантового процессора, в работе [3] синтезировано произвольное квантовое состояние в сверхпроводящем резонаторе. В спектре [4] наблюдался триплет Моллоу в резонансной флуоресценции одиночного искусственного атома. Трехпиковый спектр флуоресценции связан с неупругим рассеянием излучения двухуровневым атомом при воздействии мощной когерентной накачки. Кроме спектральной компоненты на резонансной частоте возникают еще и два боковых симметричных пика, отстроенных от центральной компоненты на частоту Раби. В квантовой оптике возникновение осцилляций Раби связано с расщеплением уровней энергии при взаимодействии одиночного двухуровневого атома с одиночной модой резонаторного поля (модель Джейнса – Каммингса). Если внешнее когерентное поле отсутствует, то в такой системе возможно наблюдение дублетных линий, называемых вакуумным расщеплением Раби. В данной работе мы исследуем мультипиковый спектр резонансной флуоресценции однокубитного лазера при воздействии некогерентной накачки. Стационарный спектр рассчитывается с использованием теоремы о регрессии и уравнения для матрицы плотности.

Основная часть. Однокубитный лазер состоит из заряженного сверхпроводящего кубита (искусственного атома), взаимодействующего с модой поля сверхпроводящего резонатора, представляющего собой копланарный волновод [1]. Кубит характеризуется двумя зарядовыми состояниями: $|2\rangle$ – с избыточной куперовской парой и $|0\rangle$ – без нее (рис. 1). Электронная куперовская пара поступает через контакт Джозефсона на островок (кубит) с электрода земли. Инверсная населенность в однокубитном лазере создается путем интенсивной откачки куперовских пар с островка. С этой целью к нему через туннельный переход подключен контакт стока. Напряжение на него подается такое, чтобы сначала один электрон мог протуннелировать со скоростью Γ_{21} после развала куперовской пары и система перешла в состояние $|1\rangle$ с одним избыточным электроном на островке, а затем и второй электрон протуннелировал со скоростью Γ_{10} и система перешла в состояние $|0\rangle$. Избыточная энергия этого состояния высвобождается в виде испускания фотонов с частотой, настроенной на частоту перехода $|0\rangle \rightarrow |2\rangle$.

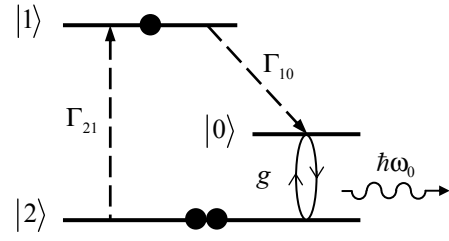


Рис. 1. Схема однокубитного лазера [1]

Взаимодействие куперовской пары и резонаторной моды поля описывается гамильтонианом Джейнса – Каммингса:

$$H_{JC} = \frac{1}{2} \hbar \omega_Q \sigma_z + \hbar \omega_R a^+ a + \hbar g (\sigma_+ a + \sigma_- a^+), \quad (1)$$

где собственные значения энергии кубита $\hbar \omega_Q = \sqrt{\epsilon^2 + E_J^2}$ определяются через разность электростатических энергий между состояниями $|0\rangle$ и $|2\rangle$, ϵ и энергию Джозефсона E_J ; ω_Q – частота кубита; ω_R – частота резонатора; g – константа взаимодействия. В дальнейшем будем рассматривать резонансное взаимодействие кубита и резонаторной моды поля, полагая равными частоты $\omega_Q = \omega_R = \omega_0$.

Операторы σ_i удовлетворяют коммутационным соотношениям для ферми-частиц:

$$[\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z. \quad (2)$$

Операторы a и a^+ удовлетворяют коммутационным соотношениям для бозе-частиц:

$$[a, a^+] = 1. \quad (3)$$

Взаимодействие с окружением в однокубитном лазере сопровождается диссипацией энергии кубита и резонатора. Затухание кубита описывается параметром γ , а затухание резонаторной моды поля – параметром k . Управление кубитом осуществляется при помощи некогерентной накачки с интенсивностью Γ . Дефазировка кубита учитывается параметром Γ_ϕ^* . Редуцированное уравнение для матрицы плотности ρ , описывающей эволюцию однокубитного лазера, имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H_{JC}, \rho] + L_Q \rho + L_R \rho. \quad (4)$$

Здесь лиувиллиан L_Q описывает релаксацию и возбуждение кубита:

$$L_Q \rho = \frac{\Gamma_\phi^*}{2} (\rho - \sigma_z \rho \sigma_z) + \frac{\gamma}{2} ([\sigma_-, \rho \sigma_+] + [\sigma_-, \rho \sigma_+]) + \frac{\gamma}{2} ([\sigma_+, \rho \sigma_-] + [\sigma_+, \rho \sigma_-]), \quad (5)$$

лиувиллиан L_R описывает релаксацию резонансной моды поля в случае пренебрежения числом тепловых фотонов:

$$L_R \rho = k([a\rho, a^\dagger] + [a, \rho a^\dagger]). \quad (6)$$

Спектр резонансной флуоресценции состоит из рассеянного искусственным атомом излучения вдоль микроволновой линии (рис. 2). Он описывается Фурье-преобразованием двухвременной атомной корреляционной функции:

$$S_\sigma(\omega) = \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \frac{2 \operatorname{Re} \int_0^\infty d\tau \exp(i\omega\tau) \langle \sigma_+(t+\tau)\sigma_-(t) \rangle}{\langle \sigma_+(t)\sigma_-(t) \rangle} \right\}, \quad (7)$$

нормированной на среднее число возбуждений в системе. Такие корреляционные функции вычисляются, согласно теореме о регрессии, через неунитарный оператор эволюции (матрицу Грина) $\exp(L\tau)$:

$$\langle \sigma_+(t+\tau)\sigma_-(t) \rangle = Sp(\sigma_+ e^{L\tau} \sigma_- \rho(t)). \quad (8)$$

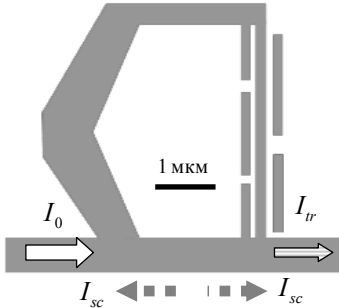


Рис. 2. Искусственный атом, взаимодействующий с излучением волновода. Падающее излучение интенсивности I_0 частично рассеивается в прямом и обратном направлениях волновода (I_{sc}) и частично проходит через микроволновую линию (I_{tr}) [4]

Для нахождения матрицы Грина и стационарного решения уравнения (4) будем использовать разложение по базису фоковских состояний $|n\rangle$ (n – число фотонов) и атомных состояний $|i\rangle$, $i=2,0$. В этом базисе уравнения для диагональных $\rho_{ii}^{n,n}$ и недиагональных $\rho_{02}^{n,n+1} = (\rho_{20}^{n+1,n})^*$ элементов образуют замкнутую систему:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{22}^{n,n} &= 2g\sqrt{n}\rho_{02}^{n-1,n} - (2kn + \Gamma)\rho_{22}^{n,n} + \\ &+ \gamma\rho_{00}^{n,n} + 2k(n+1)\rho_{22}^{n+1,n+1}, \\ \dot{\rho}_{00}^{n,n} &= \Gamma\rho_{22}^{n,n} - (2kn + \gamma)\rho_{00}^{n,n} - \\ &- 2g\sqrt{n+1}\rho_{02}^{n,n+1} + 2k(n+1)\rho_{00}^{n+1,n+1}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{02}^{n,n+1} &= g\sqrt{n+1}\rho_{00}^{n,n} - k(2n+1) + \\ &+ \left(\frac{R}{2} + \Gamma_\phi^*\right)\rho_{02}^{n,n+1} - g\sqrt{n+1}\rho_{22}^{n+1,n+1} + \\ &+ 2k\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\rho_{02}^{n+1,n+2}, \end{aligned}$$

где $R = \Gamma + \gamma$. Стационарное решение системы (8) $\rho_{ij}^{m,n}(t \rightarrow \infty) \equiv \bar{\rho}_{ij}^{m,n}$ рассчитывалось численно и использовалось для определения среднего числа возбуждений в системе и начальных значений матрицы Грина $\exp(L\tau)$. Вычисление корреляционной функции (8) удобно проводить при помощи вспомогательного оператора:

$$A(\tau) = e^{L\tau} \sigma_- \bar{\rho}, \quad (10)$$

матричные элементы которого определяют искомые корреляционные функции, согласно соотношениям

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \sigma_+(t+\tau)\sigma_-(t) \rangle &= \\ = Sp(\sigma_+ A(\tau)) &= \sum_n A_{02}^{n,n}(\tau). \end{aligned} \quad (11)$$

При этом уравнения для элементов $A_{20}^{n,n}(\tau)$ также образуют замкнутую систему уравнений (аналогично системе (9)).

Для определения спектра (7) необходимо найти лапласовские образы оператора $A(\tau)$ при мнимом значении параметра преобразования, т. е. $\tilde{A}(-i\omega)$. Формируя из элементов операторов $A(\tau)$ вектора

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} A^{(1)} \\ \vdots \\ A^{(n)} \end{bmatrix}, \quad A^{(n)} = \begin{bmatrix} A_{00}^{n-1,n} \\ A_{02}^{n-1,n+1} \\ A_{20}^{n,n} \\ A_{22}^{n,n+1} \end{bmatrix}, \quad (12)$$

решение уравнений для искомых лапласовских элементов можно представить в виде

$$\tilde{\underline{A}}_\beta(-i\omega) = -(i\omega I + M)^{-1} \underline{\bar{A}}_\beta, \quad (13)$$

где начальное значение векторов $\underline{\bar{A}}_\beta$ задается стационарными значениями элементов матрицы плотности $\bar{\rho}$:

$$\begin{aligned} \bar{A}(0) = \sigma_- \bar{\rho}_{ss} &= \sum_n (\bar{\rho}_{00}^{n,n} |2\rangle\langle 0|n\rangle\langle n| + \\ &+ \bar{\rho}_{02}^{n,n+1} |2\rangle\langle 2|n\rangle\langle n+1|). \end{aligned} \quad (14)$$

Матрица M , входящая в (14), определяется аналогично работе [5]. Окончательно выражение для стационарного спектра принимает вид

$$S_\sigma(\omega) = \frac{2 \operatorname{Re} \sum_n \tilde{\underline{A}}_{20}^{n,n}(-i\omega)}{\sum_m \bar{A}_{20}^{m,m}}. \quad (15)$$

На рис. 3 представлен спектр для однокубитного лазера, численно рассчитанный на основе формул (13), (14). Константа взаимодействия g выбрана превосходящей все остальные параметры системы для того, чтобы в спектре хорошо были разрешены резонансы, ширины которых определяются параметрами некогерентной накачки, затухания и декогеренций.

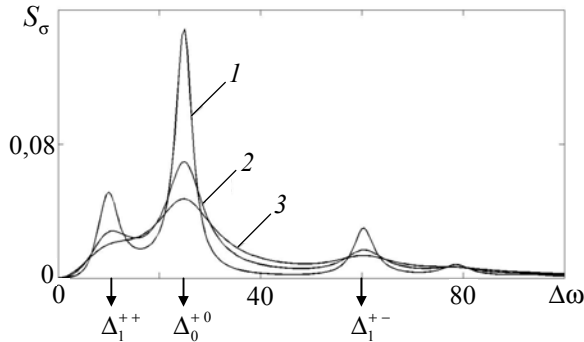


Рис. 3. Спектр резонансной флуоресценции в зависимости от частотной расстройки $\Delta = \omega - \omega_0$ для параметров $k = 0,5, g = 25, \Gamma = 2, \gamma = 1$: $1 - \Gamma_\phi^* = 0$; $2 - \Gamma_\phi^* = 5$; $3 - \Gamma_\phi^* = 10$. Стрелками на рисунке обозначены положения резонансов в соответствии с переходами в модели Джейнса – Каммингса с затуханием

Из рис. 3 видно, что с ростом параметра дефазировки положение резонансов в спектре не меняется, а увеличивается их ширина пропорционально параметру Γ_ϕ^* и уменьшается амплитуда. В случае роста параметров затухания системы в спектре резонансной флуоресценции остаются только линии, соответствующие вакуумному расщеплению Раби (рис. 4).

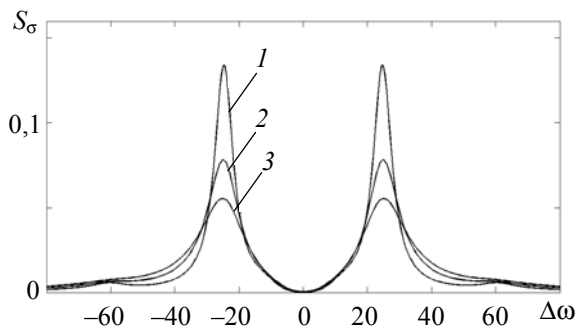


Рис. 4. Спектр резонансной флуоресценции в зависимости от частотной расстройки $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ для параметров $k = 2, g = 25, \Gamma = 2, \gamma = 4$: $1 - \Gamma_\phi^* = 0$; $2 - \Gamma_\phi^* = 5$; $3 - \Gamma_\phi^* = 10$

Аналитический расчет положений резонансов в спектрах (рис. 3 и 4) осуществляется на основе модели Джейнса – Каммингса с затуха-

нием при помощи метода, основанного на усреднении по квантовым случайным траекториям движения (или усреднения по случайным волновым функциям) [5].

На рис. 5 представлена схема энергетических уровней, состоящая из двукратно расщепленных энергетических уровней гармонического осциллятора, равноотстоящих по частоте. Величина расщепления определяется формулой

$$\Delta E = 2\sqrt{lg^2 - \delta^2}, \quad \delta = \frac{1}{2}\left(\frac{\gamma - \Gamma}{2} - k\right), \quad (16)$$

где l – число фотонов в резонаторной моде поля. Согласно модели, присутствующие в спектре флуоресценции частоты (рис. 3) рассчитываются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \omega_0^{+0} &= \omega_0 + \sqrt{g^2 - \delta^2}, \\ \omega_1^{++} &= \omega_0 + \sqrt{2g^2 - \delta^2} - \sqrt{g^2 - \delta^2}, \\ \omega_1^{+-} &= \omega_0 + \sqrt{2g^2 - \delta^2} + \sqrt{g^2 - \delta^2}. \end{aligned} \quad (17)$$

В формуле (17) нижний индекс у частоты определяет число фотонов в резонаторе, верхние индексы указывает, между какими подуровнями происходит переход с испусканием фотона. Верхнее расщепленное состояние обозначено индексом «+», нижнее состояние – индексом «-».

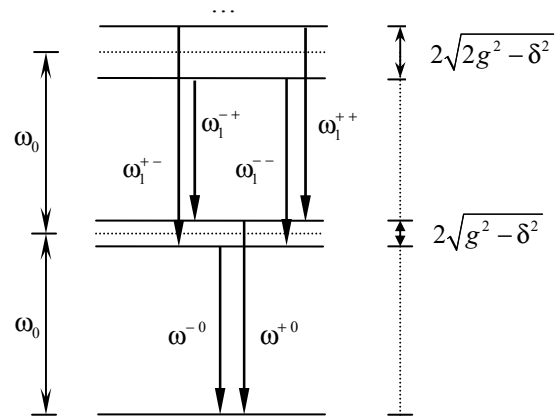


Рис. 5. Схема уровней энергии модели Джейнса – Каммингса с затуханием. Представлены первые три собственных состояния, соответствующих наличию в поле 0, 1, 2 фотонов

Закключение. Для модели однокубитного лазера рассчитан стационарный спектр резонансной флуоресценции с учетом некогерентной накачки и параметра дефазировки. Показано, что спектр имеет мультипиковую структуру только при малых значениях интенсивности некогерентной накачки. Продемонстрировано, что при увеличении параметров затухания искусственного

атома и резонаторной моды поля в спектре наблюдаются резонансы, соответствующие вакуумному расщеплению Раби. Аналитически рассчитаны положения спектральных линий на ос-

нове модели Джейнса – Каммингса с затуханием. Показано, что параметр дефазировки не влияет на положение линии в спектре, а только увеличивает ширину спектральной линии.

Литература

1. Single artificial-atom lasing / O. Astafiev [et al.] // *Nature*. 2007. Vol. 449. P. 588–590.
2. Demonstration of Two-Qubit Algorithms with a Superconducting Quantum Processor / L. DiCarlo [et al.] // *Nature*. 2009. Vol. 460. P. 240–244.
3. Synthesizing Arbitrary Quantum States in a Superconducting Resonator / M. Hofheinz [et al.] // *Nature*. 2009. Vol. 459. P. 546–549.
4. Resonance Fluorescence of a Single Artificial Atom / O. Astafiev [et al.] // *Science*. 2010. Vol. 327. P. 840–843.
5. Карлович Т. Б., Килин С. Я. Авто- и кросскорреляционные функции одноатомного лазера в режиме сильного взаимодействия // *Оптика и спектр*. 2007. Т. 103, № 2. С. 260–271.

References

1. Astafiev O., Inomata K., Niskanen A. O., Yamamoto T., Pashkin Yu. A., Nakamura Y., Tsai J. S. Single artificial-atom lasing. *Nature*, 2007, vol. 449, pp. 588–590.
2. DiCarlo L., Chow J. M., Gambetta J. M., Bishop L. S., Johnson B. R., Schuster D. I., Majer J., Blais A., Frunzio L., Girvin S. M., Schoelkopf R. J. Demonstration of Two-Qubit Algorithms with a Superconducting Quantum Processor. *Nature*, 2009, vol. 460, pp. 240–244.
3. Hofheinz M., Wang H., Ansmann M., Bialczak R. C., Lucero E., Neeley M., D’Connell A. D., Sank D., Wenner J., Martinis J. M., Cleland A. N. Synthesizing Arbitrary Quantum States in a Superconducting Resonator. *Nature*, 2009, vol. 459, pp. 546–549.
4. Astafiev O., Zagoskin A., Abdumalikov A. A., Pashkin Yu. A., Yamamoto T., Inomata K., Nakamura Y., Tsai J. S. Resonance Fluorescence of a Single Artificial Atom. *Science*, 2010, vol. 327, pp. 840–843.
5. Karlovich T. B., Kilin S. Ya. Auto- and crosscorrelation functions of a single-atom laser in the strong coupling regime. *Optika i spektr* [Opt. and Spektr], 2007, vol. 103, no. 2, pp. 260–271 (In Russian).

Информация об авторе

Карлович Татьяна Борисовна – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры энергосбережения, гидравлики и теплотехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: tbkar@mail.ru

Information about the author

Karlovich Tatyana Borisovna – PhD (Physics and Mathematics), Senior Lecturer, the Department of Energy Saving, Hydraulics and Heating. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tbkar@mail.ru

Поступила 12.03.2016

УДК 539.213.2

А. В. Кухто¹, А. В. Мисевич², А. Е. Почтенный²¹Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета²Белорусский государственный технологический университет**ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР
НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА**

В статье изучалась проводимость на постоянном токе пленок, приготовленных из графеновых нанопластинок, а также графеновых нанопластинок, покрытых наночастицами меди, кобальта, оксида железа (Fe_3O_4 , магнетит), и графеновых нанопластинок, добавленных в полимер полиэтилендиокситиофен:полистиролсульфонат (PEDOT:PSS). Показано, что пленочные структуры на основе нанопластинок графена, в том числе содержащие наночастицы меди и кобальта, обладают металлическим характером проводимости, а пленочные структуры на основе графена, содержащие наночастицы магнетита, имеют полупроводниковый характер проводимости. Установлено, что формирование пленок на основе графена с наночастицами магнетита в магнитном поле приводит к переходу диэлектрик – металл, что может быть обусловлено спиновыми эффектами в графене. Показано, что адсорбированный кислород в пленочных структурах на основе графена играет роль центров рассеяния, уменьшающих подвижность носителей и, как следствие, проводимость.

Ключевые слова: графен, наночастицы, магнетит, проводимость на постоянном токе.

A. V. Kukhto¹, A. V. Misevich², A. E. Pochtenny²¹Research Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University²Belarusian State Technological University**ELECTRICAL PROPERTIES OF FILM STRUCTURES
BASED ON GRAPHENE**

The paper studied the dc conductivity of films made from graphene nanoplates and graphene nanoplates coated nanoparticles of copper, cobalt, iron oxide (Fe_3O_4 , magnetite) and graphene nanoplates added to poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate polymer (PEDOT:PSS). It is shown that the film structures based nanoplates graphene, including those containing cobalt and copper nanoparticles exhibit metallic character of conductivity and film structures based on graphene containing magnetite nanoparticles possess semiconductor character of conductivity. It was found that the formation of graphene-based films with nanoparticles of magnetite in the magnetic field leads to the insulator-metal transition that may be due to spin effects in graphene. It is shown that oxygen adsorbed in graphene based structures acts as scattering centers and reduce the mobility of carriers and the conductivity.

Key words: graphene, nanoparticles, magnetite, dc conductivity.

Введение. Чистый графен обладает уникальными электрическими, механическими и термическими свойствами, однако получение и использование такого графена трудоемко и дорого [1]. Нанопластинки графена получают намного проще и дешевле с помощью многочисленных химических и физических методов, хотя их свойства значительно уступают свойствам чистого графена. Для улучшения характеристик и получения более разнообразных свойств представляет интерес создание нанопластинок графена, покрытых металлическими либо полупроводниковыми наночастицами [2, 3].

В данной статье представлены результаты электрофизических исследований пленок, приготовленных из графеновых нанопластинок, а также графеновых нанопластинок, покрытых наночастицами меди, кобальта, оксида железа

(Fe_3O_4 , магнетит), и графеновых нанопластинок, добавленных в полимер полиэтилендиокситиофен:полистиролсульфонат (PEDOT:PSS). Цель исследования – изучить особенности проводимости на постоянном токе указанных пленочных структур и определить, какое влияние на их проводимость оказывают состав, условия получения и адсорбированный из окружающей среды кислород.

Основная часть. Нанопластинки графена получены физическим способом и не содержат примесей и химических дефектов. Наночастицы осаждались на поверхность графена в процессе соответствующих реакций в Институте физико-химических проблем БГУ. Наночастицы меди и оксида железа сферические, диаметром 13,5 и 20 нм соответственно. Наночастицы кобальта – двух типов: сферические с диаметром

5 нм и продолговатые длиной до 50–100 нм. Пленки на основе графена толщиной 100–500 нм получены путем осаждения эмульсии в смеси воды и изопропанола на керамические подложки со встречно-штыревой системой никелевых электродов и последующей сушкой в вакуумном шкафу при температуре 100°C. Пленки графена с наночастицами оксида железа формировались как в магнитном поле 0,15 Тл (перпендикулярно поверхности пленки), так и без него. Размер частиц и состав дисперсной фазы исследовался с использованием электронного микроскопа (ТЕМ) LEO-906 с разрешением 0,1 нм при 100 кВ и LEO-1455VP.

Для измерения проводимости пленок на постоянном токе был использован электрометр В7-57/1 (Белвар, Минск). Температурные зависимости проводимости исследовались методом циклической термодесорбции [4] в вакууме (10^{-2} Па). Этот метод заключается в следующем. Сначала образец нагревается в вакууме до определенной температуры, что уменьшает концентрацию адсорбированного пленкой кислорода до некоторого фиксированного уровня. Далее образец охлаждается в вакууме, концентрация кислорода в пленке при снижении температуры остается неизменной. В процессе охлаждения измерялась температурная зависимость проводимости. Потом образец нагревался до более высокой температуры, и измерение повторялось, но уже при меньшей концентрации адсорбированного кислорода в пленке. В результате был получен набор температурных зависимостей проводимости, причем концентрация кислорода в пленке в каждом последующем цикле нагревание-охлаждение становилась меньше, чем в предыдущем.

Микрофотограмма нанопластинок графена представлена на рис. 1. Нанопластинки имеют типичную ширину 10–20 мкм и толщину до 3 нм.

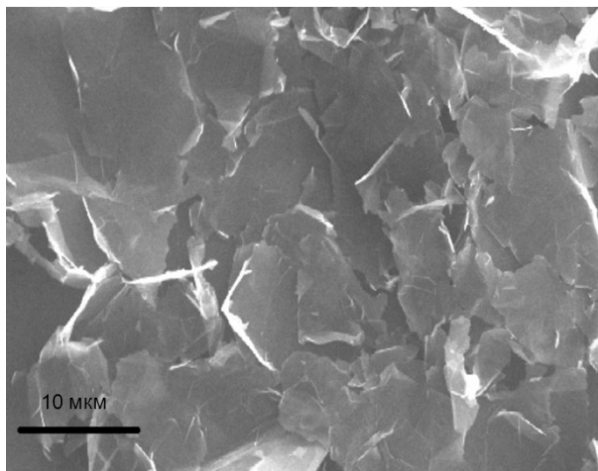


Рис. 1. Микрофотограмма нанопластинок графена

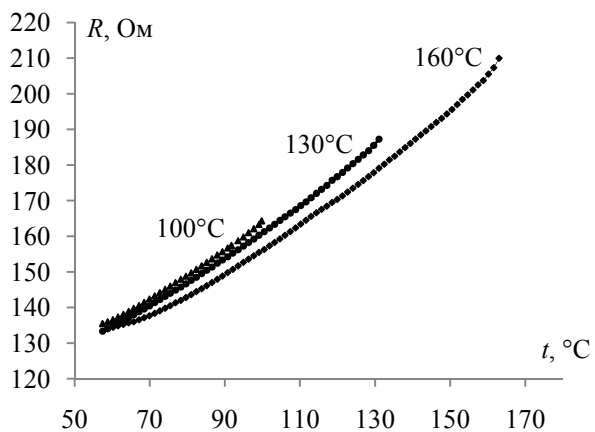
Тестирование пленок методом электронной микроскопии показало, что соответствующие наночастицы физически адсорбируются на поверхности нанопластинок графена хаотически и достаточно равномерно.

Изучить электрические свойства пленочных структур на основе графеновых нанопластинок, добавленных в полимер полиэтилендиокситиофен:полистиролсульфонат (PEDOT:PSS), не удалось, так как их проводимость оказалась очень мала.

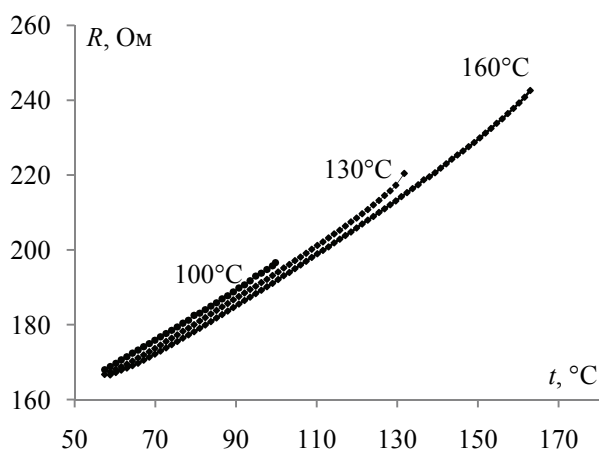
На рис. 2 показаны температурные зависимости сопротивления для пленок на основе графена, графена с наночастицами меди и графена с наночастицами кобальта. Сопротивление пленок графена растет с повышением температуры, причем температурная зависимость сопротивления обладает небольшой суперлинейностью. Такой вид температурной зависимости сопротивления характерен для полуметаллов, содержащих примеси, которые играют роль центров рассеяния носителей заряда. По мере десорбции кислорода сопротивление пленки графена снижается, что может быть обусловлено уменьшением концентрации центров рассеяния и увеличением подвижности носителей заряда.

Зависимости, полученные для пленок на основе графена, графена с наночастицами меди и кобальта, являются линейными в координатах проводимость – температура (рис. 3). Наличие в составе пленок графена наночастиц меди и кобальта существенно не влияет на характер получаемых температурных зависимостей сопротивления и проводимости, а лишь приводит к более слабой температурной зависимости электрофизических свойств, что может быть связано с инъекцией носителей заряда (электронов) из указанных наночастиц, уменьшающей температурный коэффициент сопротивления.

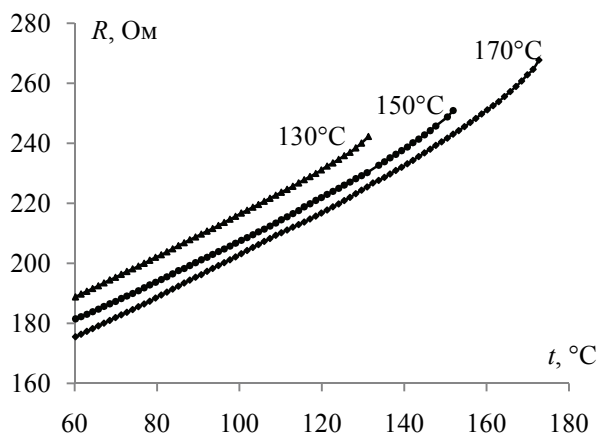
На рис. 4 представлены температурные зависимости проводимости и сопротивления пленок графена с наночастицами оксида железа, сформированными без магнитного поля и в магнитном поле. Эти результаты показывают, что магнитное поле, приложенное к образцам в процессе получения, очень сильно влияет на электрические свойства пленок. Пленки графена с наночастицами оксида железа, сформированные без магнитного поля, имеют активационный характер температурной зависимости проводимости, причем десорбция кислорода приводит к незначительным колебаниям энергии активации проводимости в пределах 0,029–0,034 эВ. Пленки графена с наночастицами оксида железа, сформированные в магнитном поле, имеют температурные зависимости проводимости, подобные тем, что показаны на рис. 3 для пленок на основе графена, графена с наночастицами меди и кобальта.



a



б



в

Рис. 2. Температурные зависимости сопротивления пленки на основе графена (*a*), графена с наночастицами меди (*б*) и кобальта (*в*), измеренные при охлаждении образца в вакууме. Возле каждого графика указана температура начала охлаждения

Таким образом, магнитное поле, действующее в процессе получения пленок с наночастицами оксида железа, вызывает в этих пленках переход диэлектрик – металл.

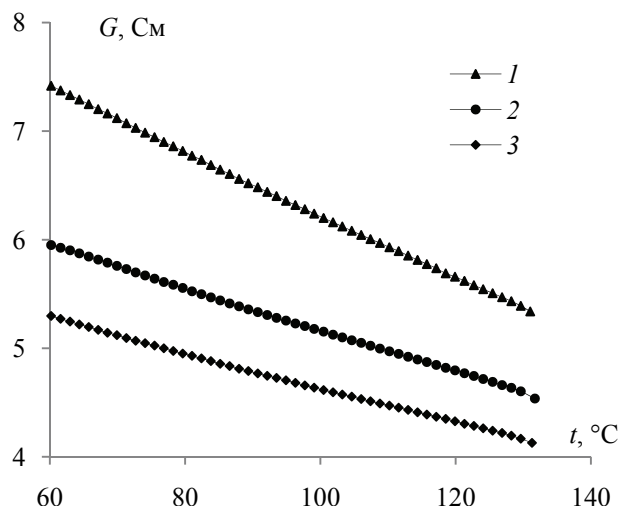
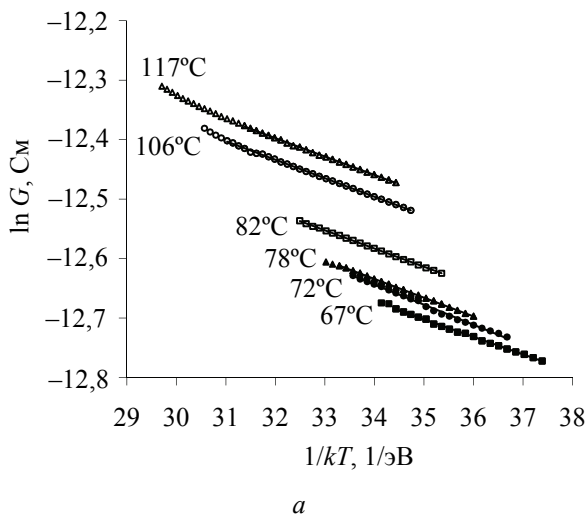
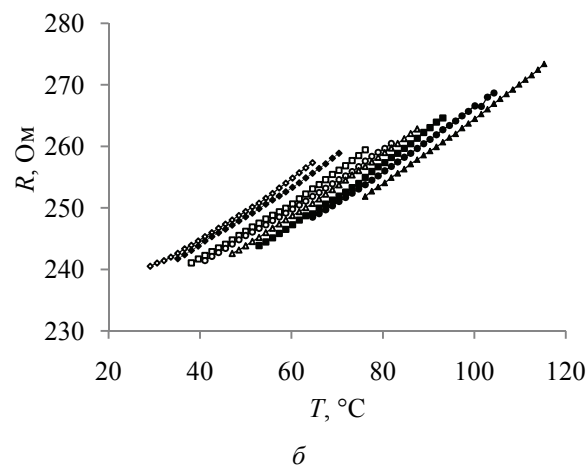


Рис. 3. Температурные зависимости проводимости пленок на основе графена (1), графена с наночастицами меди (2) и кобальта (3), измеренные при охлаждении в вакууме от 130°C



a



б

Рис. 4. Температурные зависимости проводимости и сопротивления пленок графена с наночастицами оксида железа, сформированными без магнитного поля (*a*) и в магнитном поле (*б*), измеренные методом циклической термодесорбции

Физическую природу этого перехода можно объяснить, если учесть, что значения энергии активации проводимости в пленках графен – Fe_3O_4 , полученных в присутствии магнитного поля, характерны для магнетита. Самым простым объяснением наблюдаемого эффекта могло бы быть предположение, что получение пленок графен – Fe_3O_4 в отсутствие магнитного поля приводит к формированию непрерывного проводящего кластера из чешуек графена, тогда как в присутствии магнитного поля формируется структура, состоящая из конгломератов графеновых чешуек, разделенных наночастицами магнетита. Однако изучение методом электронной микроскопии поверхности пленок графен – Fe_3O_4 , полученных в присутствии и отсутствии магнитного поля, показывает, что поверхностная структура этих пленок очень похожа, хотя в присутствии магнитного поля структура становится более рыхлой. Таким образом, предположение о формировании в магнитном поле структуры, состоящей из конгломератов графеновых чешуек, разделенных наночастицами магнетита, не является достаточно вероятным.

Более вероятным объяснением наблюдаемого эффекта является предположение о частичной переориентации электронных спинов в графене под действием магнитного поля. На рис. 5 показаны диаграммы, объясняющие переход диэлектрик – металл в пленках графен – Fe_3O_4 . В пленках, полученных в отсутствие магнитного поля, электроны, переходя через границу раздела графен – Fe_3O_4 , вынуждены преодолевать потенциальный барьер, равный половине ширины запрещенной зоны магнетита, что и приводит к активационному характеру температурной зависимости проводимости. Магнитное поле, действующее в процессе формирования пленки, способствует перераспределению электронов в энергетическом спектре графена. Доля электронов, спины которых сонаправлены с магнитным полем, увеличивается, и эти электроны занимают состояния в полосе энергий в окрестности уровня Ферми. Ширина этой полосы определяется не только тепловой энергией, но и энергией, затрачиваемой магнитным полем на переориентацию спина электрона. Вследствие ферромагнитной природы Fe_3O_4 после снятия магнитного поля перераспределенное состояние электронных спинов сохраняется. В итоге, в пленках графен – Fe_3O_4 , полученных в присутствии магнитного поля, электроны, которые оказались перераспределены в графене на состояния с энергией выше дна зоны проводимости магнетита, обеспечивают электронный безактивационный перенос, а электроны, перераспределенные в графене на уровне ниже потолка валентной зоны магнетита, обеспечивают дырочный безактивационный перенос.

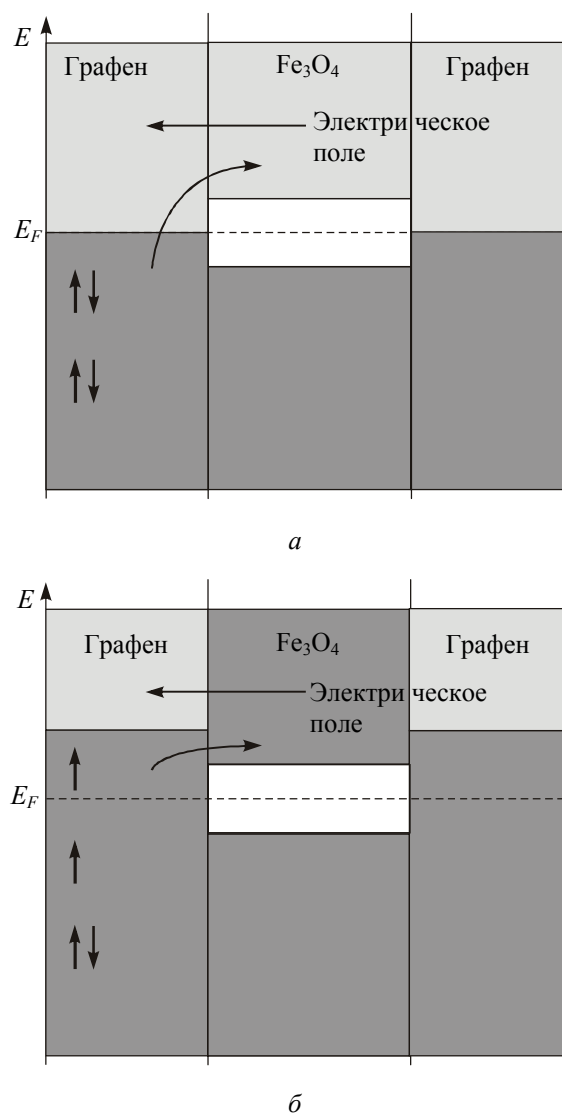


Рис. 5. Схематическое изображение и энергетическая схема нанопластинок графена с наночастицами оксида железа без магнитного поля (а) и в магнитном поле (б)

Заключение. Изучение проводимости на постоянном токе показало, что пленочные структуры на основе нанопластинок графена, в том числе содержащие наночастицы меди и кобальта, обладают металлическим характером проводимости, а пленочные структуры на основе графена, содержащие наночастицы магнетита, имеют полупроводниковый характер проводимости. Установлено, что формирование пленок на основе графена с наночастицами магнетита в магнитном поле приводит к переходу диэлектрик – металл, что может быть обусловлено спиновыми эффектами в графене. Показано, что адсорбированный кислород в пленочных структурах на основе графена играет роль центров рассеяния, уменьшающих подвижность носителей и, как следствие, проводимость.

Литература

1. Geim A. K. Graphene: Status and Prospects // *Science*. 2009. Vol. 324, issue 5934. P. 1530–1534.
2. A study of graphene decorated with metal nanoparticles / K. S. Subrahmanyam [et al.] // *Chemical Physics Letters*. 2010. Vol. 497, issues 1–3. P. 70–75.
3. Graphene non-covalently tethered with magnetic nanoparticles / Robert J. Fullerton [et al.] // *Carbon*. 2014. Vol. 72. P. 192–199.
4. Почтенный А. Е., Мисевич А. В. Влияние адсорбированного кислорода на проводимость пленок фталоцианина свинца // *Письма в ЖТФ*. 2003. Т. 29, вып. 1. С. 56–61.

References

1. Geim A. K. Graphene: Status and Prospects. *Science*, 2009, vol. 324, issue 5934, pp. 1530–1534.
2. Subrahmanyam K. S., Manna Arun K., Pati Swapan K. A study of graphene decorated with metal nanoparticles. *Chemical Physics Letters*, 2010, vol. 497, issues 1–3, pp. 70–75.
3. Fullerton Robert J., Cole Daniel P., Behler Kristopher D., Das Sriya, Irin Fahmida, Parviz Dorsa, Hoque M. N. F., Fan Zhaoyang, Green Micah J. Graphene non-covalently tethered with magnetic nanoparticles. *Carbon*, 2014, vol. 72, pp. 192–199.
4. Pochtenny A. E., Misevich A. V. The effect of adsorbed oxygen on the conductivity of lead phthalocyanine films. *Pis'ma v ZhTF* [Technical Physics Letters], 2003, vol. 29, issue 1, pp. 56–61 (In Russian).

Информация об авторах

Кухто Александр Васильевич – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник. Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета (220030, г. Минск, ул. Бобруйская, 11, Республика Беларусь). E-mail: al.kukhta@gmail.com

Мисевич Алексей Васильевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: misevich@rambler.ru

Почтенный Артем Евгеньевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: pae@tut.by

Information about the authors

Kukhto Aleksandr Vasil'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Leading Researcher. Research Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University (11, Bobruyskaya str., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: al.kukhta@gmail.com

Misevich Aliaksei Vasil'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: misevich@rambler.ru

Pochtenny Artyom Evgen'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: pae@tut.by

Поступила 12.03.2016

УДК 537.312.6

Л. Д. Русак, А. Е. Почтенный, А. В. Мисевич
Белорусский государственный технологический университет

**АДСОРБЦИОННО-РЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ
ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ АММИАКА НА ПЛЕНКИ
ФТОРЗАМЕЩЕННОГО ФТАЛОЦИАНИНА МЕДИ**

Рассмотрены электрофизические свойства пленок фторзамещенного фталоцианина меди с помощью специально собранной установки для определения адсорбционно-резистивного отклика. Определены температурные зависимости отклика пленок на аммиак и их характер. Установлены зависимости отклика пленок от концентрации аммиака в газовой смеси. Описаны параметры работы сенсора, использующего данные пленки для контроля концентрации аммиака. Разработана теоретическая модель адсорбционно-резистивного отклика пленок на аммиак, а также установлена взаимосвязь проводимости пленок от концентрации адсорбированного аммиака.

Ключевые слова: сенсор, фталоцианин, аммиак, прыжковая проводимость, адсорбция.

L. D. Rusak, A. E. Pochtenny, A. V. Misevich
Belarusian State Technological University

**ADSORPTION-RESISTIVE EFFECT WHEN EXPOSING
FILM OF FLUORINE-SUBSTITUTED
COPPER PHTHALOCYANINE TO AMMONIA**

The electrical properties of the films of phthalocyanine fluorine-substituted copper are determined on a specially assembled unit for determination of adsorption-resistive response. The temperature dependences of the response of the films to ammonia and their character were defined. The concentration dependences of the response of the films are fixed from the concentration of ammonia in the gas mixture. The parameters of the sensor using these films to control the concentration of ammonia were described. A theoretical model of the adsorption-resistive response of the films to ammonia, and the relationship of film conductivity on the concentration of adsorbed ammonia were also developed.

Key words: sensor, phthalocyanine, ammonia, hopping conduction adsorption.

Введение. Одним из важнейших направлений в газовом анализе является контроль токсичных неорганических газов: NO_x , H_2S , NH_3 и др.

На процессы переноса электронов в пленках фталоцианинов существенное влияние оказывают адсорбированные на них газы [1–4]. В работе было выдвинуто предположение, что пленки CuPcF селективны для определения концентрации аммиака в газовой смеси.

Основная часть. Фталоцианины рассматриваются как один из наиболее перспективных материалов для определения окислов азота. Чувствительностью к NO_x обладают пленки CuPc (Pc – фталоцианин), PbPc , TiPc_2 и CuTTBPc (тетрагетбутилзамещенный фталоцианин меди). Чувствительны к аммиаку также хеморезисторы на основе фталоцианина индия, легированного ионами кислорода.

На первом этапе необходимо было выяснить, имеется ли отклик у данных пленок на аммиак и каков их характер.

Для определения адсорбционно-резистивного отклика пленок CuPcF , опираясь на результаты [5–7], была собрана установка, представленная на рис. 1.

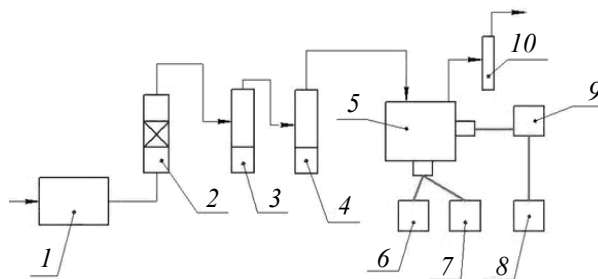


Рис. 1. Установка для измерения адсорбционно-резистивного отклика:

- 1 – микрокомпрессор; 2 – адсорбер с силикагелем; 3 – склянка с раствором аммиака; 4 – склянка с осушающей смесью; 5 – измерительная ячейка; 6 – источник постоянного напряжения; 7 – электрометр В7Э-42; 8 – терморегулятор; 9 – вольтметр; 10 – поглотительная склянка

Принцип работы установки для измерения адсорбционно-резистивного отклика можно описать следующим образом: воздух, подаваемый микрокомпрессором 1, проходит адсорбер с силикагелем 2, где из него удаляются пары воды, и далее продувается через склянку 3 с раствором аммиака, после этого

смесь поступает в склянку 4, где происходит удаление паров воды из газовой смеси (осушение проводится сухой смесью гидроксида натрия и оксида кальция).

Осушенная смесь попадает в измерительную ячейку 5, где осуществляется адсорбция аммиака на исследуемом образце, отходящая газовая смесь проходит склянку 10, где поглощается аммиак раствором соляной кислоты. К измерительной ячейке 5 подключен источник напряжения 6 и электрометр 7 для измерения силы тока в электрической цепи с включенным в нее исследуемым образцом. Регулирование температуры осуществляется терморегулятором 8, непосредственное измерение температуры происходит при помощи термодпары, а термоЭДС измеряется вольтметром 9.

Пленки были получены методом термического распыления в вакууме 10^{-2} Па порошкообразных мишеней с последующим осаждением газообразных продуктов распыления на подложки из полимера со встречно-штыревой системой электродов, находящихся при комнатной температуре.

Измерения адсорбционно-резистивного отклика проводились следующим образом: на образец подавалось напряжение в 15 В, через 60 с через систему начинала продуваться смесь аммиака с воздухом в течение 5 мин, далее продолжал поступать воздух без аммиака. Измерение токов выполнялось с интервалом в 20 с.

В ходе измерений было установлено, что определению аммиака в газовой смеси мешают пары воды, поэтому после склянки с аммиаком была установлена склянка с осушителем (рис. 1), после чего был явно выявлен обратимый отклик, так как выражено изменение тока на присутствие в смеси аммиака (происходит вначале процесс адсорбции, а затем десорбции).

Проводимость материалов зависит от температуры, также температура оказывает влияние на динамику процессов адсорбции/десорбции. Поэтому измерения были произведены при разных температурах, но с одинаковыми концентрациями аммиака для выявления температуры с наибольшей чувствительностью к адсорбции аммиака. Наибольший отклик достигается при 30°C и с ростом температуры уменьшается. Измерения не выполнялись при температуре выше 150°C во избежание деструкции пленок.

Далее производились исследования на выявление изменения отклика пленок в зависимости от концентрации аммиака. Измерения осуществлялись при температуре 50°C для уменьшения влияния колебания температур окружающей среды.

Было установлено, что с ростом концентрации аммиака увеличивается отклик, поэтому проведя большее количество измерений при разных концентрациях аммиака, можно получить зависимость максимального отклика пленки (при этом наблюдается минимальное значение тока) от концентрации аммиака.

В ходе измерения адсорбционно-резистивного отклика пленок от концентрации раствора аммиака аппроксимацией была получена зависимость (1), достоверность аппроксимации – $R^2 = 0,927$:

$$y = 0,392x^{0,306}, \quad (1)$$

где $y = I_0 / I$, $x = C_p$ (здесь C_p – концентрация аммиака в растворе, мг/л).

Из выражения (1) находим:

$$(C_p)^{0,306} = \frac{2,551I_0}{I}, \quad (2)$$

где I_0 – значение тока в начальный момент поступления в систему аммиака, А; I – значение тока через 5 мин после начала поступления в систему аммиака, А.

Теперь необходимо перейти от концентрации аммиака в растворе к концентрации аммиака в газовой смеси.

Для определения содержания аммиака в газовой смеси была использована методика определения концентрации аммиака фотоколориметрическим методом с реактивом Несслера. Методика основана на образовании окрашенного в желтый цвет соединения при взаимодействии аммиака с реактивом Несслера и последующем измерении содержания аммиака фотоколориметрическим методом.

Зависимость оптической плотности от содержания аммиака выражается следующим образом:

$$D = 0,072m - 0,021, \quad (3)$$

где m – содержание аммиака в пробе, мкг.

Концентрация аммиака в газовой смеси определяется по формуле

$$C = \frac{1,2m}{V_0}, \quad (4)$$

где коэффициент 1,2 получен отношением объема применяемого поглотительного раствора (6 мл) к объему пробы, используемой для определения содержания аммиака (5 мл); V_0 – объем газовой пробы, дм^3 , приведенный к нормальным условиям по формуле

$$V_0 = \frac{V \cdot 273 \cdot P}{760 \cdot (273 + t)}, \quad (5)$$

где V – объем газа при условиях отбора, дм^3 ; P – атмосферное давление, мм рт. ст.; t – температура газа, $^{\circ}\text{C}$.

Измерив концентрации аммиака в газовой смеси при заданных концентрациях растворов аммиака, аппроксимацией ($R^2 = 0,924$) была получена зависимость, выразив из которой значение концентрации аммиака в растворе, получим:

$$C_p = e^{(0,553C_r + 1,190)}, \quad (6)$$

где C_r – концентрация аммиака в газовой смеси, $\text{мг}/\text{м}^3$.

Далее подставив формулу (6) в выражение (2), имеем:

$$\left(e^{(0,553C_r + 1,190)}\right)^{0,306} = \frac{2,551I_0}{I}. \quad (7)$$

Преобразовав выражение (7), получим зависимость концентрации аммиака в газовой смеси от отклика пленки:

$$C_r = 5,908 \ln\left(\frac{2,551I_0}{I}\right) + 3,418. \quad (8)$$

Однако при проведении измерений в условиях, отличающихся от условий измерений, описанных в данной работе, в уравнение (8) необходимо вводить поправочные коэффициенты.

На следующем этапе производилось теоретическое установление связи между концентрацией адсорбированных молекул и электропроводностью пленки.

В пленках фторзамещенного фталоцианина меди реализуется прыжковый механизм проводимости, и в интервале температур от комнатной и примерно до 150°C проводимость пленок фторзамещенного фталоцианина меди осуществляется по собственным состояниям. Примесные уровни, обусловленные адсорбированным из атмосферы кислородом, лежат по шкале энергий ниже, чем собственные [8].

Адсорбция аммиака увеличивает электрическое сопротивление пленок (повышение концентрации аммиака увеличивает адсорбционно-резистивный отклик) фторзамещенного фталоцианина меди (адсорбционно-резистивный отклик $I_0/I = R/R_0$, где I – измеряемая сила тока в пленке; R – сопротивление пленки; индекс 0 соответствует отсутствию аммиака в окружающей среде), что было установлено выше.

Основываясь на модели прыжковой проводимости в данных пленках, рассмотрев различные подходы к описанию проводимости в пленках, был выбран один вариант, наиболее подходяще описывающий экспериментальные результаты.

Данный вариант модели представлен на рис. 2 и 3.

Описывая зависимости, показанные на рис. 3, необходимо отметить, что адсорбция аммиака увеличивает сопротивление пленки фторзамещенного фталоцианина меди, причем тем больше, чем больше концентрация адсорбированного аммиака, при этом уменьшение содержания адсорбированного кислорода в пленке, что происходит при ее нагревании, снижает адсорбционно-резистивный отклик.

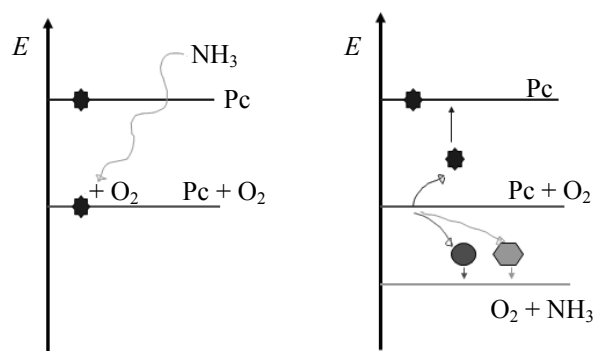


Рис. 2. Электронная энергетическая диаграмма адсорбции аммиака

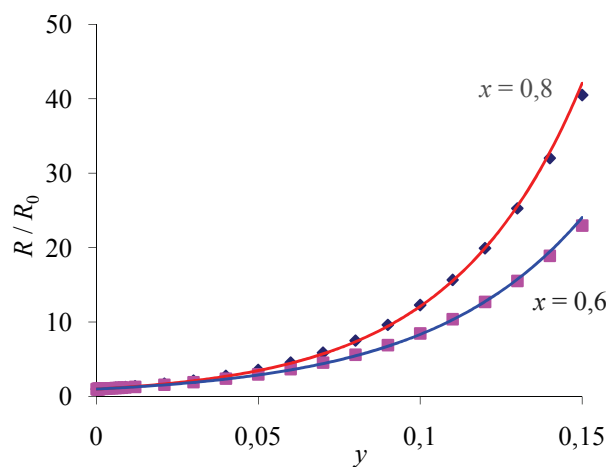


Рис. 3. Расчетная зависимость относительного изменения сопротивления пленки от относительной концентрации адсорбированного аммиака:
 x – относительная концентрация адсорбированного O_2 в пленке;
 y – относительная концентрация NH_3 в пленке

Залючение. Проводимость пленок CuPcF изменяется в случае присутствия в газовой смеси аммиака; проводимость пленок CuPcF зависит от температуры и концентрации аммиака в газовой смеси; наибольший отклик достигается при комнатных температурах, что позволяет в конструкции сенсора обойтись без нагревательного элемента; на основе данных пленок возможно разработать газовые сенсоры для

контроля концентрации или превышения установленного значения концентрации аммиака в газовых смесях; измерения сенсором на основе пленок CuPcF можно производить как пе-

риодически, так и непрерывно; для данных пленок разработана теоретическая модель, которая хорошо отражает полученные экспериментальные данные.

Литература

1. Влияние адсорбированного кислорода на проводимость пленок композита фталоцианин меди – полистирол / А. Е. Почтенный [и др.] // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 56–59.
2. Проводимость пленок фталоцианина меди и его композита с полистиролом в присутствии адсорбированного кислорода / А. Е. Почтенный [и др.] // 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. 329–332.
3. Почтенный А. Е., Русак Л. Д. Расчет параметров прыжковой проводимости в композитных пленках фталоцианин меди – полистирол // Сборник научных работ 63-й научно-технической конференции студентов и магистрантов 23–28 апреля 2012 г. Минск: БГТУ, 2012. С. 28–31.
4. Русак Л. Д., Почтенный А. Е. Влияние ширины примесной зоны на энергию активации проводимости органического полупроводника // Сборник научных работ 64-й научно-технической конференции студентов и магистрантов 22–27 апреля 2013 г. В 3 ч. Ч. 2. Минск: БГТУ, 2013. С. 35–39.
5. Прыжковая проводимость во фталоцианине меди и композиционных структурах на его основе / А. Е. Почтенный [и др.] // Физика твердого тела. 1996. Т. 38, № 8. С. 2592–2601.
6. Misevich A. V., Pochtenny A. E. The effect of gas adsorption on hopping conduction in metallophthalocyanines // *Electron Technology*. 2000. Vol. 33, no. 1/2. P. 167–170.
7. Почтенный А. Е., Мисевич А. В. Влияние адсорбированного кислорода на проводимость пленок фталоцианина свинца // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. С. 56–61.
8. Индексация механизма проводимости в конденсированных пленках методом циклической термодесорбции / А. Е. Почтенный [и др.] // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 83–87.

References

1. Pochtenny A. E., Misevich A. V., Dolgy V. K., Rusak L. D. Effect of adsorbed oxygen on the conductivity of the composite film of copper phthalocyanine – polystyrene. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2013, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 56–59 (In Russian).
2. Pochtenny A. E., Misevich A. V., Dolgy V. K., Rusak L. D. [The conductivity of copper phthalocyanine films and its composite with polystyrene in the presence of adsorbed oxygen]. *Materialy Mezhdunarodnoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii (Avtomaticheskiiy kontrol' i avtomatizatsiya proizvodstvennykh protsessov)* [Materials of the International Scientific and Technical Conference (Automatic control and automation of production processes)]. Minsk, 2012, pp. 329–332 (In Russian).
3. Pochtenny A. E., Rusak L. D. Calculation of hopping conduction parameters in the composite films of copper phthalocyanine – polystyrene. *Sbornik nauchnykh rabot 63-y nauchno-tekhnicheskoy konferentsii studentov i magistrantov 23–28 aprelya 2012 g.* [Collection of scientific works of the 63rd scientific conference of students and undergraduates 23–28 April 2012]. Minsk, BGTU Publ., 2012, pp. 28–31 (In Russian).
4. Rusak L. D., Pochtenny A. E. Influence of the impurity band width in the conductivity activation energy of an organic semiconductor. *Sbornik nauchnykh rabot 64-y nauchno-tekhnicheskoy konferentsii studentov i magistrantov 22–27 aprelya 2013 g.* [Collection of scientific works of the 64rd scientific conference of students and undergraduates 22–27 April 2013]. Minsk, BGTU Publ., 2013, pp. 35–39 (In Russian).
5. Pochtenny A. E., Sagaydak D. I., Fedoruk G. G., Misevich A. V. Hopping conductivity of copper phthalocyanine and its composite structures. *Fizika tverdogo tela* [Solid State Physics], 1996, vol. 38, no. 8, pp. 2592–2601 (In Russian).
6. Misevich A. V., Pochtenny A. E. The effect of gas adsorption on hopping conduction in metallophthalocyanines. *Electron Technology*, 2000, vol. 33, no. 1/2, pp. 167–170.
7. Pochtenny A. E., Misevich A. V. Effect of adsorbed oxygen on the conductivity of lead phthalocyanine films. *Pis'ma v ZhTF* [Technical Physics Letters], 2003, vol. 29, pp. 56–61 (In Russian).

8. Pochtenny A. E., Misevich A. V., Klimovich S. A., Kovalionok A. O., Dolgy V. K., Kukhto A. V. Identification of the conduction mechanism in condensed films by cyclic thermal desorption. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 83–87 (In Russian).

Информация об авторах

Русак Леонид Дмитриевич – магистрант кафедры промышленной экологии. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: profleometal@mail.ru

Почтенный Артем Евгеньевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: pae@tut.by

Мисевич Алексей Васильевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: misevich@rambler.ru

Information about the authors

Rusak Leonid Dmitrievich – Master's degree student, the Department of Industrial Ecology. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: profleometal@mail.ru

Pochtenny Artyom Evgen'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: pae@tut.by

Misevich Aliaksei Vasil'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: misevich@rambler.ru

Поступила 07.03.2016

УДК 539.211:539.1.06

О. Г. Бобрович¹, И. С. Ташлыков²¹Белорусский государственный технологический университет²Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка**ФОРМИРОВАНИЕ ПОКРЫТИЯ НА КРЕМНИИ НАНЕСЕНИЕМ Cr
В УСЛОВИЯХ ИОННОГО АССИСТИРОВАНИЯ**

В представленной работе мы исследовали состав и распределение элементов в покрытии, нанесенном на пластины (100) Si в условиях ионного ассистирования при комнатной температуре, а также химические связи элементов в поверхностном слое кристаллов кремния при нанесении Cr-покрытия. Элементный состав покрытия и распределение элементов по глубине изучали с применением резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия и вторичной ионной масс-спектрометрии. Установлено, что покрытие однородно по составу по всей толщине. В состав покрытий на кремнии входят атомы осаждаемого металла Cr, технологических примесей C, O и Al, а также Si в результате встречной диффузии из подложки в покрытие. Рост ускоряющего напряжения для ассистирующих ионов Cr⁺ от 5 до 10 кВ приводит к увеличению толщины покрытия при одинаковом времени модифицирования образцов кремния. Рассчитанная средняя скорость осаждения покрытия при времени модифицирования 1 ч составляла 2,3–2,8 нм/мин и уменьшалась до значений 0,9–1,0 нм/мин при времени модифицирования 6 ч. В поверхностном слое покрытия присутствуют оксиды CrO и SiO, карбиды CrC и SiC, углеводороды CH, молекулы C₂ и соединения CrH, CrH₂, а также атомы Cr, Si, C, O, Al.

Ключевые слова: Cr-покрытия, кремний, элементный состав, химические связи элементов в покрытии.

O. G. Bobrovich¹, I. S. Tashlykov²¹Belarusian State Technological University²Maxim Tank Belarusian State Pedagogical University**THE FORMATION OF COAT ON SILICON AT DEPOSITION OF Cr
IN CONDITIONS OF ION ASSISTING**

In the present study we investigated the composition and distribution of elements in the coating deposited on the plate (100) Si in conditions of ion assisting at room temperature, as well as chemical bonds of elements in the surface layer of silicon crystals at deposition of the Cr-coating. The elemental composition of the coating and distribution of elements in depth to explore, using Rutherford backscattering of helium ions and secondary ion mass spectrometry. It is found that the coating is uniform in composition throughout its thickness. The composition of coatings on silicon atoms are included in the deposited metal Cr, technological impurities C, O, Al, and Si as a result of counter-diffusion from the substrate into the coating. Increasing the accelerating voltage for assisting Cr⁺ ions from 5 to 10 kV results to an increase in the thickness of the coating at the same time modifying the silicon samples. The calculated average deposition rate of the coating at the time of modification 1 h was 2.3–2.8 nm/min and decreases to 0.9–1.0 nm/min at 6 h time modification. The surface layer of the coating contain carbide CrC, SiC, oxides CrO, SiO, CH hydrocarbons, C₂ molecules, CrH and CrH₂ compounds, as well as Cr, Si, C, O Al atoms.

Key words: Cr-coatings, silicon, elemental composition, chemical bonds of elements in the surface.

Введение. Нанесение металлических покрытий в условиях ионного ассистирования проводили с использованием вакуумного резонансного плазменно-дугового ионного источника. Этот тип ионного источника с электродами, изготовленными из материала наносимого покрытия, позволяет одновременно получать регулируемые потоки ионов металла J_i и нейтральных атомов J_A осаждаемого металла.

В данной работе для создания покрытий применялся процесс нанесения Cr-покрытия на

поверхность кремния в условиях ассистирования ускоренными ионами Cr⁺ при ускоряющем напряжении 5 и 10 кВ. Время модифицирования кремния ионами Cr⁺ составляло 1, 3, 6 ч, что позволяло получить различные ионные потоки при нанесении Cr-покрытий. Вакуум в процессе осаждения покрытий в рабочей камере достигал $\sim 10^{-2}$ Па. Отношение плотности ионного потока к плотности нейтрального потока J_i / J_A составляло 0,02–0,03, что соответствовало росту покрытия на кремнии [1, 2].

Для элементного анализа формируемых структур покрытие – подложка распределения элементов по глубине применялись методы резерфордовского обратного рассеяния (РОР) ионов гелия с энергией $E_0 = 2$ МэВ, геометрией рассеяния $\theta_1 = 0^\circ$, $\theta_2 = 12^\circ$, $\theta = 168^\circ$, компьютерного моделирования спектров РОР по программе RUMP [3] и вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС). Энергетическое разрешение детектора в методе РОР составляло 25 кэВ, а глубинное разрешение в кремнии – 22 нм. Энергия первичных ионов Ag^+ в методе ВИМС для послыонного распыления мишени и анализа состава твердого тела по глубине была 4 кэВ.

Основная часть. Экспериментальные спектры РОР ионов гелия от кремниевых образцов, обработанных ионами Cr^+ с одновременным осаждением покрытий Cr, показаны на рис. 1.

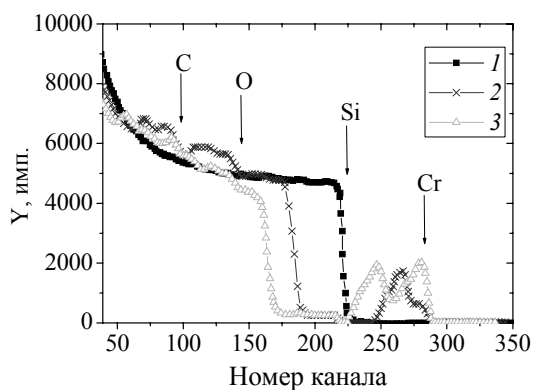
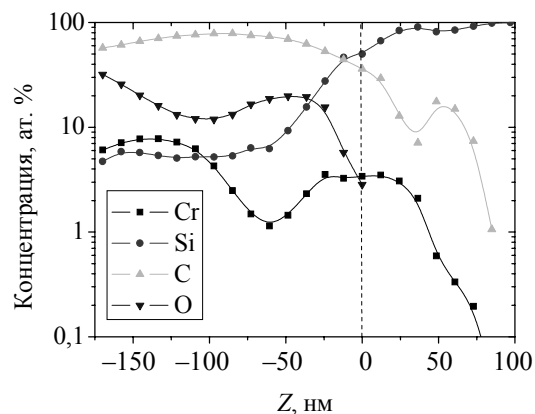


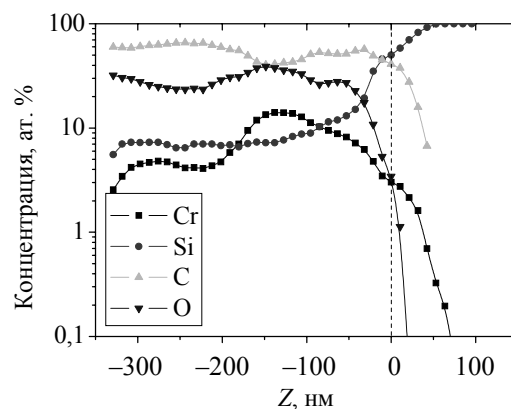
Рис. 1. Энергетические спектры обратного рассеяния ионов гелия с $E_0 = 2$ МэВ от структур Cr – Si, модифицированных ионно-ассистируемым нанесением Cr-покрытий при ускоряющем напряжении 10 кВ и времени модифицирования: 2 – 3 ч; 3 – 6 ч. 1 – исходный образец кремния

Вертикальными стрелками отмечены номера каналов, которые связаны с энергиями рассеяния ионов гелия на атомах соответствующих элементов, локализованных на поверхности образцов. В числе элементов, находящихся в поверхностном слое исследуемых материалов, на спектрах идентифицируются хром, а также C, O, Si. Сдвиг сигнала от кремния в область меньших номеров каналов на спектрах 2 и 3 РОР, приведенных на рис. 1, свидетельствует о том, что на поверхности кристалла кремния образуется покрытие. Аналогичные закономерности по элементному составу и росту покрытий на кремнии наблюдались на спектрах РОР от образцов Si, модифицированных ионами Cr^+ при ускоряющем напряжении 5 кВ и времени модифицирования 1, 3, 6 ч.

Концентрационные глубинные профили элементов в структурах покрытие – Si, полученные компьютерным моделированием спектров РОР ионов гелия, представлены на рис. 2.



а



б

Рис. 2. Распределение элементов в структуре Cr – Si после ионно-ассистируемого нанесения Cr на кремний при ускоряющем напряжении: а – 5 кВ; б – 10 кВ.

Время модифицирования – 3 ч

Пунктирной линией выставлена поверхность исходной подложки кристалла кремния, которая является границей между покрытием и подложкой, используя специально разработанную методику введения ксенонового маркера [4]. На концентрационных профилях идентифицируемых элементов в структурах покрытие – Si (рис. 2) обнаруживается эффект глубинного проникновения хрома в кремний. Средний проективный пробег однозарядных ионов хрома в кремнии R_p с учетом продольного разброса пробегов ΔR_p по программе TRIM дает значения $R_p \pm \Delta R_p = (8,4 \pm 3,8)$ нм (для $U = 5$ кВ) и $R_p \pm \Delta R_p = (13,4 \pm 5,6)$ нм (для $U = 10$ кВ). Используемый ионный источник работает без электромагнитной сепарации, и поэтому при расчете ионного потока нужно учитывать, что зарядовый спектр ионного пучка, эмитируемого источником, характеризуется наличием ионов с разным зарядом [5]. Расчет среднего проективного пробега для двух- и трехзарядных ионов хрома в кремний показывает, что глубина проникновения хрома в кремний выше проективного пробега ионов.

Наряду с хромом, анализ энергетических спектров ионов гелия от модифицированных методом ионно-ассистируемого нанесения образцов кремния в созданных структурах выявил высокие концентрации кислорода и углерода (таблица).

Слоевые концентрации элементов, рассчитанные по спектрам РОР от образцов (100) Si, модифицированных в различных условиях

Подложка	Режим обработки	U, кВ	t, ч	Слоевые концентрации (Nt), 10 ¹⁷ ат./см ²		
				Cr	C	O
(100) Si	Исходный образец Si	—	—	—	—	—
(100) Si	Ионно-ассистируемое нанесение Cr	5	1	0,2	6,1	1,4
		5	3	0,6	8,6	2,0
		5	6	2,6	12,8	7,5
		10	1	0,5	6,3	2,9
		10	3	2,0	15,3	7,4
		10	6	10,2	2,9	3,5

Анализ данных, представленных в таблице, свидетельствует о том, что относительные слоевые концентрации углерода (Nt)_C/(Nt)_{Cr} и кислорода (Nt)_O/(Nt)_{Cr} уменьшаются с увеличением времени модифицирования кремния.

Глубина проникновения хрома в кремний больше при ускоряющем напряжении 5 кВ, чем при ускоряющем напряжении 10 кВ. Это объясняется различием в значениях плотности энергии, выделенной (ПЭВ) в каскаде атомных столкновений при нанесении покрытия, которые составляли 0,42 эВ/атом для ускоряющего напряжения 5 кВ и 0,25 эВ/атом для 10 кВ. Аналогичная зависимость глубинного проникновения ионов от ПЭВ наблюдалась нами также ранее в выполненной работе [6].

Толщина покрытия с увеличением времени модифицирования, как и следовало ожидать, растет. При времени облучения 1 ч толщина покрытия составляет ~150 нм (U=5 кВ) и ~175 нм (U=10 кВ), увеличиваясь при 6 ч модифицирования до ~320 нм (U=5 кВ) и до ~400 нм (U=10 кВ). Как следует из сравнения концентрационных профилей, снижение ускоряющего напряжения для ассистирующих ионов Cr⁺ от 10 до 5 кВ приводит к уменьшению толщины покрытия при одинаковом времени модифицирования образцов кремния. Это связано с различной интенсивностью процессов распыления осаждаемого покрытия при различных энергиях ассистирующих ионов и активацией миграционных процессов в результате управляемого энерговыделения в каскаде атомных столкновений при нанесении покрытия

в условиях ассистирования ионами Cr⁺. Средняя скорость осаждения покрытия при времени модифицирования 1 ч составляла 2,3–2,8 нм/мин и уменьшалась до значений 0,9–1,0 нм/мин при времени модифицирования 6 ч.

Для уточнения данных моделирования спектров РОР при исследовании Cr/Si-структур использовали метод ВИМС, данные которого приведены на рис. 3. Следует отметить, что для построения концентрационных профилей с применением методов ВИМС и РОР использовались фрагменты одного образца.

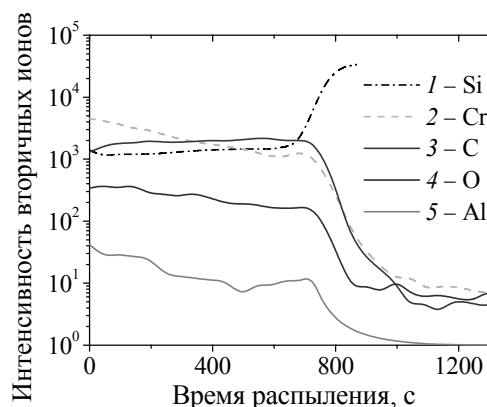


Рис. 3. Профили концентрации компонентов в Zr/Si-структуре, полученные с помощью метода ВИМС (время осаждения покрытия – 6 ч)

Результаты метода ВИМС так же, как и РОР, показывают, что содержание Cr постоянно по всему покрытию, увеличиваясь на ~10% вблизи границы раздела покрытие – подложка. Анализ результатов метода ВИМС также подтверждает высокое содержание C и O в покрытии. Используя коэффициенты относительной чувствительности, уровни элементов C и O на рис. 3 должны быть увеличены в 5 раз. Это позволяет говорить, что относительная концентрация C и O, полученная методом ВИМС, сравнима с данными, полученными на основе РОР.

На спектрах РОР наблюдается постоянный высокий уровень C и O по всему покрытию и содержание Si, почти равномерное по толщине покрытия с концентрацией ~4–5%, которая слегка падает у поверхности покрытия.

Данные метода РОР и ВИМС позволяют предположить о возможном соединении кислорода и углерода с цирконием в форме оксида и карбида (например, ZrO, ZrC). Также можно констатировать, что независимые методы анализа состава образцов позволяют получать данные, которые удовлетворительно подтверждают друг друга. Данные масс-спектрометрии вторичных ионов представлены на рис. 4.

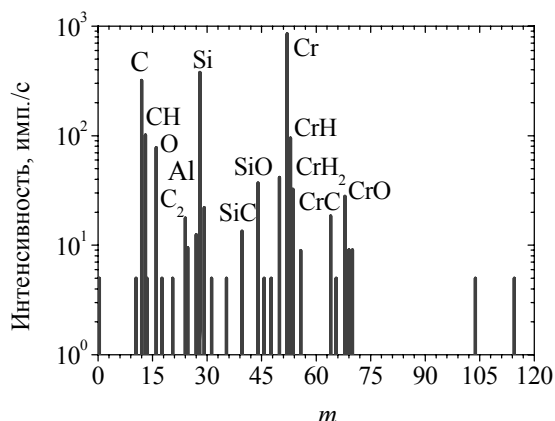


Рис. 4. Масс-спектр вторичных ионов, полученный от Zr/Si-структуры

Экспериментальный масс-спектр от Cr/Si-структуры показывает наличие в поверхностном слое покрытия оксидов CrO и SiO, карбидов CrC и SiC, углеводородов CH, молекул C₂ и соединений CrH, CrH₂, а также атомов Cr, Si, C, O, Al.

Наличие водорода и его распределение по глубине в покрытии определялось нами ранее в прямых экспериментах с применением резонансной (1,86 кэВ) ядерной реакции при взаимодействии ионов азота с водородом ¹H(¹⁵N,αγ)¹²C путем амселевского сканирования энергии ионов N⁺ в интервале 6,38–7,00 МэВ [7]. Анализ данных

масс-спектрометрии вторичных ионов обнаруживает содержание водорода, находящегося в связанном состоянии в поверхностном слое покрытия на кремнии, что подтверждает данные резонансной ядерной реакции.

Заключение. В результате выполненной работы с применением методов РОР и ВИМС установлено, что в состав покрытий на кремнии входят атомы осаждаемого металла Cr, технологических примесей C, O и Al, а также Si вследствие встречной диффузии из подложки в покрытие.

В поверхностном слое покрытия присутствуют оксиды CrO и SiO, карбиды CrC и SiC, углеводородные соединения CH, молекулы C₂ и соединения CrH, CrH₂. При росте ускоряющего напряжения для ассистирующих ионов Cr⁺ от 5 до 10 кВ толщина покрытий увеличивается при одинаковом времени модифицирования образцов кремния, что связано с различной интенсивностью процессов распыления осаждаемого покрытия при различных энергиях ассистирующих ионов. Рассчитанная средняя скорость осаждения покрытия при времени модифицирования 1 ч составляла 2,3–2,8 нм/мин и уменьшалась до значений 0,9–1,0 нм/мин при времени модифицирования 6 ч, что может быть обусловлено активацией миграционных процессов элементов покрытия в результате управляемого энергодележения в процессе его нанесения.

Литература

1. 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.
2. Бобрович О. Г., Ташлыков И. С. Формирование на графите металлосодержащих покрытий в условиях ионного ассистирования // *Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы 5-й Междунар. конф., Минск, 6–9 окт. 2003 г.* / Белорус. гос. ун-т. Минск, 2003. С. 326–328.
3. Doolittle L. R. A semiautomatic algorithm for Rutherford backscattering analysis // *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* 1986. Vol. B15. P. 227–238.
4. Бобрович О. Г., Ташлыков И. С., Глухатаренко 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.
5. Multiplespecies ion beams from titanium-hafnium alloy cathodes in vacuum are plasmas / J. Sasaki [et al.] // *J. Appl. Phys.* 1993. Vol. 73. P. 7184–7187.
6. On the efficiency of deposited energy density for ion beam mixing processes with ions implanted during and after thin metal film deposition / I. S. Tashlykov [et al.] // *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* 1993. Vol. B80/81. P. 98–101.
7. Изучение ядерно-физическими методами металлосодержащих (Ti, Co)-покрытий, осажденных методом ионного ассистирования на кремний / О. Г. Бобрович [и др.] // *Физика и химия обработки материалов*. 2006. № 1. С. 54–58.

References

1. 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, pp. 1–6.
2. Bobrovich O. G., Tashlykov I. S. [Formation of metalliferous coats on graphite by means of ion assisted deposition]. *Materialy 5-y mezhdunarodnoy konferentsii (Vzaimodeystviye izlucheniya s tverдыm телом)* [Materials of the 5-th International Conference (Interaction of Radiation with Solid)]. Minsk, 2003, pp. 326–328 (In Russian).

3. Doolittle L. R. A semiautomatic algorithm for Rutherford backscattering analysis. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, 1986, vol. B15, pp. 227–238.
4. Bobrovich O. G., Tashlykov I. S., Gluhatarenko T. I. The study of the phase boundary in the structure Ti – Si using marker Xe. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physical-mathematical sciences and informatics, 2005, issue XIII, pp. 90–92 (In Russian).
5. Sasaki J., Sugiyama K., Yao X., Brown I. Multiplespecies ion beams from titanium-hafnium alloy cathodes in vacuum are plasmas. *J. Appl. Phys.*, 1993, vol. 73, pp. 7184–7187.
6. Tashlykov I. S., Belyi I. M., Bobrovich O. G., Kalbitzer S., Meyer O., Wolf G. K., Enders B. On the efficiency of deposited energy density for ion beam mixing processes with ions implanted during and after thin metal film deposition. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, 1993, vol. B80/81, pp. 98–101.
7. Bobrovich O. G., Tashlykov I. S., Tul'ev V. V., Barayshuk S. M. The study of nuclear-physical methods of metal (Ti, Co)-coating deposited by ion-assisting of on silicon. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and Chemistry of Materials Treatment], 2006, no. 1, pp. 54–58 (In Russian).

Информация об авторах

Бобрович Олег Георгиевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Сverdlova, 13а, Республика Беларусь). E-mail: olegbobrovich@belstu.by

Ташлыков Игорь Серафимович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики. Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка (220050, г. Минск, ул. Советская, 18, Республика Беларусь). E-mail: tashl@bspu.unibel.by

Information about the authors

Bobrovich Oleg Georgievich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: olegbobrovich@belstu.by

Tashlykov Igor Serafimovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Physics. Maxim Tank Belarusian State Pedagogical University (18, Sovetskaya str., 220050, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tashl@bspu.unibel.by

Поступила 07.03.2016

УДК 539.1.06:539.23.234

В. В. Тульев¹, И. С. Ташлыков²¹Белорусский государственный технологический университет²Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка**МИКРОТВЕРДОСТЬ ПОВЕРХНОСТИ АЛЮМИНИЯ И СПЛАВА АК9,
МОДИФИЦИРОВАННОЙ ОСАЖДЕНИЕМ ПОКРЫТИЙ Mo И W
В УСЛОВИЯХ ИОННОГО АССИСТИРОВАНИЯ**

На подложки из алюминия и сплава АК9 наносились тонкие пленки на основе металлов (молибден, вольфрам) методом ионно-ассистируемого осаждения в вакууме. Для реализации этого метода использовался ионный источник, создающий плазму вакуумного электродугового разряда, в которой одновременно генерируются положительные ионы и нейтральная фракция из материала электродов. Ионно-ассистируемое нанесение покрытий осуществлялось при ускоряющих напряжениях 7, 15, 20 кВ. Плотность ионного тока составляла ~4–6 мкА/см², а интегральный поток облучающих ионов достигал $2 \cdot 10^{16}$ ион/см². В рабочей камере в процессе осаждения покрытий поддерживался вакуум при давлении $\sim 10^{-2}$ Па.

Измерение микротвердости и глубины проникновения индентора для исходных и модифицированных образцов производилось на приборе ПМТ-3 по средней диагонали отпечатка при нагрузке на алмазную пирамиду Виккерса от 1 до 50 г.

Установлено, что микротвердость модифицированной поверхности образцов из Al увеличивается. Причинами наблюдаемого упрочнения являются введение в матрицу нерастворимых элементов, формирование в приповерхностных слоях структурных радиационных дефектов и включений силицидов, карбидов и оксидов. Для поверхности сплава АК9, модифицированной при ускоряющей разности потенциалов 7 кВ, отмечается уменьшение микротвердости. Причинами разупрочнения являются радиационно-индуцированный распад твердого раствора и растворение метастабильных выделений. С ростом ускоряющей разности потенциалов микротвердость поверхности сплава увеличивается. Упрочнение происходит вследствие частичного растворения выделений в сплаве, образования новых зон Гинье – Престона и метастабильных выделений.

Ключевые слова: ионно-ассистируемое осаждение, алюминий, сплав, тонкие пленки, молибден, вольфрам, микротвердость.

V. V. Tul'ev¹, I. S. Tashlykov²¹Belarusian State Technological University²Maxim Tank Belarusian State Pedagogical University**MICROHARDNESS OF ALUMINUM SURFACE AND AK9 ALLOY,
OBTAINED AT DEPOSITION OF Mo AND W COATINGS
UNDER ION-ASSISTING CONDITIONS**

Thin films on the basis of metals (molybdenum, tungsten) were applied on substrates from aluminum and an alloy of AK9 using the method of the ion-assisted deposition in vacuum. The ionic source of the vacuum arc plasma was used for implementation of this method. The ion-assisted deposition was accelerated through potential difference 7, 15, 20 kV. The density of ionic current at the deposition of the covering has changed in the range of 4 to 6 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$, and the ion fluence has been of $2 \cdot 10^{16}$ cm^{-2} . The deposition of the covering has occurred at the vacuum in the working chamber $\sim 10^{-2}$ Pa.

The measurement of microhardness and depth of penetration of an indenter was made for initial and modified exemplars on the PMT-3 gauge.

It is established that the microhardness of the modified surface of samples from Al increases. The reasons for the observed hardening are the introduction to the substrates of insoluble elements, the formation of structural radiation defects in the near-surface layers and the inclusions of silicides, carbides and oxides. The decrease of microhardness is observed for AK9 alloy surface at the accelerating potential difference of 7 kV. The reason for weakening is the radiation-induced dissolution of the solid solution and the dissolution of metastable inclusions. The microhardness of the alloy surface increases with the growing accelerating potential difference. The hardening occurs due to subsolution of inclusions in the alloy, the formation of new Guinier – Preston zones and the metastable inclusions.

Key words: ion-beam assisted deposition, aluminum, alloy, thin film, molybdenum, tungsten, microhardness.

Введение. В результате ионно-лучевой обработки материалов и изделий происходит изменение композиционного состава и структурно-фазового состояния их поверхности, что может приводить к изменению таких ее механических свойств, как твердость, износостойкость, коэффициент трения и др. [1, 2].

В настоящей работе исследовалось влияние ионно-ассистируемого осаждения тонких молибденовых и вольфрамовых пленок на микротвердость поверхности алюминия и сплава алюминия АК9. Метод ионно-ассистируемого осаждения позволяет в процессе осаждения пленки облучать поверхность формируемой структуры ускоренными ионами осаждаемого материала. При этом происходит перемешивание атомов на поверхности подложки с атомами осаждаемого покрытия, в результате чего формируется покрытие с высокой степенью адгезии к основе. Для реализации этого метода использовался резонансный вакуумно-дуговой ионный источник [3].

Основная часть. В качестве материала подложки был выбран алюминий чистотой 99,995% и сплав алюминия АК9 (10,5 вес. % кремния и 0,5 вес. % марганца). Сплав АК9 был подвергнут отжигу и искусственному старению при $t = 300^\circ\text{C}$ в течение 3 ч. Микроструктура сплава АК9 представляла собой α -твердый раствор, кремний в составе эвтектики $\alpha + \text{Si}$, мелкодисперсные частицы метастабильной фазы MgSi_2 и нерастворимые фазы AlSiFeMn . Из данных материалов были изготовлены образцы в виде цилиндров диаметром 10 мм и толщиной 2–3 мм. После предварительной обработки, включающей шлифовку и полировку с использованием окиси хрома и алмазных паст, на образцы были нанесены покрытия на основе Mo и W. Ионно-ассистируемое осаждение осуществлялось при ускоряющих напряжениях $U = 7, 15, 20$ кВ. Плотность ионного тока составляла $\sim 4\text{--}6$ мкА/см², а интегральный поток ассистирующих ионов достигал $2 \cdot 10^{16}$ ион/см². В рабочей камере в процессе осаждения поддерживался вакуум при давлении $\sim 10^{-2}$ Па.

Испытание производилось на приборе ПМТ-3 путем вдавливания в поверхность образца алмазной четырехгранной пирамиды с углом при вершине 136° . После снятия нагрузки на поверхности образца остается отпечаток в виде пирамиды с квадратным основанием. Измеряя длину диагонали отпечатка, определяли число микротвердости H и глубину проникновения индентора h . Для каждой нагрузки было произведено 15 измерений диагонали отпечатка, по которым определялись среднее значение чисел микротвердости и средняя глубина проникновения индентора, а также случайная по-

грешность измерений. Для структур Me/Al погрешность измерений составляла $\sim 7\text{--}10\%$, а для структур Me/AK9 равнялась $\sim 10\text{--}12\%$.

Для сравнения экспериментальных данных нами определялось относительное изменение микротвердости H модифицированного образца по сравнению с микротвердостью $H_{\text{исх}}$ исходного (немодифицированного) образца:

$$\frac{\Delta H}{H_{\text{исх}}} = \frac{H - H_{\text{исх}}}{H_{\text{исх}}}. \quad (1)$$

Сравнение средних чисел микротвердости производилось на соизмеримых глубинах проникновения индентора, чтобы исключить влияние масштабного эффекта [4].

Чтобы определить относительное изменение микротвердости для одинаковых глубин проникновения индентора, у исходных и модифицированных образцов измерялась микротвердость при различных нагрузках на индентор. В наших исследованиях нагрузка на индентор варьировалась в интервале от 1 до 50 г, что соответствовало изменению глубины проникновения индентора от $(1,8 \pm 0,2)$ до $(8,9 \pm 0,5)$ мкм. Полученные экспериментальные значения микротвердости аппроксимировались степенной функцией вида [4]

$$H = ah^n, \quad (2)$$

где H – микротвердость; a – коэффициент, зависящий от формы индентора и свойств материала; h – глубина проникновения индентора; n – показатель степени. По графикам зависимости микротвердости от глубины проникновения индентора $H = f(h)$ определялось относительное изменение микротвердости модифицированного образца на одинаковых глубинах проникновения индентора.

Чтобы оценить влияние ускоряющей разности потенциалов при осаждении покрытий на микротвердость модифицированной поверхности, нами рассчитывалось среднее зарядовое число Q^* в потоке ассистирующих ионов [5]. По Q^* и ускоряющей разности потенциалов U находилась средняя энергия E_i ассистирующих ионов. По энергии ассистирующих ионов определялась средняя плотность энергии Θ , выделяющейся в каскаде атомных столкновений в расчете на один атом мишени [6].

Экспериментальные данные чисел микротвердости поверхности структур Mo/Al и W/Al представлены в табл. 1 (глубина для сравнения значений составляла $\sim (6,0 \pm 0,3)$ мкм).

Варьируя ускоряющую разность потенциалов, мы, соответственно, изменяем плотность энергии Θ , выделяемой при торможении ассистирующих ионов в каскаде атомных столкновений.

Анализируя, как изменяется при разных значениях плотности выделяемой энергии Θ микротвердость модифицированных образцов, следует отметить, что при Θ , лежащей в интервале от 0,2 до 1,4 эВ/ат., микротвердость поверхности алюминия варьирует в интервале от +10 до +40%. При этом максимальное увеличение микротвердости происходит при $U = 20$ кВ, что соответствует наименьшей плотности выделяемой энергии Θ (0,2 эВ/ат. для структуры Mo/Al и 0,5 эВ/ат. для W/Al). В этом случае меньше сказываются процессы отжига радиационных дефектов, влияние которых на микротвердость известно [7].

Таблица 1

Микротвердость поверхности структур Me/Al

Структура	U , кВ	Θ , эВ/ат.	H , $\times 10^7$ Па
Al	–	–	$37,2 \pm 4,1$
Mo/Al	7	0,8	$45,5 \pm 3,4$
	15	0,4	$43,5 \pm 3,9$
	20	0,2	$52,2 \pm 4,3$
W/Al	7	1,4	$50,4 \pm 5,0$
	15	0,6	$44,6 \pm 3,6$
	20	0,5	$52,5 \pm 3,4$

По нашему мнению, при формировании тонких пленок на поверхности алюминия конкурируют два механизма:

1) упрочнение за счет образования при осаждении в приповерхностном слое микронапряжений вследствие введения в матрицу нерастворимых элементов, формирования структурных радиационных дефектов и включений карбидных, оксидных и силицидных фаз;

2) разупрочнение за счет отжига радиационных дефектов, который приводит к снижению уровня микронапряжений.

Какой-либо монотонной закономерности в изменении микротвердости модифицированного алюминия в зависимости от плотности энергии Θ , выделяемой в каскаде атомных столкновений, не наблюдалось (рисунок, а).

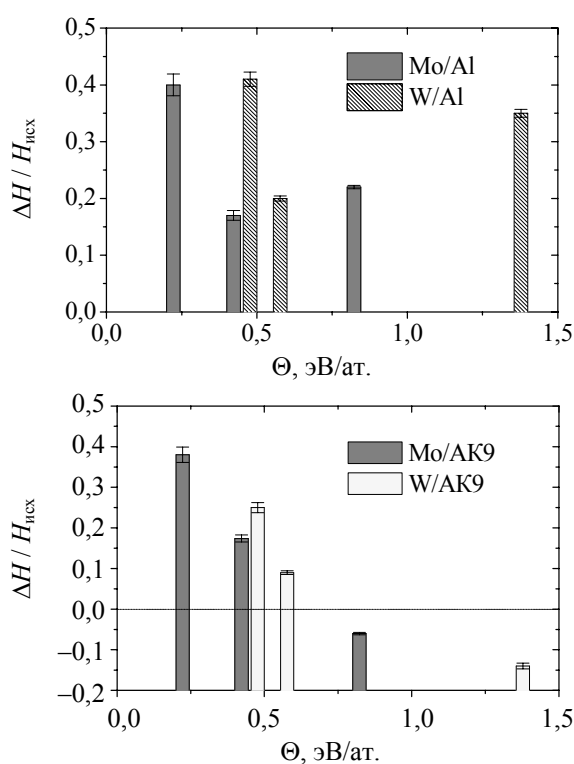
Таблица 2

Микротвердость поверхности структур Me/АК9

Структура	U , кВ	Θ , эВ/ат.	H , $\times 10^7$ Па
АК9	–	–	$115,5 \pm 6,3$
Mo/АК9	7	0,8	$108,2 \pm 12,0$
	15	0,4	$135,2 \pm 7,8$
	20	0,2	$158,7 \pm 10,1$
W/АК9	7	1,4	$99,6 \pm 5,9$
	15	0,6	$125,2 \pm 8,9$
	20	0,5	$144,4 \pm 8,0$

Экспериментальные данные чисел микротвердости поверхности структур Mo/АК9 и W/АК9 представлены в табл. 2 (глубина для сравнения значений составляла $\sim(4,0 \pm 0,2)$ мкм).

Следует отметить, что в модифицированном сплаве АК9 микротвердость монотонно возрастает с повышением энергии ассистирующих ионов, хотя при $U = 7$ кВ микротвердость меньше микротвердости исходного образца. Поскольку с увеличением ускоряющей разности потенциалов U уменьшается плотность энергии Θ , выделяемой в каскаде атомных столкновений, то можно констатировать, что при увеличении плотности выделяемой энергии Θ микротвердость поверхности структур Mo/АК9 и W/АК9 уменьшается (рисунок, б).



Относительное изменение микротвердости структур Me/Al (а) и Me/АК9 (б) по сравнению с микротвердостью исходных образцов в зависимости от плотности выделяемой энергии Θ

На наш взгляд, различие в характере изменения микротвердости поверхности модифицированных образцов Al и АК9 отражает факт влияния особенностей структурно-фазового состояния исходных материалов на процессы упрочнения их поверхности [8]. Микроструктура сплава АК9, в отличие от чистого алюминия, представляла собой α -твердый раствор, кремний в составе эвтектики $\alpha + Si$, мелкодисперсные частицы метастабильной фазы $MgSi_2$ и нерастворимые фазы $AlSiFeMn$. В приповерхностном

слое сплава АК9 при небольших ускоряющих напряжениях (при наибольших значениях Θ), мы полагаем, доминируют процессы растворения метастабильных выделений и включений, которые способствуют разупрочнению приповерхностных слоев образцов. При увеличении ускоряющего напряжения (уменьшении Θ) преобладают процессы частичного растворения выделений, образования новых метастабильных выделений и зон Гинье – Престона, которые приводят к увеличению дисперсности приповерхностных слоев, что способствует упрочнению образцов [7, 8]. Образование метастабильных выделений и новых зон Гинье – Престона обусловлено миграцией радиационных дефектов и легирующих компонентов, усиливающейся в условиях возбуждения электронной подсистемы структуры кристаллов.

Анализируя значения чисел микротвердости в серии измерений для одного образца, необходимо отметить следующие особенности: в пределах одного образца значения микротвердости отдельных измерений могут отличаться на $\pm 30\%$, в то время как для необлученных образцов данное отличие не превышает $\sim 5\text{--}10\%$. Особенно отчетливо это проявляется при изучении микротвердости поверхности сплава алюминия. Причиной указанного экспериментального факта является неоднородность распределения механических свойств по модифицированной поверхности. Неоднородность механических свойств модифицированной поверхности связана с наличием в покрытии фаз с различной микротвердостью.

Заключение. Микротвердость поверхности образцов из алюминия и сплава алюминия АК9, модифицированных ионно-ассистируемым осаждением тонких пленок на основе Mo, W при ускоряющей разности потенциалов 7, 15, 20 кВ и интегральным потоком $2 \cdot 10^{16}$ ион/см², зависит от структурно-фазового состояния исходной подложки. Так, для структур, полученных осаждением тонких пленок на чистый алюминий, наблюдается увеличение микротвердости. Причинами наблюдаемого упрочнения являются введение в матрицу нерастворимых элементов, формирование в приповерхностных слоях структурных радиационных дефектов и включений силицидов, карбидов и оксидов. В формируемых структурах возникают упругие напряжения, которые обуславливают упрочнение, аналогичное упрочнению при пластических деформациях. Для структур, полученных осаждением тонких пленок на сплав алюминия АК9 при ускоряющей разности потенциалов 7 кВ, наблюдается уменьшение микротвердости поверхности. Причинами разупрочнения являются радиационно-индуцированный распад твердого раствора и растворение метастабильных выделений. С ростом ускоряющей разности потенциалов (с уменьшением плотности выделяемой энергии) микротвердость поверхности модифицированного АК9 увеличивается. Упрочнение происходит вследствие частичного растворения выделений в сплаве, образования новых зон Гинье – Престона и метастабильных выделений, приводящих к повышению дисперсности приповерхностных слоев образцов.

Литература

1. Белый А. В., Кукареко В. А. Структурное состояние и износостойкость модифицированных ионами азота хромистых сталей // Физика металлов и металловедение. 2014. Т. 104, № 6. С. 641–649.
2. Ионно-лучевое модифицирование трибологических свойств хромистой стали / Д. А. Козлов [и др.] // Физика и химия обработки материалов. 2010. № 1. С. 50–53.
3. Бобрович О. Г., Тульев В. В. Анализ композиционного состава и химических связей элементов металлосодержащих (Zr, W) покрытий // Физика. Известия высших учебных заведений. 2011. № 1/3. С. 350–354.
4. Анищик В. М., Васильева Л. А., Жукова С. И. Влияние имплантации высокоэнергетических ионов неона на структуру сплава алюминий-марганец // Физика и химия обработки материалов. 1998. № 1. С. 5–8.
5. Implantation of titanium, chromium, yttrium, molybdenum, silver, hafnium, tantalum, tungsten and platinum ions generated by a metal vapour vacuum ion source into 440C stainless steel / J. Sasaki [et al.] // Surf. Coat. Technol. 1992. Vol. 51. P. 166–175.
6. Sigmund P. Energy density and time constant of heavy-ion-induced elastic-collision spikes // Appl. Phys. Lett. 1974. Vol. 25. P. 169–171.
7. Анищик В. М., Жукова С. И., Поляк Н. И. Влияние высокоэнергетической имплантации на тонкую структуру и микротвердость сплавов алюминия // Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы IV Междунар. науч. конф., Минск, 3–5 окт. 2001 г. Минск, 2001. С. 240–242.
8. Анищик В. М., Жукова С. И., Поляк Н. И. Микротвердость сплавов системы алюминий – медь – марганец, имплантированных высокоэнергетическими ионами криптона // Физика и химия обработки материалов. 1999. № 6. С. 9–12.
9. Механизм упрочнения стареющего сплава на основе алюминия при высокоэнергетической имплантации / В. М. Анищик [и др.] // Физика и химия обработки материалов. 2001. № 5. С. 37–39.

References

1. Belyy A. V., Kukareko V. A. The structural state and wear resistance of modified chromium steels with nitrogen ions. *Fizika metallov i metallovedenie* [The Physics of Metals and Metallography], 2014, vol. 104, no. 6, pp. 641–649 (In Russian).
2. Kozlov D. A., Krit B. L., Stolyarov V. V., Ovchinnikov V. V. Ion-beam modification of the chromium steel tribological behavior. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and Chemistry of Materials Treatment], 2010, no. 1, pp. 50–53 (In Russian).
3. Bobrovich O. G., Tul'ev V. V. Analysis of composite composition and chemical bonds of metal elements (Zr, W) of coatings. *Fizika. Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy* [Russian Physics Journal], 2011, no. 1/3, pp. 350–354 (In Russian).
4. Anishchik V. M., Vasil'eva L. A., Zhukova S. I. Effect of high-energy implantation of neon ions at the alloy of aluminum and manganese. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and Chemistry of Materials Treatment], 1998, no. 1, pp. 5–8 (In Russian).
5. Sasaki J., Hayashi K., Sugiyama K., Ichiko O., Hashiguch Y. Implantation of titanium, chromium, yttrium, molybdenum, silver, hafnium, tantalum, tungsten and platinum ions generated by a metal vapour vacuum ion source into 440C stainless steel. *Surf. Coat. Technol.*, 1992, vol. 51, pp. 166–175.
6. Sigmund P. Energy density and time constant of heavy-ion-induced elastic-collision spikes. *Appl. Phys. Lett.*, 1974, vol. 25, pp. 169–171.
7. Anishchik V. M., Zhukova S. I., Polyak N. I. [Influence of high-energy implantation of a thin structure and micro hardness of aluminum alloys]. *Materialy IV mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii (Vzaimodeystvie izlucheniya s tverdym telom)* [Materials of IV International Scientific Conference (Interaction of radiation with solids)]. Minsk, 2001, pp. 240–242 (in Russian).
8. Anishchik V. M., Zhukova S. I., Polyak N. I. The microhardness of the alloys of aluminum-copper-manganese, high-energy krypton ions implanted. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and Chemistry of Materials Treatment], 1999, no. 6, pp. 9–12 (In Russian).
9. Anishchik V. M., Zhukova S. I., Vasil'eva L. A., Ustinova M. V., Didyk A. Yu., Skuratov V. A. The mechanism of aging hardening alloy based on aluminum with a low-energy ion implantation. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and Chemistry of Materials Treatment], 2001, no. 5, pp. 37–39 (In Russian).

Информация об авторах

Тул'ев Валентин Валентинович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: tvv69@mail.ru

Ташлыкoв Игорь Серафимович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики. Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка (220050, г. Минск, ул. Советская, 18, Республика Беларусь). E-mail: tashl@bspu.unibel.by

Information about the authors

Tul'ev Valentin Valentinovich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tvv69@mail.ru

Tashlykov Igor Serafimovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Physics. Maxim Tank Belarusian State Pedagogical University (18, Sovetskaya str., 220050, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tashl@bspu.unibel.by

Поступила 10.03.2016

УДК 537.633.2

В. Р. Мадьяров

Белорусский государственный технологический университет

**ИЗМЕРЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕНОСА
В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ПОМОЩЬЮ ЭФФЕКТА ФАРАДЕЯ
В МИЛЛИМЕТРОВОМ ДИАПАЗОНЕ**

Применение магнитооптического эффекта для исследования полупроводников позволяет определить такие параметры, как эффективная масса, подвижность и время релаксации. В диапазоне частот 50–75 ГГц поглощение электромагнитных волн в объеме полупроводника практически полностью обусловлено свободными носителями, и в спектре поглощения отсутствуют области с аномальной дисперсией. Поэтому распространение плоско-поляризованной электромагнитной волны описывается системой линейных дифференциальных уравнений для немагнитной проводящей среды. Для продольного магнитного поля (геометрии Фарадея) получена система уравнений для угла поворота плоскости поляризации зондирующей волны, решение которой дает эффективное значение подвижности и время релаксации. Измерения угла поворота плоскости поляризации на пластинках *n*-Si и *n*-Ge показывают, что его зависимость от магнитной индукции близка к линейной, а постоянная Верде возрастает с повышением частоты. В исследуемом диапазоне частот ее величина изменяется в пределах 0,02–0,06 град/(мТл · мм) для *n*-Si и 0,02–0,20 град/(мТл · мм) для *n*-Ge. Значение эффективной массы для *n*-Si в направлении оси [100] хорошо согласуется с расчетным значением, полученным на основе известных данных для продольной и поперечной масс.

Ключевые слова: волны миллиметрового диапазона, эффект Фарадея, подвижность, удельная электропроводность.

V. R. Madiarov

Belarusian State Technological University

**MEASUREMENT OF ELECTRONIC TRANSFER PARAMETERS
IN SEMICONDUCTORS USING FARADAY EFFECT
IN MILLIMETER-WAVE BAND**

The application of magneto-optic effect for semiconductor studies allows to determine such parameters as effective mass, mobility and relaxation time. In the frequencies range of 50–75 GHz the absorption of electromagnetic waves in semiconductor volume is almost completely due to free carriers and there are no abnormal dispersion areas in absorption spectrum. Propagation of plane polarized electromagnetic wave is described by a system of the linear differential equations for nonmagnetic medium. For a longitudinal applied magnetic field (Faraday geometry) the equation system for rotation angle of the probing wave polarization plane is obtained the solving of which gives effective mobility and relaxation time values. The measurements of rotation angle on *n*-Si and *n*-Ge wafers show that its dependence on magnetic induction is very close to the linear, Verdet constant values increase with frequency. In the studied frequency range it varies in the region of 0.02–0.06 grad/(mTl · mm) for *n*-Si and 0.02–0.20 grad/(mTl · mm) for *n*-Ge. Effective mass value obtained from the measurements for *n*-Si in [100] axis direction is in good agreement with that predicted on the basis of the known values of longitudinal and transverse masses.

Key words: millimeter waves, Faraday effect, mobility, specific conductivity.

Введение. Для исследования полупроводниковых материалов широко применяются бесконтактные методы с использованием излучения видимого диапазона, включая лазерно-интерференционный метод определения диффузионной длины [1], а также измерение скорости поверхностной рекомбинации и объемного времени жизни по кинетике избыточного теплового излучения [2]. В СВЧ-области применяются резонаторные и волноводные методы [3]. Из всех методов с использованием зондирующих излу-

чений СВЧ-диапазона наиболее привлекательны те, которые основаны на зависимости амплитуды и фазы отраженной или прошедшей зондирующей волны от параметров полупроводникового образца: проводимости, подвижности, коэффициентов диффузии, объемной и поверхностной рекомбинации [4, 5]. Применение магнитооптического эффекта позволяет определить такие параметры, как эффективная масса и подвижность носителей заряда. В области частот $\sim 10^{10}$ – 10^{11} Гц отсутствуют полосы

поглощения зондирующего излучения [6]. Поэтому распространение плоско-поляризованных зондирующих волн можно описать системой линейных дифференциальных уравнений Максвелла для проводящих сред, что упрощает интерпретацию данных измерений. В данной работе представлены результаты измерений подвижности и времени релаксации для германия и кремния с электронной проводимостью, полученные на основе измерения угла поворота плоскости поляризации в миллиметровом диапазоне длин волн.

Основная часть. В измерениях использовалось зондирующее излучение в диапазоне частот 50–75 ГГц. В этом диапазоне поглощение электромагнитных волн в объеме полупроводника практически полностью обусловлено свободными носителями, и в спектре поглощения отсутствуют области с аномальной дисперсией. Поэтому распространение плоско-поляризованной электромагнитной волны с частотой ω в направлении оси z описывается дифференциальными уравнениями, которые для немагнитной проводящей среды с удельной электропроводностью σ имеют вид [7]:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \vec{E}_0 \exp i(\omega t - kz), \quad \vec{H} = \vec{H}_0 \exp i(\omega t - kz), \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial(\mu_0 \vec{H})}{\partial t} = -i\omega\mu_0 \vec{H}, \\ \operatorname{rot} \vec{H} &= \varepsilon\varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E} = i\omega\varepsilon\varepsilon_0 \vec{E} + \sigma \vec{E}, \end{aligned} \quad (1)$$

где k – волновое число; $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$ – диэлектрическая проницаемость среды, зависящая от частоты.

Исключив из уравнений (1) напряженность магнитного поля \vec{H} , для геометрии Фарадея (внешнее магнитное поле с индукцией B ориентировано в направлении распространения, а волновой вектор \vec{k} перпендикулярен \vec{E} и \vec{H} волны) получим:

$$\left(k^2 - \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} + i\mu_0 \omega \sigma \right) \vec{E} = (\vec{k} \cdot \vec{E}) \vec{k} = 0, \quad (2)$$

где $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ – скорость электромагнитной волны в вакууме.

Удельная электропроводность σ в уравнениях (1) и (2) определяется матрицей [7]:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix},$$

где σ_{xx} – проводимость, обусловленная дрейфом носителей под действием электрического поля зондирующей волны; σ_{xy} – холловская проводимость полупроводникового образца, вызванная взаимодействием тока проводимости с постоянным магнитным полем с индукцией B .

Компоненты σ_{xx} и σ_{xy} в приближении сферических энергетических поверхностей определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = \sigma_{yy} &= \sigma_0 \tau^{-1} \frac{\tau^{-1} + i\omega}{(\tau^{-1} + i\omega)^2 + \omega_c^2}, \\ \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} &= \sigma_0 \tau^{-1} \frac{\omega_c}{(\tau^{-1} + i\omega)^2 + \omega_c^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

где σ_0 – удельная электропроводность на постоянном токе; τ – время релаксации; $\omega_c = eB/m^*$ – циклотронная частота; m^* – эффективная масса носителей заряда.

Для проекций электрического поля E_x и E_y на оси x и y получим:

$$\begin{aligned} \left(k^2 - \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} \right) E_x + i\mu_0 \omega (\sigma_{xx} E_x + \sigma_{xy} E_y) &= 0, \\ \left(k^2 - \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} \right) E_y + i\mu_0 \omega (-\sigma_{xy} E_x + \sigma_{xx} E_y) &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

В системе уравнений (4) σ_{xx} и σ_{xy} выражаются формулами (3). Система (4) имеет решение, если определитель равен нулю:

$$\left(k^2 - \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} + i\mu_0 \omega \sigma_{xx} \right)^2 + (i\mu_0 \omega \sigma_{xy})^2 = 0. \quad (5)$$

Из (5) следует решение для k :

$$k_{\mp}^2 = \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} - i\mu_0 \omega \sigma_{xx} \pm \mu_0 \omega \sigma_{xy}. \quad (6)$$

Введя полную проводимость $\sigma_{\mp} = \sigma_{xx} \mp i\sigma_{xy}$, получим для правой и левой круговой поляризации:

$$k_{\mp}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left[\varepsilon_s - i \frac{\varepsilon_0 \sigma_0}{\omega} \frac{1}{1 + i(\omega \mp \omega_c) \tau} \right], \quad (7)$$

где ε_s – диэлектрическая проницаемость в постоянном электрическом поле.

Угол поворота α плоскости поляризации после прохождения образца с толщиной d выражается с помощью соотношения (7) через углы правого и левого вращения α_+ и α_- :

$$\alpha = \frac{1}{2}(\alpha_+ - \alpha_-), \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_{\pm} &= \operatorname{Re}(k_{\pm})d = \frac{\omega d}{c\sqrt{2}} \left[(\varepsilon_{1\pm}^2 + \varepsilon_{2\pm}^2)^{\frac{1}{2}} + \varepsilon_{1\pm} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ \varepsilon_{1\pm} &= \varepsilon_s - \varepsilon_{2\pm}(\omega \mp \omega_c)\tau = \varepsilon_s - \varepsilon_{2\pm}(\omega\tau \mp \mu B)\tau, \\ \varepsilon_{2\pm} &= \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0 \omega} \frac{1}{[1 + (\omega \mp \omega_c)^2 \tau^2]} \approx \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0 \omega}. \end{aligned} \quad (9)$$

В формулах (9) частота ω_c выражена через эффективную подвижность носителей заряда $\mu = e\tau / m^*$, в которую входят дрейфовая подвижность μ_d и холловская подвижность $\mu_H = r\mu_d$, где r – холл-фактор. Для частот $\omega \sim 3 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$ (~ 50 ГГц) квадратичное слагаемое в знаменателе $(\omega \pm \omega_c)^2 \tau^2 \ll 1$ и им можно пренебречь.

Используя формулы (8) и (9) и значения α , измеренные при двух значениях индукции магнитного поля B , получим систему уравнений для определения подвижности и времени релаксации:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}[\alpha_+(B_1) - \alpha_-(B_1)],$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2}[\alpha_+(B_2) - \alpha_-(B_2)].$$

(10)

В качестве источника зондирующего излучения применялся генератор Г4-142 (диапазон частот 50–78 ГГц). Волновод имел стандартное прямоугольное сечение и был рассчитан на прохождение моды TE_{11} . Использовались пластинки образцов n -кремния и n -германия толщиной 0,5 мм. Образцы помещались в неподвижную цилиндрическую переходную латунную секцию, состоящую из двух коаксиальных цилиндров. Один из цилиндров мог поворачиваться и был соединен со второй прямоугольной секцией. На подвижную цилиндрическую секцию одевался соленоид, который создавал продольное магнитное поле в месте расположения образца. Плоскость образца кремния перпендикулярна оси [100], для которой известны продольная и поперечная эффективные массы. Направление магнитного поля совпадало с указанной осью. Угол поворота цилиндрической секции измерялся по смещению светового пятна лазерного луча, отраженного от зеркала, жестко соединенного с вращающейся секцией. Мощность прошедшей волны измерялась детекторным блоком, соединенным со второй прямоугольной секцией. Предварительно проводилась проверка прохождения волны без образца. Регистрируемая мощность изменялась пропорционально $\cos^2\varphi$ (φ – угол между главными плоскостями подвижной и неподвижной секций волноводов). Такая же зависимость получалась и со вставленным образцом без приложенного магнитного поля. При смене направления магнитного поля путем переключения полярности источника питания соленоида направление поворота плоскости поляризации волны менялось на противоположное. Воспроизводимость измеренного угла поворота была не хуже 5%.

На рис. 1 и 2 представлены зависимости угла поворота плоскости поляризации α от магнитной индукции, измеренные при комнат-

ной температуре для образцов с различными удельными электропроводностями в диапазоне частот 53–63 ГГц.

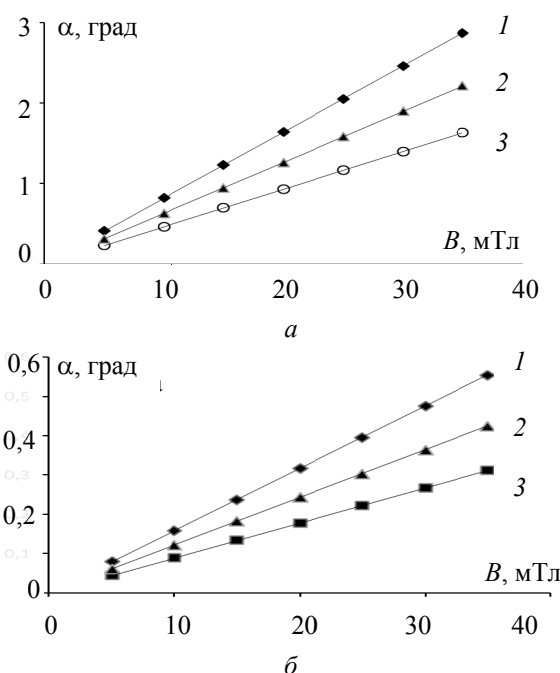


Рис. 1. Зависимости угла магнитного вращения от магнитного поля для n -германия с удельной электропроводностью $\sigma_0 = 86 \text{ См/м}$ (а) и 12 См/м (б) на частотах: 1 – 63 ГГц; 2 – 56 ГГц; 3 – 53 ГГц

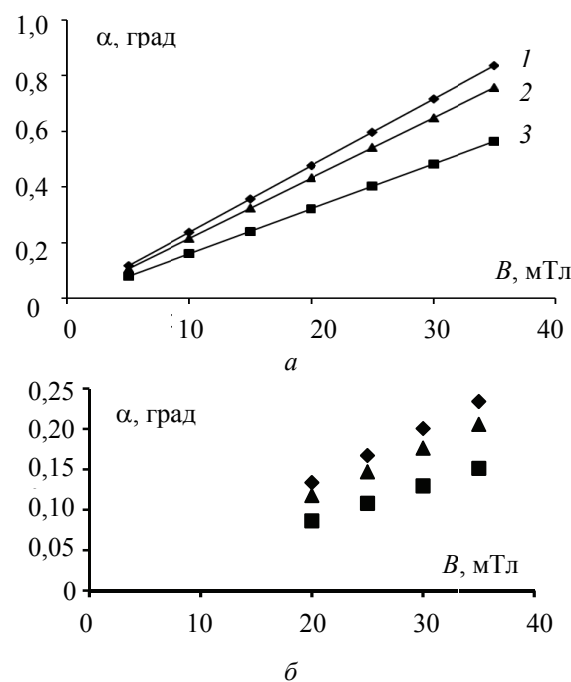


Рис. 2. Зависимости угла магнитного вращения от магнитного поля для n -кремния с удельной электропроводностью $\sigma_0 = 96 \text{ См/м}$ (а) и 25 См/м (б) на частотах: 1 – 63 ГГц; 2 – 56 ГГц; 3 – 53 ГГц

Наблюдаемые зависимости практически являются линейными. Видно, что угол поворота плоскости поляризации значительно больше для образцов с более высокой удельной электропроводностью. Для германия измеренный угол α значительно больше, чем для кремния при одинаковой толщине. Видно также, что с ростом зондирующей частоты наклон этих зависимостей заметно возрастает.

На рис. 3 и 4 представлены зависимости постоянной Верде $V = (1/d)(\Delta\alpha / \Delta B)$ от частоты в диапазоне 50–70 ГГц для образцов германия и кремния с различными удельными электропроводностями. Значения V значительно больше для образцов с высокой электропроводностью. Для германия с более высокой удельной электропроводностью σ_0 значения V примерно в 4 раза превышают значения, полученные для кремния с близким значением σ_0 . Для образцов с меньшей электропроводностью ($\sigma_0 = 12$ и 25 См/м) это различие заметно уменьшается, однако для n -Ge по-прежнему наблюдается большее значение V .

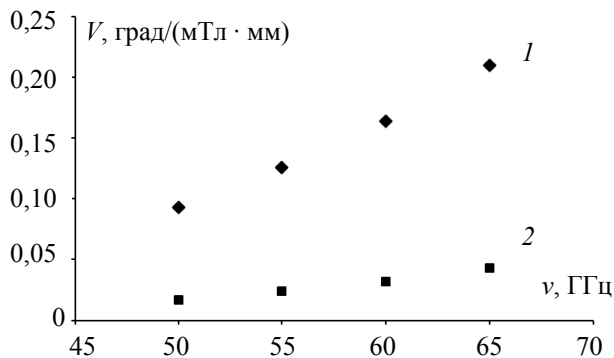


Рис. 3. Зависимости постоянной Верде от частоты для n -германия: $\sigma_0 = 86$ См/м (1) и 12 См/м (2)

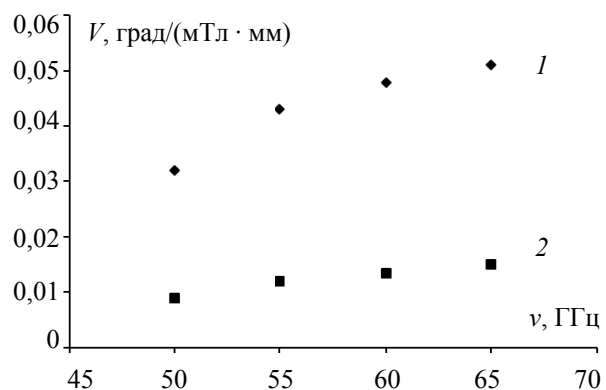


Рис. 4. Зависимости постоянной Верде от частоты для n -кремния: $\sigma_0 = 96$ См/м (1) и 25 См/м (2)

В таблице приведены значения эффективной подвижности $\mu_{эф}$ и времени релаксации τ ,

которые определялись с помощью системы уравнений (10) по значениям α , измеренным в магнитном поле с индукцией 15 и 30 мТл. В расчетах использовались значения ϵ_s , равные 12,4 и 16 для n -Si и n -Ge соответственно. Значения параметров $\omega\tau$ и μB не превышали 0,12 и 0,1 соответственно.

Значения эффективной подвижности $\mu_{эф}$, времени релаксации τ и эффективной массы m^* на частотах 53 и 63 ГГц

Данные на частотах 53/63 ГГц	$\mu_{эф}, \text{м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	$\tau, \text{пс}$	m^*	$m^*_{\text{расч}}$
Ge	0,37/0,36	0,35/0,33	0,157/0,150 m_0	—
Si	0,13/0,12	0,21/0,19	0,276/0,268 m_0	0,262 m_0

Значение эффективной массы $m^* = e\tau / \mu$ для кремния хорошо согласуется со значением $m^*_{\text{расч}}$, полученным путем расчета по формуле

$$m^* = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \right]^{-1},$$

где $m_1 = 1,59m_0$ и $m_2 = 0,19m_0$ – известные значения эффективной массы в направлении, параллельном и перпендикулярном оси [100] кремния соответственно (m_0 – масса покоя электрона, $m_0 = 1,6 \cdot 10^{-19}$ кг).

Заключение. Показана возможность оценки подвижности и времени релаксации носителей заряда в n -Si и n -Ge с помощью магнитного вращения плоскости поляризации зондирующей волны в области частот 50–70 ГГц. Доказано, что для образцов с толщиной около 0,5 мм угол поворота плоскости поляризации в n -Ge и n -Si в этом диапазоне частот пропорционален индукции внешнего магнитного поля. Поэтому для измерений на данной частоте можно применять калибровочный образец и использовать слабые магнитные поля.

Получены значения постоянной Верде, которые в исследуемом диапазоне составили 0,02–0,06 град/(мТл·мм) для кремния и 0,02–0,20 град/(мТл·мм) для германия. Значения эффективной массы m^* , полученные для кремния с помощью метода магнитного вращения, хорошо согласуются с расчетными для оси [100].

Для интерпретации результатов измерений с достаточной степенью точности можно использовать приближение сферических энергетических поверхностей.

Литература

1. Манухов В. В., Федорцов А. Б., Иванов А. С. Лазерно-интерференционный метод определения длины диффузии носителей заряда в полупроводниках // *Физика и техника полупроводников*. 2015. Т. 49, вып. 9. С. 1153–1158.
2. Богатыренко В. В., Зиновчук А. В. Измерение скорости поверхностной рекомбинации и объемного времени жизни в пластинах Si по кинетике избыточного теплового излучения // *Физика и техника полупроводников*. 2011. Т. 45, вып. 1. С. 62–66.
3. Кучис Е. В. Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования. М.: Советское радио, 1990. 263 с.
4. Сверхбыстродействующие фотоприемники на основе эффектов взаимодействия микроволнового электромагнитного излучения с фотовозбужденной плазмой в полупроводниках / В. В. Антонов [и др.] // *Журнал технической физики*. 1998. Т. 68, № 11. С. 94–99.
5. Кац Л. И., Альтшуллер Е. Ю., Чупис В. Н. Отражение электромагнитной волны от тонкой полупроводниковой пластины с управляемой ударной ионизацией концентрационной неоднородностью свободных носителей // *Радиотехника и электроника*. 1992. Т. 37, № 3. С. 560–566.
6. Уханов Ю. И. Оптические свойства полупроводников. М.: Наука, 1977. 368 с.
7. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.

References

1. Manukhov V. V., Fedortsov A. B., Ivanov A. S. Laser-interferometry method of determination of charge carrier diffusion length in semiconductors. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and engineering], 2015, vol. 49, issue 9, pp. 1153–1158 (In Russian).
2. Bogatyrenko V. V., Zinovchuk A. V. Measurement of surface recombination velocity and bulk lifetime in Si wafers by transient behavior of excess thermal emission. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and engineering], 2011, vol. 45, issue 1, pp. 62–66 (In Russian).
3. Kuchis E. V. *Gal'vanomagnitnyye efekty i metody ikh issledovaniya* [Galvanomagnetic effects and methods to study them]. Moscow, Sovetskoe radio Publ., 1990. 263 p.
4. Antonov V. V., Ivanov S. V., Tsarev V. P., Chupis V. N. Ultrahigh-speed photodetectors on the basis of interaction effects of microwave electromagnetic radiation with photoexcited plasma in semiconductors. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Journal of technical physics], 1998, vol. 68, no. 11, pp. 94–99 (In Russian).
5. Kats L. I., Al'tshuller E. Yu., Chupis V. N. Reflection of an electromagnetic wave from thin semiconductor wafer with free carrier concentration nonuniformity controlled by impact ionization. *Radiotekhnika i elektronika* [Radio engineering and electronics], 1992, vol. 37, no. 3, pp. 560–566 (In Russian).
6. Ukhanov Ju. I. *Opticheskiye svoystva poluprovodnikov* [Optical properties of semiconductors]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 368 p.
7. Ansel'm A. I. *Vvedenie v teoriyu poluprovodnikov* [Introduction to the theory of semiconductors]. Moscow, Nauka Publ., 1978. 616 p.

Информация об авторе

Мадьяров Владимир Рафкатович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: Madyarov@belstu.by

Information about the author

Madiarov Vladimir Rafkatovich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Madyarov@belstu.by

Поступила 02.03.2016

УДК 540.120

В. В. Чаевский¹, В. В. Жилинский¹, О. Чернашей²¹Белорусский государственный технологический университет²Вильнюсский технический университет имени Гедиминаса**ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ
НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПОКРЫТИЯ СПЛАВОМ Ni-P**

Определены параметры электролитического синтеза из сульфатно-хлоридных электролитов Ni-P-покрытий на стальную поверхность лезвий ножей дереворежущего инструмента.

Фазовый состав полученных покрытий зависит от плотности тока в электролите. Сплавы Ni-P состоят из отдельных фаз Ni₃P и Ni или представляют собой твердый раствор внедрения на базе ГЦК решетки Ni при осаждении из электролита при плотности тока свыше 7 А/дм².

Наличие углерода способствует образованию микротрещин на поверхности покрытий. При плотности тока более 5 А/дм² на поверхности покрытий формируются сплошные глобулярные образования, которые имеют смешанную аморфно-кристаллическую структуру с фазой Ni₃P. С увеличением содержания фосфора возрастает размер глобул, уменьшающих контактную площадь, в результате чего увеличивается износостойкость покрытия сплавом Ni-P.

Ключевые слова: покрытия, электролит, сплав, никель, углерод.

V. V. Chayevski¹, V. V. Zhylinskiy¹, O. Cernashejus²¹Belarusian State Technological University²Vilnius Gediminas Technical University**THE INFLUENCE OF ELECTROCHEMICAL DEPOSITION PARAMETERS
ON THE STRUCTURE AND PHASE COMPOSITION OF PLATING
BY THE Ni-P ALLOY**

The parameters of electrolytic synthesis of Ni-P coatings on steel surface of the edges of knives of woodcutting tools from sulfate-chloride electrolyte have been determined.

The phase composition of obtained coatings depends on the current density in the electrolyte. The Ni-P alloys consist of separate phases of Ni and Ni₃P and solid solution of implementation on the basis of the FCC Ni lattice, when it was deposited from the electrolyte at current density to be more than 7 A/dm².

Presence of carbon favors the formation of microcracks on the coatings surface. The surface coatings is a dense globular formation at a current density greater than 5 A/dm². The globular formations have a mixed amorphous-crystalline structure with Ni₃P phase. Globules size increases with phosphorus content, reducing the contact area, thereby improving wear resistance of the coating by the Ni-P alloy.

Key words: coatings, electrolyte, alloy, nickel, carbon.

Введение. В настоящее время в машиностроении для повышения функциональных свойств деталей из конструкционных сталей: коррозионной стойкости, твердости, износостойкости – широко используются гальванические железные покрытия, покрытия сплавами железа и Ni-P [1]. Установлено, что осаждение гальванических покрытий из хлоридных электролитов на поверхность деталей применяется для восстановления размеров изношенных деталей или получения специальных свойств поверхностного слоя деталей (антифрикционных, магнитных и т. д.). Интерес к электрохимическим и химическим покрытиям Ni-P вызван уникальным комплексом присущих этим материалам физико-химических и механических свойств. Кроме того, покрытия Ni-P обладают электрокаталитической активностью. Вместе с тем в литературе отсутствуют систематические

данные о зависимости фазового состава Ni-P покрытий, их микроструктуры и физико-механических свойств от условий синтеза. Недостаточно изучена кинетика осаждения покрытий, дисперсность частиц твердой фазы и процессы, протекающие на межфазной границе. Поэтому целью данной работы было сформировать гальванические покрытия сплавом Ni-P на поверхности двухлезвийных стальных (Р6М5) ножей хвостовых фрез дереворежущего инструмента и исследовать структуру и фазовый состав полученных покрытий.

Основная часть. Гальванические покрытия сплавом Ni-P наносили на кафедре химии, технологии электрохимических производств и материалов электронной техники (Х,ТЭПиМЭТ) БГТУ на подготовленную поверхность лезвий ножей на экспериментальной установке с применением источника постоянного тока марки

DC POWER SUPPLY HY3005-3 при средней катодной плотности тока 2 А/дм^2 из электролитов, состав которых представлен в таблице.

Состав исследуемых электролитов

Состав электролита	Количество, г/л
Электролит № 1 (рН = 3,0)	
$\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	200
NaCl	20
H_3BO_3	20
$\text{Na}_2\text{H}_2\text{PO}_2$	25
H_2SO_4	15
Электролит № 2 (рН = 2,2)	
$\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	140
HCl	2
$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$	15
NaH_2PO_2	4,5
Сахарин	2
Лаурилсульфат натрия	0,1

Время электролиза составляло 10 мин. Кислотность (рН) электролита измерялась рН-метром рН-150 с точностью $\pm 0,05\%$. Уровень рН до нужного значения корректировался концентрированным раствором серной кислоты. Перед осаждением покрытий проводилась подготовка образцов, которая представляла собой химическое обезжиривание при температуре $60\text{--}80^\circ\text{C}$ на протяжении $5\text{--}10$ мин, промывку в горячей (при температуре $40\text{--}60^\circ\text{C}$ в течение $0,5\text{--}1,0$ мин) и холодной (при температуре $18\text{--}25^\circ\text{C}$ на протяжении $1\text{--}2$ мин) воде, травление (в растворе H_2SO_4 ($100\text{--}300$ г/л) с ингибитором КИ-1 ($5\text{--}7$ г/л) при температуре $18\text{--}25^\circ\text{C}$ в течение $1\text{--}3$ мин) и холодную промывку, активацию, промывку. Толщина покрытий не превышала 10 мкм.

Фазовый состав полученных покрытий исследовался методом рентгеноструктурного анализа (РСМА) при помощи дифрактометра Ultima IV (Rugaku, Япония) в Cu-K_α излучении.

Морфология поверхности образцов исследовалась с помощью оптического микроскопа Leica DFC Camera CD Release Notes V6.4.1 при увеличении $400\times$, методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с использованием микроскопа LEO-1455 VP, который также применялся для определения элементного состава полученных покрытий методами СЭМ и рентгеноспектрального микроанализа (РСМА).

Покрытия подвергались также термообработке в муфельной печи при 400°C в течение 1 ч. Поверхность полученных покрытий отличалась от гладкой и характеризовалась трещиноватостью и наличием включений, расположенных в основном вдоль границ трещин (рис. 1).

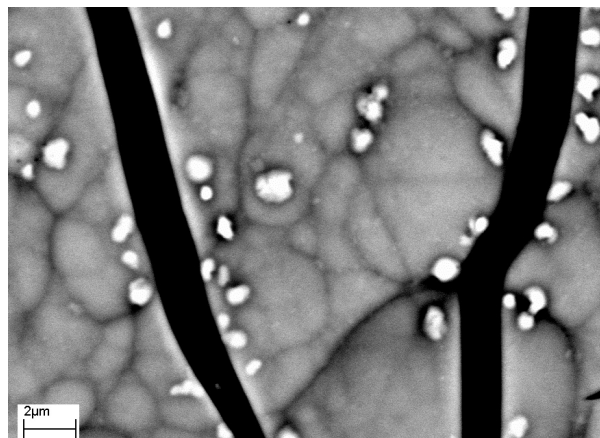


Рис. 1. РЭМ-снимок поверхности покрытий сплавом Ni-P

Известно, что получаемые из исходного раствора химического никелирования Ni-P-покрытия обладают высокими внутренними напряжениями растяжения, которые тем выше, чем меньше содержание фосфора в покрытиях, что вызывает образование микротрещин в покрытиях [2].

Исследования морфологии поверхности покрытий сплавом Ni-P (рис. 2) с помощью СЭМ и РСМА методов показали повышенную концентрацию углерода в включениях вдоль границ трещин (рис. 2, б) и значительное преобладание содержания никеля в сплаве по сравнению с фосфором (рис. 2, в).

В соответствии с рис. 3, а рентгенограммы сформированных покрытий сплавом Ni-P, полученных при различных плотностях тока (7 и 9 А/дм^2), показывают широкое галло в области углов $2\theta = 35\text{--}54^\circ$ и наличие отдельных пиков никеля при плотности тока 7 А/дм^2 . Это свидетельствует о том, что сплавы Ni-P, полученные при плотности тока до 7 А/дм^2 , состоят из отдельных фаз Ni_3P и Ni , тем самым подтверждая данные РСМА о значительном преобладании содержания никеля в сплаве по сравнению с фосфором. Сплавы Ni-P, сформированные при плотности тока $i = 7 \text{ А/дм}^2$, представляют собой метастабильный однородный твердый раствор внедрения фосфора на базе ГЦК решетки Ni , образование которого подтверждается литературными источниками [3]. В покрытиях, сформированных при плотностях тока $i > 7 \text{ А/дм}^2$, регистрируется образование аморфной структуры (рис. 3, а).

После термообработки сплава Ni-P твердый раствор фосфора в ГЦК решетке никеля обедняется фосфором при формировании соединений Ni_3P и Ni_2P . В результате на рентгенограммах наблюдаются фазы интерметаллических соединений (фосфидов Ni_3P и Ni_2P) и фазы фосфора (рис. 3, б).

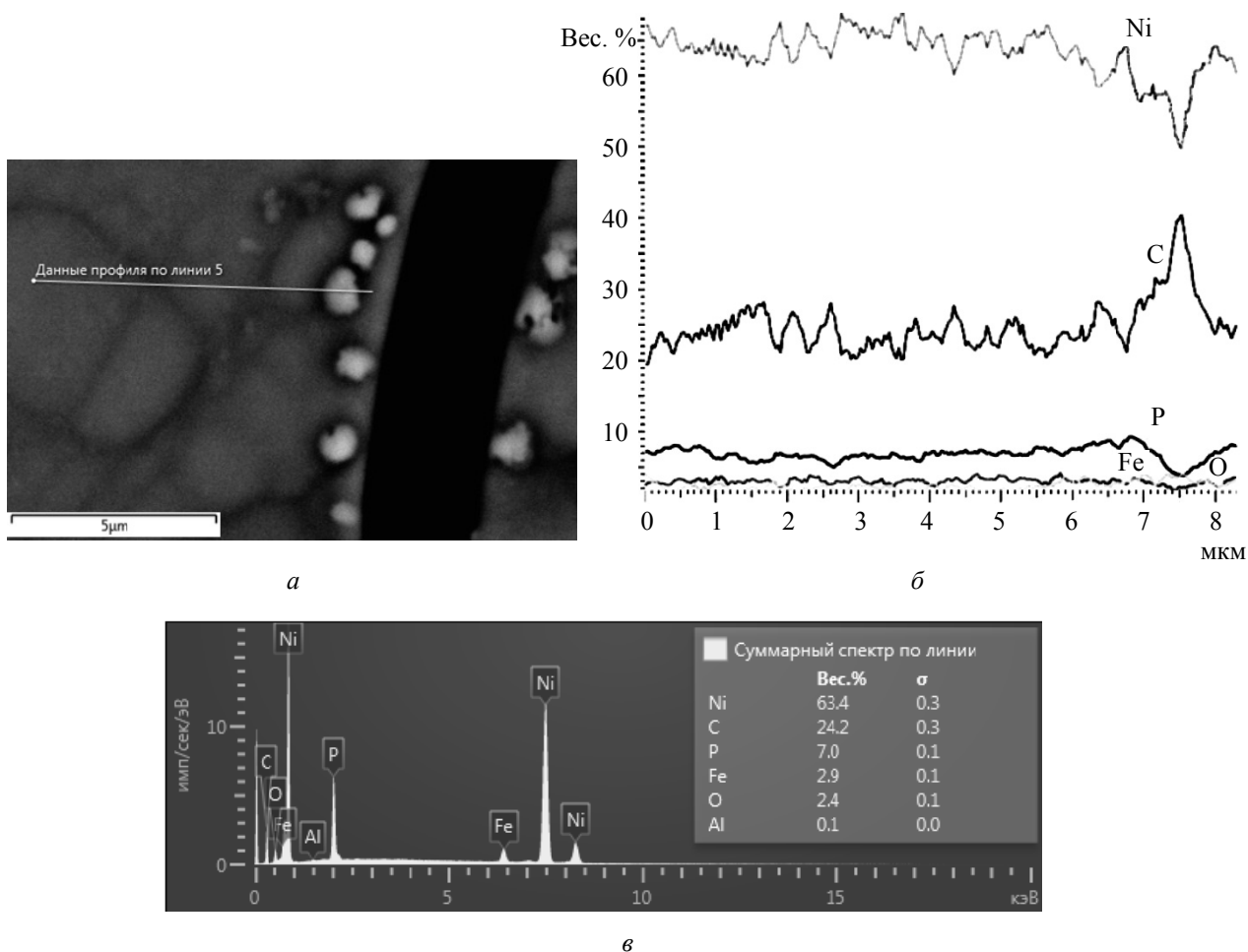


Рис. 2. СЭМ-снимок поверхности сплава Ni-P (а), распределение интенсивностей характеристического рентгеновского излучения элементов (P, Fe, Ni, C, O) (б) и спектр элементного состава (в) при сканировании вдоль линии профиля

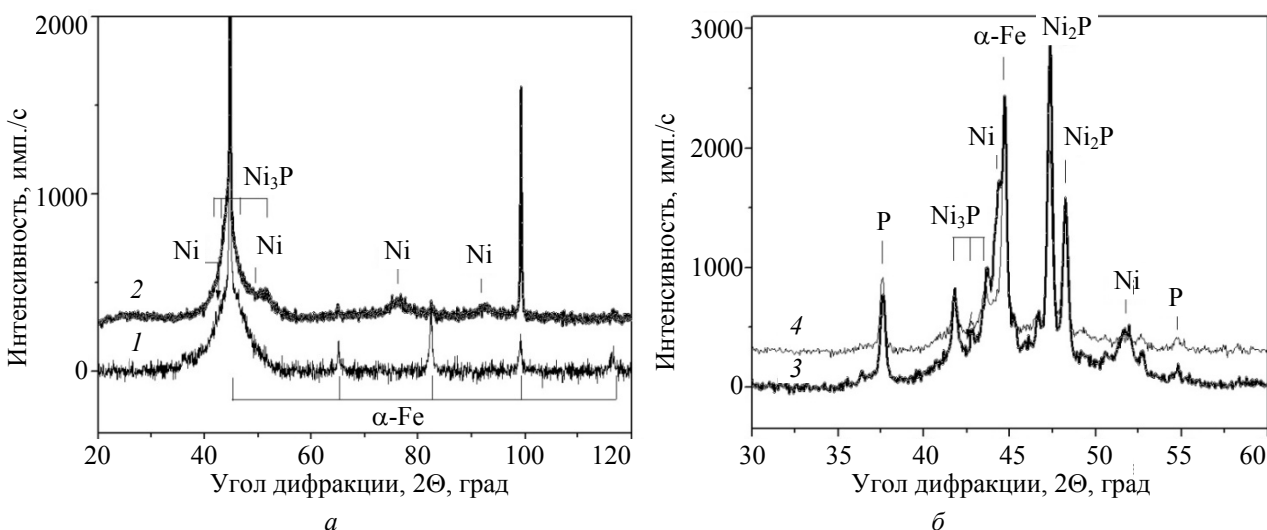


Рис. 3. Рентгенограммы покрытий Ni-P, полученных при $i = 9 \text{ A/dm}^2$ (1) и $i = 7 \text{ A/dm}^2$ (2) до термообработки (а), и покрытий Ni-P, полученных при $i = 9 \text{ A/dm}^2$ (3) и $i = 7 \text{ A/dm}^2$ (4) после термообработки (б)

Показано, что при плотностях тока $i > 5 \text{ A/dm}^2$ в связи с увеличением содержания фосфора в осадке формируется сплошное глобулярное покрытие, которое имеет смешанную аморфно-

кристаллическую структуру с фазой Ni_3P . С возрастанием размера глобул уменьшается контактная площадь, в результате чего увеличивается износостойкость покрытия сплавом Ni-P.

Заключение. Подобраны режимы осаждения и получены Ni-P гальванические покрытия на ножах фрезерного инструмента. Наличие углерода в слое Ni-P влияет на гетерогенность поверхности и увеличивает число границ между никелем и другими частицами в композите, способствуя образованию микротрещин на поверхности покрытий, так как формирование электроосажденных композитов сопровождается разви-

тием дислокационной структуры вблизи внедренных частиц и образованием эффективных барьеров (location walls), предотвращающих движение дислокаций [4]. Исследования показали, что покрытия Ni-P имеют глобулярные образования на поверхности, мелкокристаллически и частично аморфны, следовательно, обладают большой площадью межзеренных границ и большим количеством дефектов решетки.

Литература

1. Функциональные покрытия на основе сплавов железа / С. С. Попова [и др.] // Гальванотехника и обработка поверхности. 2001. Т. 9, № 1. С. 34–39.
2. Кузнецов В. В., Петухов И. В., Кузнецова Е. В. Морфология и структура электроосажденных пленок Ni-P // Металлы. 1987. № 5. С. 186–188.
3. Кукареко В. А., Ганавати Б., Кононов А. Г. Структура и дюрометрические свойства покрытий Ni-P, подвергнутых низкотемпературному отжигу // Механика машин, механизмов и материалов. 2014. № 3 (28). С. 59–63.
4. Скорость реакции выделения водорода на Ni,P-сплавах, модифицированных углеродными частицами разной природы / О. В. Долгих [и др.] // Конденсированные среды и межфазные границы. 2011. Т. 13, № 1. С. 49–55.

References

1. Popova S. S., Tseluikina G. V., Solovieva N. D., Tseluikin V. N. Functional coatings based on iron alloys. *Gal'vanotekhnika i obrabotka poverkhnosti* [Electroplating and Surface Treatment], 2001, vol. 9, no. 1, pp. 34–39 (In Russian).
2. Kuznetsov V. V., Petukhov I. V., Kuznetsova E. V. Morphology and structure of electrodeposited Ni-P films. *Metally* [Russian Metallurgy (Metally)], 1987, no. 5, pp. 186–188 (In Russian).
3. Kukareko V. A., Ganavati B., Kononov A. G. Structure and dyurometric properties of Ni-P coatings exposed to low temperature annealing. *Mekhanika mashin, mekhanizmov i materialov* [Mechanics of Machines, Mechanisms and Materials], 2014, no. 3 (28), pp. 59–63 (In Russian).
4. Dolgikh O. V., Saponova L. V., Sotskaya N. V., Vigdorovich V. I. The rate of hydrogen evolution reaction on the Ni,P-coatings modified by carbon particles of different nature. *Kondensirovannyye sredy i mezhfaznyye granitsy* [Condensed Matter and Interphases], 2011, vol. 13, no. 1, pp. 49–55 (In Russian).

Информация об авторах

Чаевский Вадим Витальевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: tchaievsky@tut.by

Жилинский Валерий Викторович – кандидат химических наук, старший преподаватель кафедры химии, технологии электрохимических производств и материалов электронной техники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: zhilinski@yandex.ru

Чернашей Олег – кандидат технических наук, доцент, заместитель декана факультета механики. Вильнюсский технический университет имени Гедиминаса (03224, г. Вильнюс, ул. Басанавичяюса, 28, Литовская Республика). E-mail: olecer@vgtu.lt

Information about the authors

Chayevski Vadzim Vitalievich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: chayevski@belstu.by

Zhylynskiy Valeriy Viktorovich – PhD (Chemistry), Senior Lecturer, the Department of Chemistry, Electrochemical Production Technology and Materials for Electronic Equipment. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: zhilinski@yandex.ru

Cernashejus Oleg – PhD (Engineering), Assistant Professor, Vice-Dean of the Faculty of Mechanics. Vilnius Gediminas Technical University (28, Basanaviciaus str., 03224, Vilnius, Republic of Lithuania). E-mail: olecer@vgtu.lt

Поступила 10.03.2016

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

УДК 681.51

Д. С. Карпович, А. Н. Шумский, В. В. Сарока
Белорусский государственный технологический университет

СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ БЕСПИЛОТНЫМ ЛЕТАТЕЛЬНЫМ АППАРАТОМ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕОРИИ НЕЧЕТКИХ МНОЖЕСТВ

Актуальность задачи синтеза систем управления беспилотным летательным аппаратом характеризуется сложностью их математической модели и большим числом экспериментально определяемых параметров.

Сформулирована методика проектирования модели системы регулирования с нечетким логическим контроллером. Приведены результаты имитационного моделирования системы с нечетким логическим контроллером.

Выполнен синтез и анализ системы управления беспилотным летательным аппаратом Гриф-1 в канале продольного движения (управление углом тангажа). Исследование динамики нечеткой системы управления проводилось в среде графического моделирования Simulink пакета Matlab. На основании полученных результатов моделирования выбраны рациональные алгоритмы управления для продольного канала движения беспилотного летательного аппарата.

Были получены функции принадлежности терм-множествам для входных и выходной лингвистических переменных. Установлена взаимосвязь между входными и выходными лингвистическими переменными в виде базы правил, а также выполнена визуализация поверхности нечеткого вывода.

Нечеткий логический вывод позволяет использовать для управления информацию качественного характера, которую невозможно формализовать при реализации традиционных законов регулирования. При этом нечеткое регулирование оказывается малочувствительным к возмущениям в определенном диапазоне и демонстрирует лучшие характеристики по сравнению с классическими регуляторами.

В данной статье предлагается подход синтеза нечеткого закона управления беспилотным летательным аппаратом по упрощенной его динамической модели и минимальной исходной информации о параметрах.

Ключевые слова: беспилотный летательный аппарат, система управления, нечеткий регулятор, математическая модель, лингвистическая переменная.

D. S. Karpovich, A. N. Shumski, V. V. Saroka
Belarusian State Technological University

CONTROL SYSTEM OF AN UNMANNED AERIAL VEHICLE USING THE THEORY OF FUZZY SETS

The urgency of the problem of synthesis of control systems of an unmanned aerial vehicle depends on the complexity of the mathematical model and a large number of experimentally determined parameters.

Formulated technique of designing the control system model with fuzzy logic controller. The results of simulation modeling the system with fuzzy logic controller are presented.

The synthesis and analysis of control systems of unmanned aerial vehicle Grif-1 in the channel longitudinal motion (pitch angle control). The investigation of the dynamics of fuzzy control system was carried out in the environment of graphic modeling Simulink Matlab package. Based on the simulation results rational control algorithms selected for the longitudinal motion of channel unmanned aerial vehicle were obtained.

Membership function term set for the input and output linguistic variables were obtained. The correlation between the input and output linguistic variables in a database instilled was found. As well as visualization of the surface of the fuzzy inference.

Fuzzy logic conclusion can be used to control the qualitative information that cannot be formalized in the implementation of regulation of traditional laws. This fuzzy regulation is insensitive to disturbances within a specific range and exhibits the best characteristics in comparison with classical regulators.

This article proposes an approach of synthesis of fuzzy control law of an unmanned aerial vehicle according to the simplified dynamic model and its minimum initial information about the options.

Key words: an unmanned aerial vehicle, control system, fuzzy control, mathematical model, linguistic variable.

Введение. Беспилотный летательный аппарат (БПЛА) – летательный аппарат без экипажа на борту [1]. Как правило, основная задача, возлагаемая на комплексы БПЛА, – проведение разведки труднодоступных районов, в которых получение информации обычными средствами, включая авиаразведку, затруднено или же подвергает опасности здоровье и даже жизнь людей. Информация, собранная борowymi средствами мониторинга, должна передаваться потребителю либо сохраняться на борту в обработанном виде или сплошным массивом данных. Наибольшее распространение в настоящее время получили малоразмерные комплексы ближнего радиуса действия, что обусловлено их невысокой ценой и серьезной экономией при применении БПЛА для задач подобных типов.

Несомненно, вероятность выполнения задачи беспилотным комплексом в большей мере зависит от его приборного оснащения.

Наличие полноценной системы автоматического управления – этим, по существу, и отличается беспилотный летательный аппарат от дистанционно управляемой модели [2].

В условиях наличия существенных ограничений и неопределенностей входной информации система управления БПЛА представляет значительную трудность формализации задач синтеза регуляторов БПЛА.

В связи с этим целесообразным является применение регуляторов, основанных на нечеткой логике.

Для реализации нечеткого регулятора необходимо определить входные и выходные лингвистические переменные, а также базу правил образования результирующей переменной.

Основная часть. Рассмотрим уравнения продольного движения летательного аппарата с рулевым аэродинамическим управлением. Будем полагать, что управление производится

в декартовой системе координат и летательный аппарат стабилизирован по крену [3].

При рассмотрении процессов движения самолета и вертолета широко использовались уравнения в малых отклонениях. При таком рассмотрении процесс линеаризации проводился применительно к некоторой опорной траектории, которая соответствует невозмущенному движению летательного аппарата.

Для многих режимов полета летательного аппарата такой способ описания движения не является эффективным. Это связано с трудностями выделения (назначения) невозмущенного движения и тем, что отклонения не являются малыми. Вышеназванные трудности возможно преодолеть, используя способ линеаризации исходных уравнений лишь относительно тех координат, для которых действительно имеют место зависимости, близкие к линейным в рабочем диапазоне их изменения.

Применим такой метод линеаризации к уравнениям продольного движения летательного аппарата:

$$\begin{aligned} mV\dot{\theta} &= Y_n + P\sin\alpha - mg\cos\theta; \\ m\dot{V} &= -X_a + P\cos\alpha - mg\sin\theta; \\ I_z\ddot{\vartheta} + m_z^w z w_z + m_z^a a &= m_z^e \varepsilon; \\ \vartheta &= \theta + a. \end{aligned} \tag{1}$$

Если участок траектории летательного аппарата имеет постоянный наклон или горизонтален, то в системе управления может быть выработано или программно введено управляющее воздействие, которое компенсирует составляющую силы веса подъемной силой. В этом случае уравнение движения центра масс представляется интегрирующим звеном.

Преобразуем уравнение угловых движений (1) к такому виду, чтобы оно позволяло

найти угол атаки. Используя уравнение связи углов и привлекая уравнение движения центра масс, найдем первую и вторую производные угла тангажа:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \dot{\theta} + \dot{\alpha} = \frac{1}{T_\theta} \alpha - \frac{g}{V} \cos\theta + \dot{\alpha}; \\ \ddot{\theta} &= \ddot{\theta} + \ddot{\alpha} = \frac{1}{T_\theta} \dot{\alpha} - \frac{\dot{T}_\theta}{T_\theta^2} \alpha - \\ &\quad - \frac{d}{dt} \left(\frac{g}{V} \cos\theta \right) + \ddot{\alpha}. \end{aligned} \quad (2)$$

Подставим эти выражения в уравнения угловых движений и получим:

$$\begin{aligned} I_z \ddot{\alpha} + \left(m_z^\omega z + \frac{I_z}{T_\theta} \right) \dot{\alpha} + \\ + \left(m_z^\delta + \frac{m_z^\omega z}{T_\theta} - I_z \frac{\dot{T}_\theta}{T_\theta^2} \right) \alpha = \\ = m_z^\delta \delta + m_z^\omega z \frac{g}{V} \cos\theta + I_z \frac{d}{dt} \frac{g}{V} \cos\theta. \end{aligned} \quad (3)$$

Используя операторную форму записи, преобразуем к следующему виду:

$$(D^2 + 2\zeta_\alpha \omega_\alpha D + \omega_\alpha^2) \alpha = k_\delta \delta + f_g, \quad (4)$$

где

$$\omega_\alpha^2 = \frac{m_z^\alpha}{I_z} + \frac{m_z^\omega z}{I_z T_\theta} - \frac{\dot{T}_\theta}{T_\theta^2};$$

$$2\zeta_\alpha \omega_\alpha = \frac{m_z^\omega z}{I_z} + \frac{1}{T_\theta};$$

$$k_\delta = \frac{m_z^\delta}{I_z};$$

$$f_g = \left(\frac{m_z^\omega z}{I_z} + D \right) \frac{g}{V} \cos\theta.$$

После подстановки численных значений была получена следующая передаточная функция:

$$W(p) = \frac{y}{u} = \frac{1,8p + 1}{10,2p^2 + 12p + 1}. \quad (5)$$

Из выражения (5) видно, что связь между отклонением руля и углом тангажа, как и у короткопериодического движения самолета в продольном канале, выражается передаточной функцией колебательного звена. Коэффициенты этой

передаточной функции зависят от высоты, скорости, массы и моментов инерции летательного аппарата и других величин, изменяющихся в полете.

В теории управления большое внимание уделяется синтезу систем управления при недостаточной информации об объекте управления и действующих на него полезных сигналах, и помех. Один из методов решения этой проблемы – использование нечетких методов управления. В качестве корректирующих устройств систем автоматического управления (САУ) получили широкое распространение пропорционально-интегральные (ПИ) регуляторы.

Была поставлена задача снижения времени переходного процесса. В качестве базовой структуры, формирующей сигнал управления для САУ, выбран ПИ-регулятор, изменение коэффициентов которого происходит в зависимости от данных, получаемых с нечеткого контроллера. Сигнал, подаваемый на силовую часть цепи, состоит из пропорциональной и интегральной частей. Причем каждая из этих частей регулируется с помощью нечеткой логики в зависимости от двух входных переменных нечеткого блока.

Отличие ПИ-регулятора с контроллером, основанным на нечеткой логике, от обычного заключается в том, что коэффициенты усиления в пропорциональной и интегрирующей цепях регулятора не являются статическими, т. е. зависят от состояния системы в текущий момент времени. Это позволяет качественно изменить процесс управления, учесть параметры сигналов в системе (скорость изменения сигнала, ускорение), а также сделать процесс управления более адаптивным.

Структура и принцип работы контроллера, основанного на нечеткой логике. В современных системах применяют контроллеры, основанные на нечеткой логике [4]. Рассмотрим принцип работы контроллера.

1. На вход контроллера поступает необходимое для решения конкретной задачи число входных сигналов (в настоящем проекте два), образующих входной четкий вектор X.

2. Происходит процедура фазификации, т. е. исходя из текущего значения четкого сигнала, на основании известных функций принадлежности каждому сигналу четкого вектора присваивается определенное входное значение (терм), образуя входной нечеткий вектор. Сигналы, входящие в этот вектор, называются лингвистическими переменными.

3. Программа нечеткого логического вывода (FIS-структура) на основании нечеткой базы знаний ставит в соответствие каждому вектору выходной нечеткий вектор, являющийся результатом нечеткого логического вывода.

4. Значениям (термам) лингвистических переменных, составляющих выходной вектор, на основании функций принадлежности ставятся в соответствие определенные четкие значения сигналов, образующие выходной четкий вектор Y , т. е. происходит процедура дефазификации.

5. Сигналы, формирующие вектор Y , поступают в схему регулятора для реализации процесса управления.

Следовательно, первой задачей является определение лингвистических переменных, составление их терм-множеств и функций принадлежности, определение логических переменных контроллера и их функций принадлежности. Как было отмечено ранее, входными сигналами для контроллера, основанного на нечеткой логике, являются пропорциональная составляющая P и интегральная составляющая I . Применительно к контроллеру эти сигналы – лингвистические переменные. Для данных переменных вводятся следующие термы. Для P , I и выходной лингвистических переменных:

- отрицательное большое (NL);
- отрицательное среднее (NM);
- отрицательное, близкое к нулю (N);
- нулевое (Z);
- положительное, близкое к нулю (P);
- положительное среднее (PM);
- положительное большое (PL).

Для реализации процедур фазификации и дефазификации задаются функции принадлежности для каждой входной и выходной переменных (рис. 1–3).

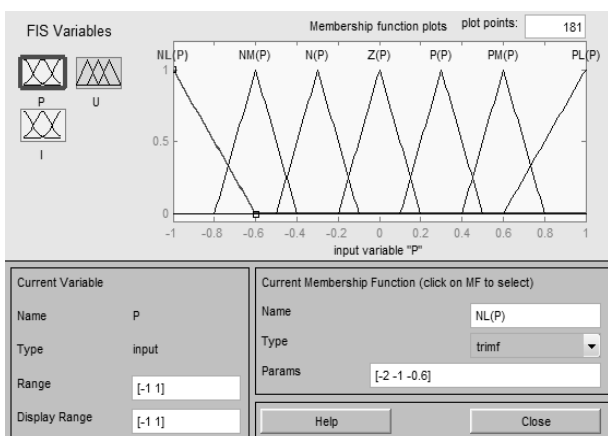


Рис. 1. Функция принадлежности для терм-множества лингвистической переменной P

При формировании нечеткой базы знаний контроллера также выполняются эксперименты в целях корректировки функций принадлежности лингвистических переменных. В контроллере база знаний задается непосредственно совокуп-

ностью правил «если – то» с помощью стандартных функций языков программирования.

Исследуя нечеткую базу знаний контроллера и функции принадлежности лингвистических переменных, нетрудно заметить, что в контроллере реализуется идея подачи сигнала с регулятора, несколько опережающего происходящие в системе процессы. Так, при запуске системы коэффициент усиления в пропорциональной цепи повышается, уменьшая время переходного процесса, а при приближении сигнала к требуемому значению резко снижается, уменьшая перерегулирование в системе.

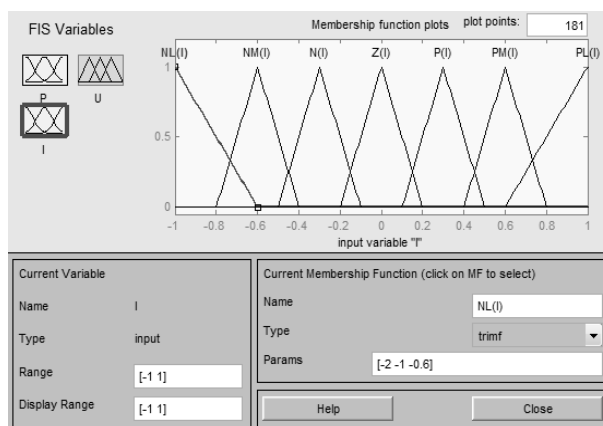


Рис. 2. Функция принадлежности для терм-множества лингвистической переменной I

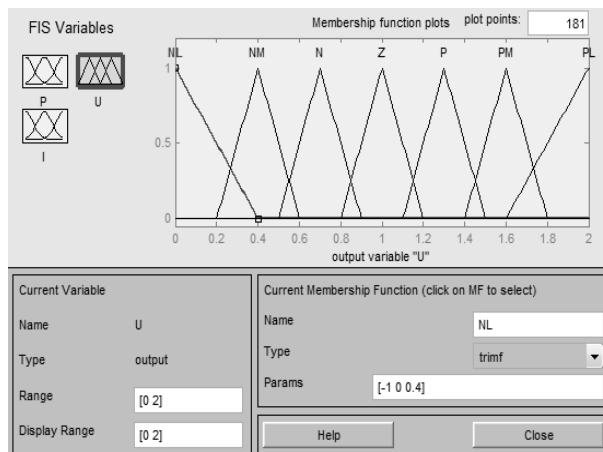


Рис. 3. Функция принадлежности для терм-множества лингвистической выходной переменной

База правил имеет следующий вид:

1. If (P is NL) and (I is NL) then (U is NL).
2. If (P is NL) and (I is NM) then (U is NL).
3. If (P is NL) and (I is N) then (U is NM).
4. If (P is NL) and (I is Z) then (U is NM).
5. If (P is NL) and (I is P) then (U is Z).
6. If (P is NL) and (I is PM) then (U is Z).
7. If (P is NL) and (I is PL) then (U is Z).

8. If (P is NM) and (I is NL) then (U is NL).
9. If (P is NM) and (I is NM) then (U is NL).
10. If (P is NM) and (I is N) then (U is NM).
11. If (P is NM) and (I is Z) then (U is NM).
12. If (P is NM) and (I is P) then (U is Z).
13. If (P is NM) and (I is PM) then (U is Z).
14. If (P is NM) and (I is PL) then (U is Z).
15. If (P is N) and (I is NL) then (U is NM).
16. If (P is N) and (I is NM) then (U is NM).
17. If (P is N) and (I is N) then (U is Z).
18. If (P is N) and (I is P) then (U is PM).
19. If (P is N) and (I is PL) then (U is PM).
20. If (P is N) and (I is PL) then (U is PM).
21. If (P is Z) and (I is NL) then (U is NM).
22. If (P is Z) and (I is N) then (U is Z).
23. If (P is Z) and (I is Z) then (U is Z).
24. If (P is Z) and (I is P) then (U is PM).
25. If (P is Z) and (I is PM) then (U is PM).
26. If (P is Z) and (I is PL) then (U is PM).
27. If (P is P) and (I is NL) then (U is Z).
28. If (P is P) and (I is NM) then (U is Z).
29. If (P is P) and (I is N) then (U is PM).
30. If (P is P) and (I is Z) then (U is PM).
31. If (P is P) and (I is P) then (U is PL).
32. If (P is P) and (I is PM) then (U is PL).
33. If (P is P) and (I is PL) then (U is PL).
34. If (P is PM) and (I is NL) then (U is Z).
35. If (P is PM) and (I is NM) then (U is Z).
36. If (P is PM) and (I is N) then (U is PM).
37. If (P is PM) and (I is Z) then (U is PM).
38. If (P is PM) and (I is P) then (U is PL).
39. If (P is PM) and (I is PL) then (U is PL).
40. If (P is PM) and (I is PL) then (U is PL).
41. If (P is PM) and (I is PL) then (U is PL).
42. If (P is PL) and (I is NL) then (U is Z).
43. If (P is PL) and (I is NL) then (U is Z).
44. If (P is PL) and (I is NM) then (U is Z).
45. If (P is PL) and (I is N) then (U is PM).
46. If (P is PL) and (I is Z) then (U is PM).
47. If (P is PL) and (I is P) then (U is PL).
48. If (P is PL) and (I is PM) then (U is PL).
49. If (P is PL) and (I is PL) then (U is PL).

Составление программы нечеткого логического вывода. Программа нечеткого логического вывода представляет собой алгоритм получения нечетких логических заключений, выражающихся в значениях выходных лингвистических переменных. Процедура нечеткого логического вывода происходит на основе нечеткой базы знаний с использованием функций принадлежности лингвистических переменных.

Структуры систем с ПИ-регулятором и ПИ-подобным регулятором, основанном на нечеткой логике, имеют вид, показанный на рис. 4 и 5.

Время переходного процесса – 30 с, перерегулирование – 0%, статическая ошибка – 0%.

Как видно из графика переходного процесса (рис. 6), система с переменными, такими как постоянная времени объекта и коэффициент усиления, и применением нечеткого регулятора является устойчивой.

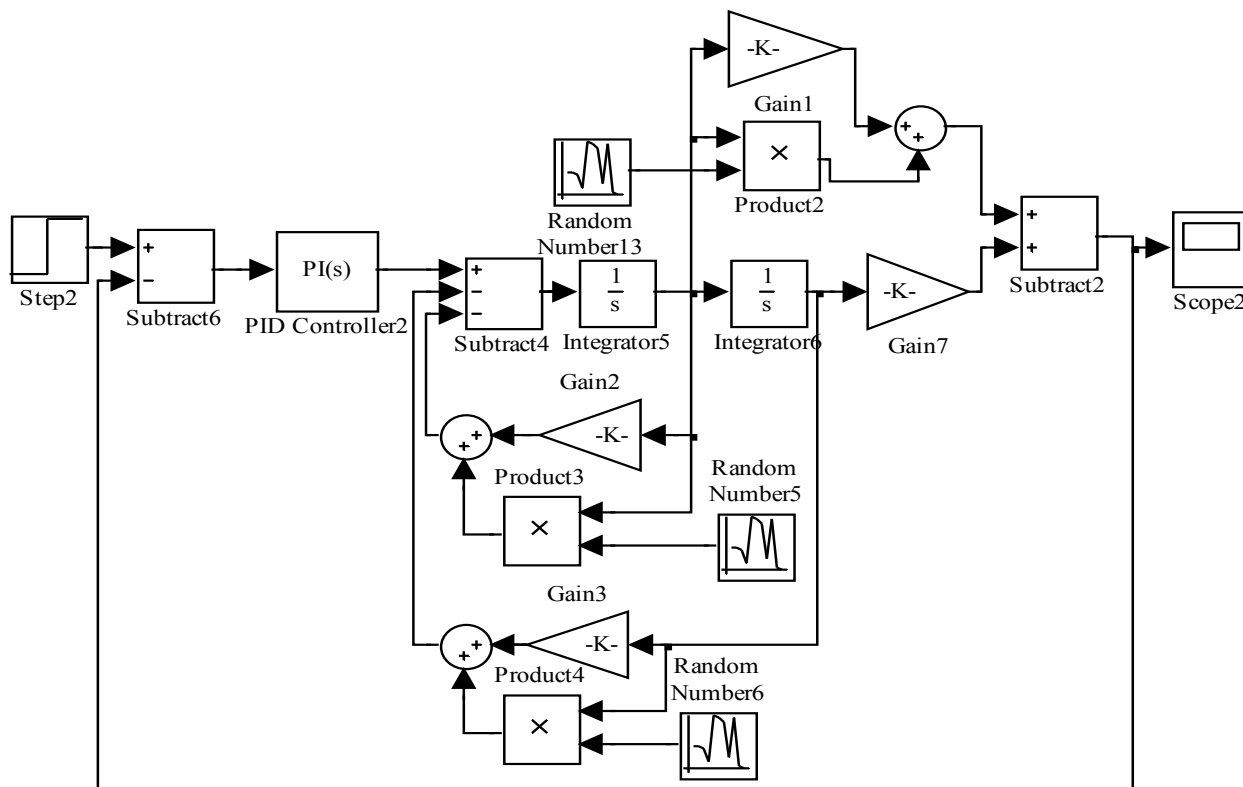


Рис. 4. Структурная схема системы управления с ПИ-регулятором

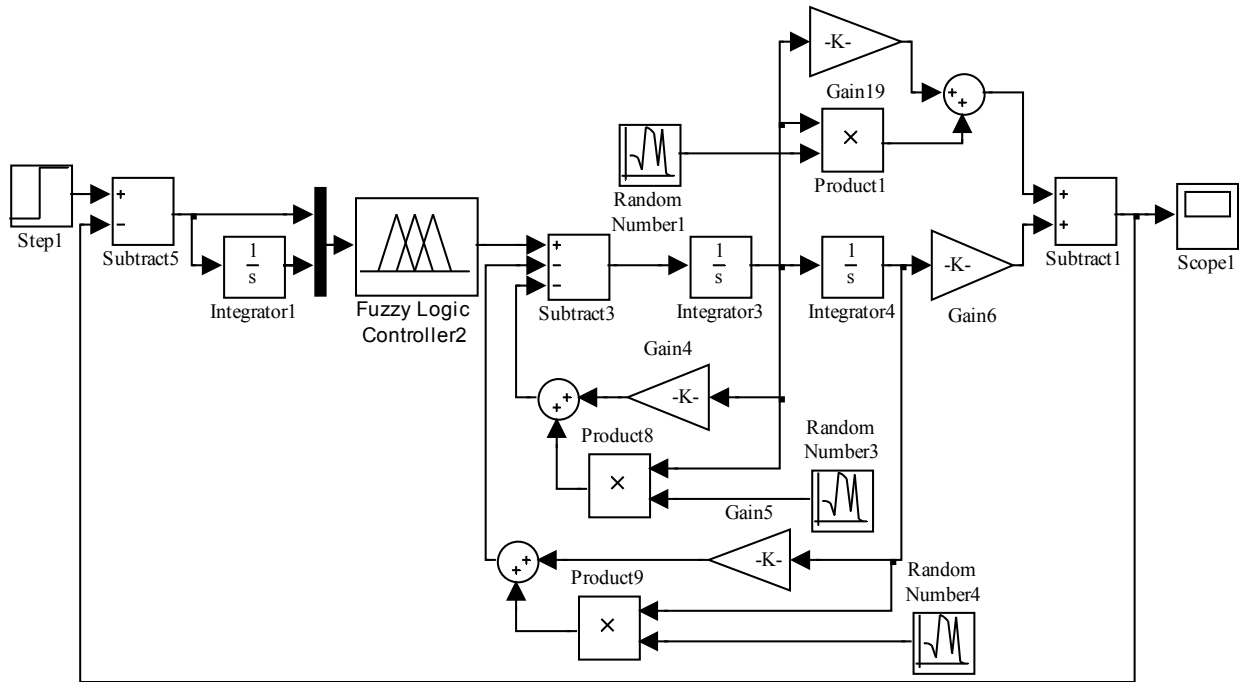


Рис. 5. Структурная схема системы управления ПИ-подобного регулятора, основанного на нечеткой логике с переменными коэффициентами

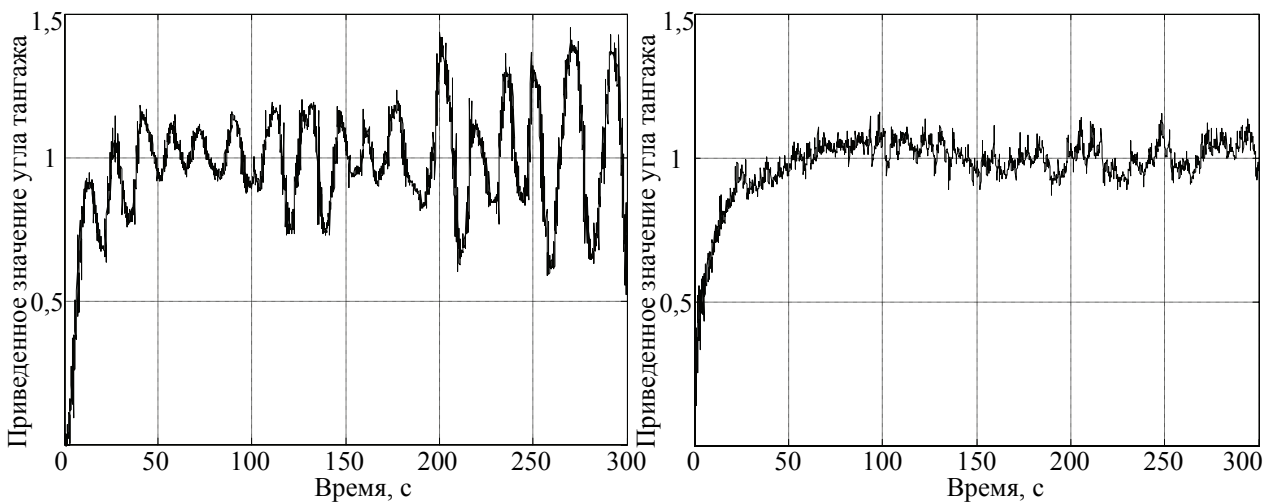


Рис. 6. Переходный процесс системы с ПИ-регулятором (а) и переходный процесс с ПИ-подобным нечетким регулятором и переменными коэффициентами (б)

Заключение. Таким образом, динамика САУ с нечетким контроллером всецело определяется архитектурой системы нечеткого вывода: методом построения и содержанием базы продукционных правил, а также способом реа-

лизации алгоритма нечеткого вывода. Поэтому при проектировании рассмотренного типа САУ с особой тщательностью необходимо подходить к выбору экспертов, методикам экспертного опроса и формированию базы правил.

Литература

1. Особенности классификации БПЛА самолетного типа / Н. С. Сенюшкин [и др.] // Молодой ученый. 2010. Т. 1, № 11. С. 65–68.
2. Беспилотные летательные аппараты / С. В. Ганин [и др.]. СПб.: Невский бастион, 1999. 160 с.
3. Красовский А. А., Вавилов Ю. А., Сучков А. И. Системы автоматического управления летательным аппаратом. М.: Изд-во ВВИА им. проф. Н. Е. Жуковского, 1971. 478 с.
4. Кудинов Ю. И. Нечеткие системы управления // Известия Академии наук. Техническая кибернетика. 1990. № 5. С. 196–206.

References

1. Senyushkin N. S., Yamal R. R., Usov D. V., Muraeva M. A. Features of the classification of UAV aircraft of the type. *Molodoy uchenyy* [The young scientist], 2010, vol. 1, no. 11, pp. 65–68 (In Russian).
2. Ganin S. V., Karpenko A. V., Kolnogorov V. V., Petrov G. F. *Bespilotnyye letatel'nyye apparaty* [Unmanned aerial vehicles]. St. Petersburg, Nevskiy bastion Publ., 1999. 160 p.
3. Krasovskiy A. A., Vavilov Yu. A., Suchkov A. I. *Sistemy avtomaticheskogo upravleniya letatel'nyy apparatom* [Automatic control system of the aircraft]. Moscow, Izdatel'stvo VVIA imeni professora N. E. Zhukovskogo Publ., 1971. 478 p.
4. Kudinov Ya. I. Fuzzy control systems. *Izvestiya Akademii nauk. Tekhnicheskaya kibernetika* [Proceedings of the Academy of Sciences. Technical Cybernetics], 1990, no. 5, pp. 196–206 (In Russian).

Информация об авторах

Карпович Дмитрий Семенович – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: karpovich@tut.by

Шумский Андрей Николаевич – аспирант кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: andreishumski91@gmail.com

Сарока Виктор Викторович – кандидат технических наук, старший преподаватель кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: viksar@mail.ru

Information about the authors

Karpovich Dmitriy Semenovich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Head of the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: karpovich@tut.by

Shumski Andrei Nikolaevich – PhD student, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: andreishumski91@gmail.com

Saroka Viktor Viktorovich – PhD (Engineering), Senior Lecturer, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: viksar@mail.ru

Поступила 07.03.2016

УДК 681.53

И. Г. Сухорукова, Д. А. Гринюк, И. О. Оробей
Белорусский государственный технологический университет

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ФИЛЬТРАЦИИ И СГЛАЖИВАНИЯ В ИНФОРМАЦИОННЫХ КАНАЛАХ НА КРИТЕРИЙ СЕРИЙ

В статье производится оценка возможностей использования критерия серий для адаптивной фильтрации. Выполнено моделирование работы измерительных каналов в широком диапазоне частот и в условиях различных помех, которые характерны для радиоэлектроники. Тестирование производилось при помехах со следующими распределениями случайной величины: нормальным, равномерным, экспоненциальным, треугольным, трапециидальным, арктангенсуальным. Случайные величины генерировались встроенными средствами Matlab. После смешения с полезным гармоническим сигналом временной ряд сглаживался тремя типами фильтров: бегущего среднего, медианой выборки, низких частот. В процессе моделирования параметры фильтров изменялись в широком диапазоне. Длина наблюдения серий варьировалась от 8 до 64. Проводилась оценка влияния условий на основные показатели критерия: количество серий, математическое ожидание, дисперсия, полный и упрощенный коэффициенты стационарности.

На основании полученных результатов сделаны выводы о возможности использования основных параметров критерия серий для адаптивной фильтрации. Несмотря на различный тип помех серий в широком диапазоне динамики распределены по нормальному закону. Оценка коэффициентов корреляции между параметрами критерия серий и полезным сигналом позволяет рекомендовать использование количества серий и упрощенного критерия стационарности только при высокой динамике. Из-за случайного характера основных параметров критерия серий для адаптации лучше применять триггерные варианты. Предложено несколько вариантов схем адаптивной фильтрации.

Ключевые слова: адаптивная фильтрация, критерий серий, стационарность.

I. G. Suhorukova, D. A. Hryniuk, I. O. Orobei
Belarusian State Technological University

INFLUENCE OF CONDITIONS OF FILTERING AND SMOOTHING IN INFORMATION CHANNELS RUNS TESTS

The article considers the runs tests for the adaptive filtering. Simulation of the measurement channels operation in a wide range of frequencies and in different interference conditions that are typical for electronics, was performed. Working conditions were created at various noises as in. Testing was made in case of noises from distribution of a random variable: normal, uniform, exponential, triangular, trapezoidal; arctangent. Random variables were generated by the built-in means of Matlab. After mixing with the useful harmonic signal the time series was filtered with three types of filters: the running average, median filter, the filter of low frequency. In the course of simulation parameters of filters changed in a broad range. The length of observation of series varied from 8 to 64. The impact assessment of conditions on the main indices of the criterion was carried out: quantity of series, mathematical expectation, dispersion, the complete and simplified stationarity coefficient. Influence of quantization on level on quantity of series is carried out.

Based on the results of the analysis the conclusions are made about the possibility of using of the main parameters of the criterion for adaptive filtering. Various types of noise lead to a series of normal distribution. The normal distribution is destroyed by high dynamics of deterministic time series. The correlation coefficients show that at low frequencies to adapt better to use a mathematical expectation, dispersion or complete stationarity, but at high frequencies is used quantity of series. Because of the accidental character of key parameters of the criterion of series for adaptation it is better to use trigger options. Several versions of schemes for the adaptive filtering are offered.

Key words: adaptive filtering, runs tests, stationary.

Введение. Динамика временных рядов в цифровой фильтрации может быть обнаружена критерием серий или критерием Вальда–Вольфовица (ВВ) [1]. Данный критерий относится к непараметрическим и широко используется в биологиче-

ских, физических, социальных и экономических исследованиях. В работе [2] были проведены исследования использования ВВ с целью оптимизации его работы, а в [3] выполнена апробация на промышленном логическом контроллере.

Одним из актуальных вопросов является работа принципа адаптации при условии не гауссовского распределения шумов на входе фильтра. В метрологической практике при анализе работы измерительных приборов используют ограниченный ряд стандартных аппроксимирующих функций распределения [4]: нормальную, равномерную, треугольную, арксинусоидальную, экспоненциальную и Рэлея.

Математическое моделирование производилось в Matlab. При постановке математического эксперимента случайные данные выбранных распределений генерировались таким образом, чтобы их мощности на фиксированном периоде времени отличались не более чем на 1%.

Помехи смешивались с гармоническим сигналом (ГС) с частотами от 0 до 0,03 Гц и пропускались через фильтры. Соотношение между амплитудой полезного сигнала и величиной дисперсии помехи не ниже 10 по нормальному распределению. В качестве фильтров анализировался фильтр бегущего среднего и с медианной выборкой [1] с длиной от 3 до 7 и цифровые фильтры 1–3 порядков, фильтр Баттерворта. Производилась оценка влияния эффекта квантования сигнала по уровню на параметры критерия серий.

Количество серий N варьировалось от 8 до 64. Для всех вариантов определялись количество серий r , математическое ожидание μ , дисперсия σ и оценки стационарности γ_1, γ_2 :

$$\mu = \frac{2N^+N^-}{N} + 1; \quad (1)$$

$$\sigma^2 = \frac{2N^+N^-(2N^+N^- - N)}{N^2(N-1)}; \quad (2)$$

$$\gamma = \gamma_1 = \exp\left(-\frac{(r-\mu)^2}{K\sigma^2}\right); \quad \gamma = \gamma_2 = \frac{r}{\mu}, \quad (3)$$

где N^+, N^- – количество положительных и отрицательных разниц до и после фильтра; K – коэффициент сжатия-растяжения вероятности статистической независимости.

Результаты и обсуждение. Для медианного (МФ), бегущего среднего (БС), фильтров первого (ФНЧ1) и третьего (ФНЧ3) порядков в отсутствие ГС и на малых частотах, при минимальных параметрах фильтров (MinTune) имеются отклонения от нормального распределения больше, чем при максимальных (MaxTune) (рис. 1–3). Графики (рис. 1–4) построены функцией распределения плотности вероятностей (РПВ) методом непараметрического сглаживания `ksdensity()`. В целом, чем больше сдвиг фаз фильтра, тем больше форма распределения случайных данных соответствует идеальному

колоколу Гаусса (рис. 3 и 4). Наличие у помехи (как, например, при экспоненциальном распределении) ненулевого математического ожидания влияет и на μ серий.

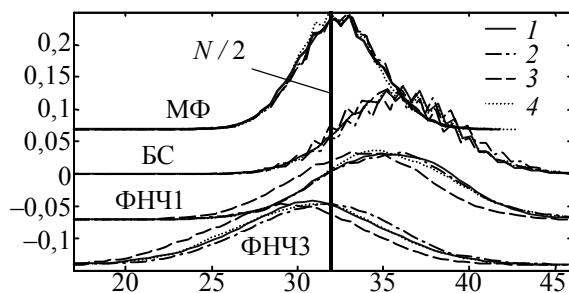


Рис. 1. РПВ без ГС с MinTune при $N = 64$. Часть 1: 1 – нормальное; 2 – равномерное; 3 – экспоненциальное; 4 – релейное

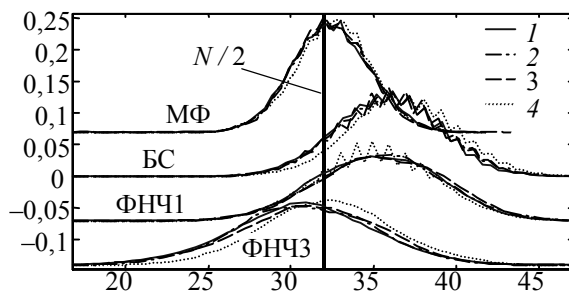


Рис. 2. РПВ без ГС с MinTune при $N = 64$. Часть 2: 1 – нормальное; 2 – треугольное; 3 – трапециидальное; 4 – арктангенсуальное

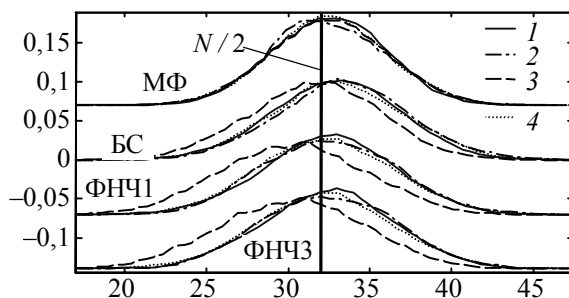


Рис. 3. РПВ без ГС с MaxTune при $N = 64$. Часть 1: 1 – нормальное; 2 – равномерное; 3 – экспоненциальное; 4 – релейное

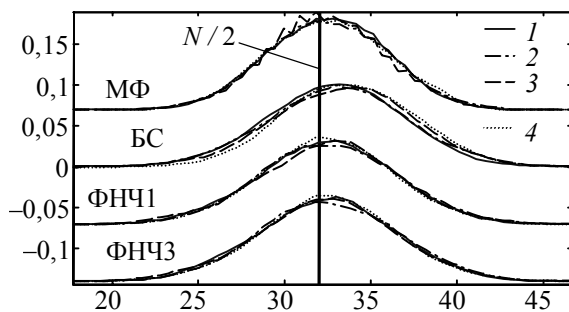


Рис. 4. РПВ без ГС с MaxTune при $N = 64$. Часть 2: 1 – нормальное; 2 – треугольное; 3 – трапециидальное; 4 – арктангенсуальное

Кривая для МФ, работа которого основана на случайном механизме, наиболее приближена к кривой нормального распределения и $\mu = N/2$. Такой эффект происходит и при увеличении параметров фильтров.

При повышении частоты математическое ожидание серий уменьшается (рис. 5 и 6). На некоторой частоте, значение которой зависит от соотношения между дисперсией помехи и амплитудой полезного сигнала, μ приближается к нулю и колокол Гаусса «разрушается». Первоначально уход от гауссовского распределения происходит у цифровых фильтров по причине проявления фазовых сдвигов. При этом равномерное распределение, трапециидальное и арктангенсуальное, которые имеют большую плотность в области больших отклонений, дольше сохраняют нормальное распределение.

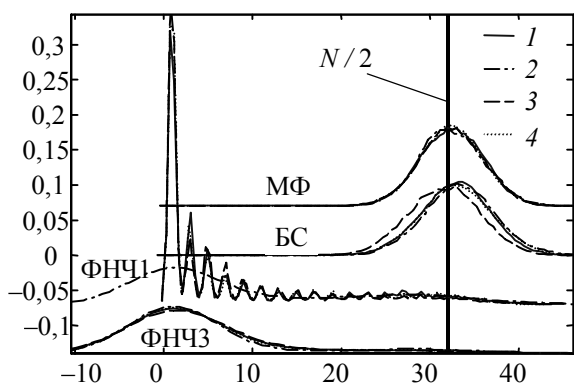


Рис. 5. РПВ при средних частотах с MaxTune:
1 – нормальное; 2 – равномерное;
3 – экспоненциальное; 4 – релейное

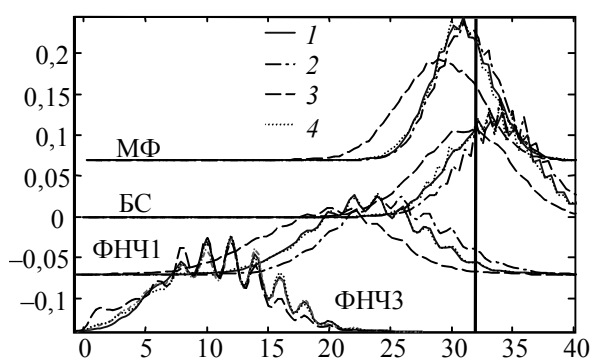


Рис. 6. РПВ при больших частотах с MinTune:
1 – нормальное; 2 – равномерное;
3 – экспоненциальное; 4 – релейное

Если при максимальной частоте полезного сигнала при длине 3 МФ и BC значение математического ожидания еще около 32, то уже при длине 4 происходит существенное отклонение, а при 7 значение математического ожидания смещается к 22–23.

При снижении r до 48 графики РПВ деформируются подобно кривым на рис. 6 для ФНЧ3. При длине r в 16 провалы опускаются до нуля. В то же время $\mu = N/2$. Это хорошо согласуется с положением, что при моделировании случайных процессов рекомендуется выбирать длину выборки не менее 100. Поэтому алгоритм использования критерия серий, работа которого исходит из нормального распределения серий, должен иметь длину наблюдения 64 и выше.

Изменения параметров серий для различной динамики, типов фильтров и их настроек можно видеть на рис. 7–11. Кривая s на графиках приведена без масштаба для визуального сравнения с остальными параметрами.

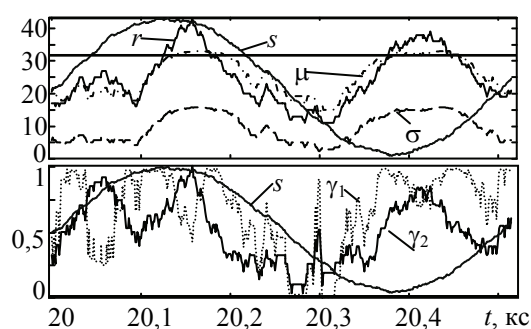


Рис. 7. Изменение показателей критерия серий при слабой динамике s для BC

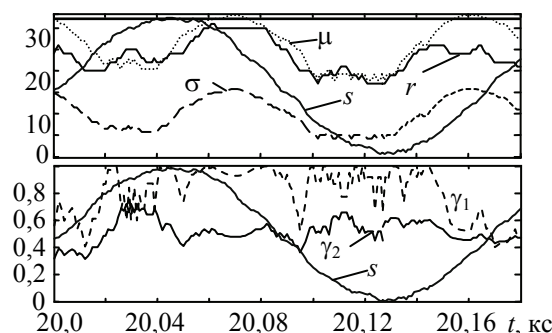


Рис. 8. Изменение показателей критерия серий при короткой длине BC

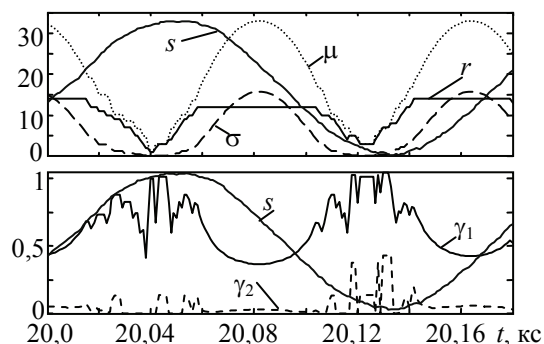


Рис. 9. Изменение показателей критерия серий при максимальной длине BC

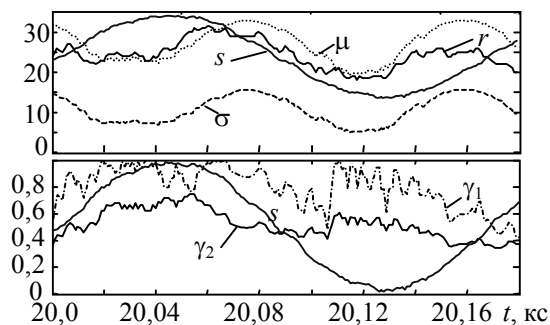


Рис. 10. Изменение показателей критерия серий при минимальной длине МФ

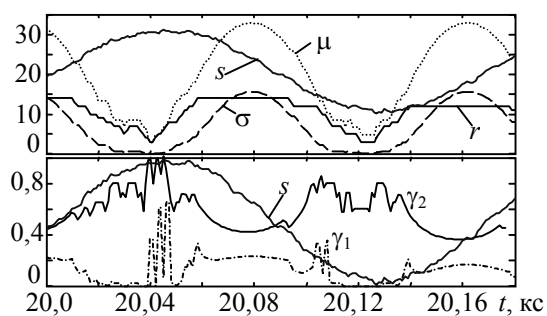


Рис. 11. Изменение показателей критерия серий для ФНЧ

Графики показывают, что в той или иной степени r , μ , σ , γ_1 и γ_2 могут выступать в качестве параметра оценки динамики тренда для адаптации. Установить же аналитическую зависимость между ними и динамикой сигнала проблематично. В то же время можно рекомендовать использование интервальной адаптации для ступенчатой перенастройки фильтров.

Влияние коэффициента сжатия-растяжения вероятности статистической независимости на γ_1 отражено на рис. 12. Выбор значения K зависит от структуры адаптации и той гипотезы (стационарный процесс или нестационарный), которая в данный момент интересует.

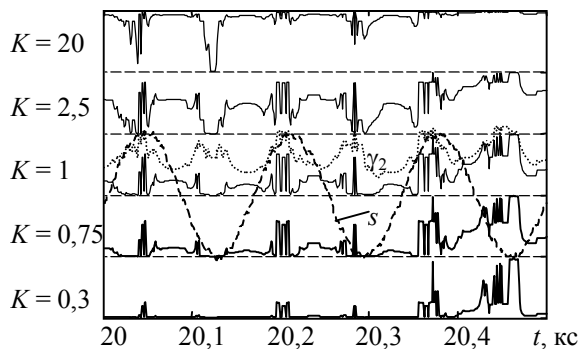


Рис. 12. Влияние K на γ_1

Увеличение K склоняет γ_1 в сторону гипотезы стационарности, а уменьшение – нестационарности. Путем изменения K можно реализовать триг-

герную структуру с зоной нечувствительности для уменьшения зависимости от шума γ_1 .

При одинаковом входном сигнале фильтры по-разному формируют серии и их показатели. Даже близкие по принципу работы МФ и БС дают разную картину. Цифровые фильтры имеют более узкий диапазон частот, при котором можно говорить о стабильном определении динамики ввиду большей зависимости фазы от частоты. БС и МФ имеют больший диапазон детектирования динамики, но хуже сглаживают. Возможен вариант построения наблюдателя слежения за динамикой для своевременной перенастройки фильтра основного канала. Для этого можно использовать и ФНЧ с автоподстраиваемой в зависимости от динамики малой постоянной времени по сравнению с основным каналом. Данный подход вместе с изменением K , как было указано выше, скорее всего окажется более выигрышным, чем поиск зависимости между γ_1 , γ_2 , μ , r , σ и s динамикой тренда.

Производилась оценка корреляции между γ_1 , γ_2 , μ , r , σ и s . Коэффициент корреляции (КК) выше между s и γ_1 , μ , σ в среднем на четверть, чем между γ_2 , r и s . При этом для МФ и БС КК при частотах 10^{-4} начинает быстро подниматься и остается на одном уровне до 10^{-2} , а затем резко возрастает, когда количество серий r сдвигается ближе к нулю, чем к значению $N/2$. Если длина БС на среднем диапазоне частот незначительно влияет на корреляцию, то при больших частотах при некоторой длине БС коэффициент корреляции достигает максимума для μ и σ , а затем начинает падать, тогда как для остальных параметров КК начинает резко расти. Для ФНЧ при частотах 10^{-4} в зависимости КК от постоянной времени фильтра имеется пологий максимум. По мере роста частоты максимум становится резким и смещается в сторону малых постоянных времен. На больших частотах КК для γ_2 , r становятся выше, чем для остальных параметров.

Для трендов r на среднем значении частот для ФНЧ, где параметр колеблется в широком диапазоне, выполнено разложение в ряд Фурье. Основная гармоника больше по амплитуде остальных, однако вторая и последующие имеют сравнимое с ней значение, что говорит о нелинейности преобразования. В целом тренд r для ФНЧ при некоторых частотах напоминает модуль гармонического сигнала.

При прохождении через квантователь по уровню критерий стационарности γ_1 и γ_2 сдвигается в сторону 1 со снижением амплитуды вариации, его зависимость от динамики уменьшается. Тренд r смещается в сторону $N/2$, снижает амплитуду и меньше реагирует на характеристику шума. Тренды μ и σ также очищаются от шума,

но увеличивают амплитуду, становятся более подобны на модуль гармонического сигнала. Случайные процессы с экспоненциальным распределением ввиду больших отклонений менее подвержены влиянию квантования.

Заключение. Критерий серий показал слабую зависимость от распространенных распределений шумов в радиоэлектронике. Ненулевое ма-

тематическое ожидание шума оказывает воздействие на параметры распределения серий. Вследствие подверженности основных показателей серий влиянию шума адаптацию лучше строить на основании триггерных схем, которые были предложены выше. В условиях работы с малым количеством разрядов АЦП на диапазоне шума лучше использовать μ или σ для адаптации фильтров.

Литература

1. Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика: Основы моделирования и первичная обработка данных. М.: Финансы и статистика, 1983. 471 с.
2. Гринюк Д. А., Оробей И. О., Сухорукова И. Г. Эффективность работы адаптации фильтра на критерии серий // Труды БГТУ. 2011. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 107–111.
3. Гринюк Д. А., Оробей И. О., Сухорукова И. Г. Адаптация критерия серий к применению в управлении технологическими процессами // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 92–95.
4. Басов В. Г. Информационно-измерительные системы. Основы проектирования. В 3 ч. Ч. 2. Минск: БГУИР, 2007. 78 с.

References

1. Ayvazyan S. A., Enyukov I. S., Meshalkin L. D. *Prikladnaya statistika: Osnovy modelirovaniya i pervichnaya obrabotka dannykh* [Applied Statistics: Basics of modeling and primary data processing]. Moscow, Finansy i statistika Publ., 1983. 471 p.
2. Hryniuk D. A., Orobei I. O., Suhorukova I. G. Efficiency of the filter to adapt to a runs test. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2011, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 107–111 (In Russian).
3. Hryniuk D. A., Orobei I. O., Suhorukova I. G. Adaptation runs test for use in process control. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2014, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 92–95 (In Russian).
4. Basov V. G. *Informatsionno-izmeritel'nyye sistemy. Osnovy proektirovaniya. V 3 ch. Ch. 2* [Information-measuring system. Fundamentals of design. In 3 parts. Part 2], Minsk, BGUIR Publ., 2007. 78 p.

Информация об авторах

Сухорукова Ирина Геннадьевна – ассистент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: irina_x@rambler.ru

Гринюк Дмитрий Анатольевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: hryniuk@tut.by

Оробей Игорь Олегович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: orobei@tut.by

Information about the authors

Suhorukova Irina Gennadyevna – assistant lecturer, the Department of Information Systems and Technology. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: irina_x@rambler.ru

Hryniuk Dmitry Anatolyevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: hryniuk@tut.by

Orobei Igor Olegovich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: orobei@tut.by

Поступила 02.03.2016

УДК 681.53

Н. М. Олиферович, Д. А. Гринюк, И. О. Оробей
Белорусский государственный технологический университет

ГАРМОНИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ

В статье рассмотрены особенности управления технологическими объектами с нестабильными параметрами, изменяющими свои свойства в процессе эксплуатации в широком диапазоне. Коэффициенты эквивалентных передаточных функций таких систем по каналам управления могут изменять значения на порядок. Найти в данных условиях робастные настройки для регулятора практически невозможно. Для поддержания стабильности технологических режимов требуется одновременно с регулированием проводить идентификацию параметров объекта управления.

С целью определения динамических характеристик данных технологических объектов предлагается использовать в качестве воздействия смесь гармонических сигналов, подобранных таким образом, чтобы попадать в области значительных изменений амплитудно-частотных характеристик. В то же время вторичные гармоники, которые образуются при прохождении сигнала через выходной цифроаналоговый и входной аналогово-цифровой преобразователи, должны по минимуму попадать в спектр других гармонических сигналов. Выделение сигнала предполагается производить путем квадратурной демодуляции.

Для сравнения возможностей определения времени динамики технологических объектов в реальном времени в условиях ограничения на количество разрядов на выходе, для аperiodического звена третьего порядка выполнено математическое моделирование гармонической и меандровой идентификации в среде Matlab. Произведен анализ идентификации объекта при отсутствии обратной связи, с обратной связью, при добавлении сигнала после регулятора либо по каналу задания.

Ключевые слова: объект управления, амплитудно-частотная характеристика, квадратурный демодулятор, гармоническая и меандровая идентификации, контрольная гармоника.

N. M. Oliferovich, D. A. Hryniuk, I. O. Orobei
Belarusian State Technological University

HARMONIC IDENTIFICATION OF TECHNOLOGICAL OBJECTS IN REAL TIME

The article discusses the features of process control with unstable parameters, which change their properties during the operation over a wide-ranging. The coefficients of the equivalent transfer function of such systems for the control channels may change the values in order of magnitude. To find the robust configuration for controller in such conditions is almost impossible. To maintain the stability of technological conditions required at the same time with regulating to perform the identification of the control object's parameters.

In order to determine the dynamic characteristics of such technological objects is proposed to use in the capacity of action mixture of harmonic signals, which is selected in such a way that the fall in significant changes in the amplitude-frequency characteristic. At the same time, secondary harmonics are generated at passing the signal through an output digital-to-analog and analog-to-digital input converter, the minimum fell to the range of other harmonic signals. Extraction of signal expected to produce by quadrature demodulation.

To compare the possibilities of determining dynamics of technological objects in real time in a limitation on the number of bits at the output, for the third order aperiodic link mathematical simulation of harmonic and meander identifications in Matlab is performed. Produced the analysis of identify identification of object with feedback, in the absence of feedback, when the signal after the controller and channel assignments was carried out.

Key words: control object, amplitude-frequency characteristic, quadrature demodulator, harmonic and meander identifications, reference harmonic.

Введение. Большинство технологических объектов управления, особенно связанных с процессами тепло- и массообмена, изменяют свои свойства в процессе эксплуатации. Это

обусловлено как распределенностью параметров температуры и концентрации, так и нелинейными свойствами этих процессов. Особенно это касается объектов с широким диапазоном

регулирования. Такими объектами, к примеру, являются системы поддержания климата в жилых и административных зданиях, весьма популярные на сегодняшний день. Коэффициенты эквивалентных передаточных функций по каналам стабилизации могут изменять значения на порядок. Найти в данных условиях робастные настройки регулятора, которые обеспечат приемлемое качество переходного процесса, практически невозможно. Для поддержания стабильности технологических режимов требуется одновременно с регулированием проводить идентификацию параметров объекта управления. Организация периодических активных экспериментов сопряжена с большими экономическими затратами. В то же время пассивные эксперименты на основании корреляционного анализа не всегда позволяют обеспечить определение передаточных функций объекта с приемлемой точностью ввиду влияния метрологических свойств каналов информации. Кроме того, они не пригодны для относительно быстрых изменений объектов управления.

Основная часть. На практике широкую популярность нашли системы идентификации реального времени на основе постоянной генерации по каналу управления (или задания) ступенчатого сигнала, который имитирует проведение активного эксперимента. Однако следует учитывать, что данный подход сопряжен с рядом проблем. Реальная разрядность промышленных контроллеров находится в районе 12-bit, а часто и 10-bit, с другой стороны, технологический регламент не допускает существенных колебаний технологических параметров. Поэтому такая идентификация может приводить к большим погрешностям.

С целью определения динамических характеристик технологических процессов предлагается воздействовать на объект смесью гармонических сигналов, выбранных таким образом, чтобы они находились в области значительных изменений амплитудно-частотных характеристик (АЧХ), и в то же время вторичные гармоники, которые образуются при прохождении сигнала через выходной цифроаналоговый и входной аналогово-цифровой преобразователи, по минимуму попадали в спектр других гармонических сигналов. Выделение сигнала предполагается производить путем квадратурной демодуляции [1].

Пропустив гармонический сигнал через квантователь по уровню, можно получить следующие зависимости вторичных гармоник 3, 5, 7, 9, 11, 21, 31, отнесенных к амплитуде первой гармоники от количества разрядов N , которые припадают на размах полезного сигнала (рис. 1).

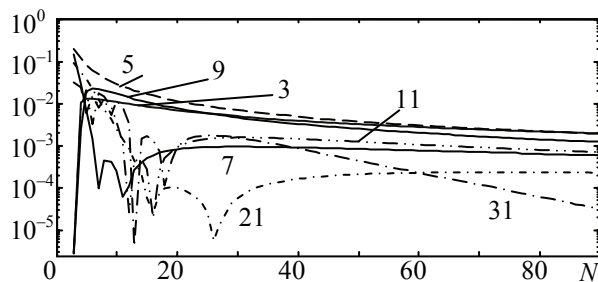


Рис. 1. Отношение амплитуды 3, 5, 7, 9, 11, 21, 31 гармоники к амплитуде первой гармоники в зависимости от количества разрядов, припадающих на размах гармонического сигнала

Математический эксперимент. С целью сравнения возможностей определения в реальном времени динамики технологических объектов в условиях ограничения на количество разрядов на выходе проведено математическое моделирование в Matlab гармонической (ГИ) и меандровой (МИ) идентификации. В качестве объекта был выбран апериодический объект третьего порядка с постоянными временами 150; 50; 16,7 с.

Для данного объекта были найдены настройки пропорционально-интегрального регулятора с использованием минимизации критерия [2] с расчетом на отсутствие колебательности переходного процесса (рис. 2).

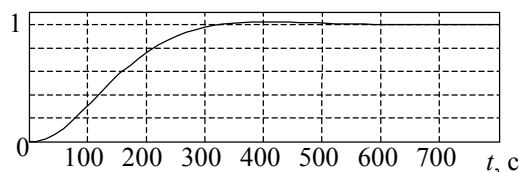


Рис. 2. Переходный процесс объекта управления

При выборе контрольных гармоник (КГ) руководствовались диапазоном частотной характеристики, при котором происходят максимальные изменения коэффициента передачи частотной характеристики объекта (рис. 3 и 4).

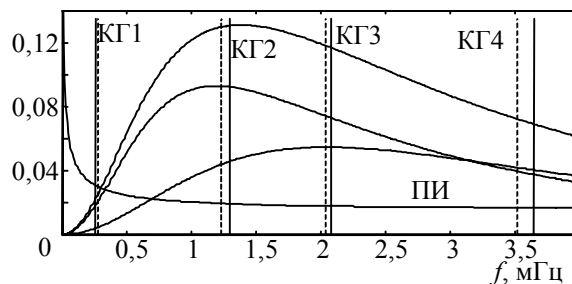


Рис. 3. Относительное изменение АЧХ объекта при вариации его постоянных, положения выбранных КГ для ГИ (сплошные линии), МИ (штрихпунктирные линии) и АЧХ ПИ-регулятора

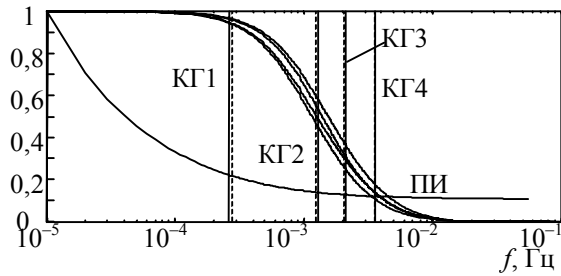


Рис. 4. АЧХ объекта при вариации его постоянных, положения выбранных четырех КГ для ГИ (сплошные линии), МИ (штрихпунктирные линии) и АЧХ ПИ-регулятора

Первоначально выбиралась самая высокочастотная КГ1, затем более низкочастотная, такая, чтобы высокочастотная КГ находилась между вторичными гармониками низкочастотной. Далее выбиралась еще более низкочастотная, опять же с условием отдаления ее спектра от уже выбранных (рис. 5), в частности, в эксперименте использовались КГ с частотами 0,274; 1,23; 2,03; 3,52 мГц.

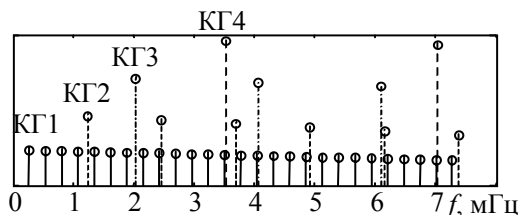


Рис. 5. АЧХ объекта при вариации его постоянных и положения выбранных четырех КГ для ГИ (сплошные вертикальные линии) и МИ (штрихпунктирные вертикальные линии)

Частота меандрового сигнала была выбрана из условия выхода объекта на стационарное состояние с погрешностью не выше 0,5% и составила 0,2604 мГц. В ходе эксперимента определяемые гармоники меандрового сигнала (МС) выбирали исходя из близости к КГ гармонической идентификации, в частности 1, 5, 8 и 14 (рис. 3 и 4). Амплитуда МС ± 1 .

Амплитуды КГ подбирались таким образом, чтобы на выходе путем перерасчета получались одинаковые значения, исходя из коэффициентов передачи по АЧХ объекта. Суммарная мощность четырех КГ регулировалась общим коэффициентом так, чтобы она была равна мощности МС. Отдельно проводилось моделирование при уменьшении общего коэффициента на 0,5 (ГИ05). Фрагмент тестовых сигналов при дискретизации по уровню 0,5 и без дискретизации показан на рис. 6.

Выполнялся раздельный анализ возможности идентификации объекта при отсутствии

обратной связи и с обратной связью, при подавлении тестового сигнала (ТС) после регулятора либо по каналу задания (SP) (рис. 7).

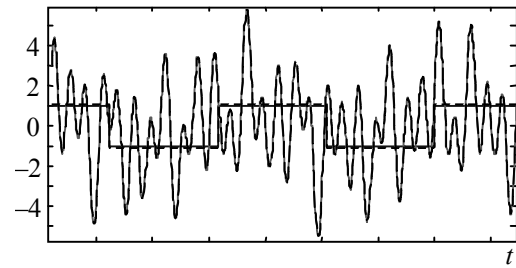


Рис. 6. Фрагмент тестовых сигналов

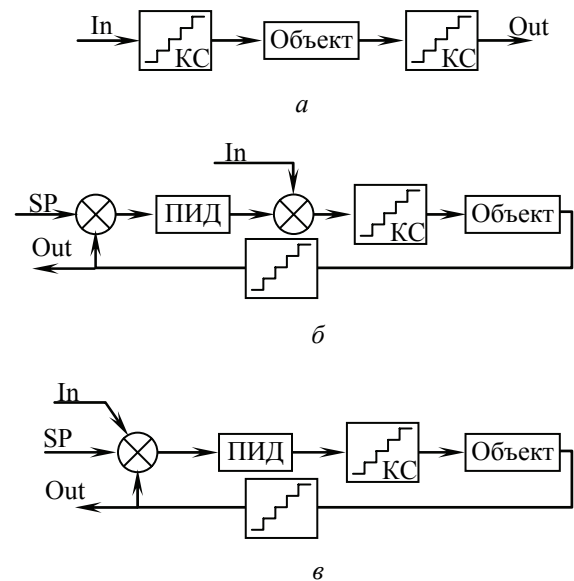


Рис. 7. Структуры моделирования:
a – при отсутствии обратной связи (S1);
б – с обратной связью, при подаче ТС после регулятора (S2); *в* – с обратной связью, при подаче ТС по каналу задания (S3);
 In – точка приложения ТС;
 Out – выходной сигнал для анализа

Уровень квантователя (разница между соседними значениями) менялся синхронно на входе и на выходе с выбором точек по логарифмической зависимости от минимальных значений до 0,514, т. е. немного больше уровня половины МС. Моделирование ГИ и МИ осуществлялось при одном уровне квантователя в рамках одной модели Simulink для обеспечения одинаковой точности. Моделирование проводилось на промежутке, достаточном для выхода сигналов квадратурных демодуляторов на стационарное значение. Амплитуда и фаза сигналов определялись как среднее значение последних 1000 точек. Также выполнялась оценка дисперсии значений.

Результаты (табл. 1–3) оценивались по отношению к амплитуде (фазе) гармоники, полученной

из линейной структуры. В таблицах значение 0,514 говорит о том, что точность в 0,5% обеспечивалась на всем диапазоне исследований. Таблица для дисперсии амплитуды не приводится, поскольку во всех случаях и для всех гармоник отличия от линейной системы не превышали 0,5%.

Таблица 1
Максимальный уровень квантования для обеспечения точности 0,5% по амплитуде

Тип	КГ1	КГ2	КГ3	КГ4
ГИ – S1	0,514	0,514	0,514	0,514
ГИ – S2	0,514	0,514	0,514	0,514
ГИ – S3	0,514	0,514	0,514	0,256
ГИ05 – S1	0,514	0,514	0,384	0,256
ГИ05 – S2	0,514	0,514	0,514	0,514
ГИ05 – S3	0,514	0,384	0,384	0,384
МИ – S1	0,008	0,008	0,256	0
МИ – S2	0,032	0,096	0,096	0,064
МИ – S3	0,514	0,192	0,384	0,064

Таблица 2
Максимальный уровень квантования, для обеспечения точности 0,5% по фазе

Тип	КГ1	КГ2	КГ3	КГ4
ГИ – S1	0,514	0,256	0,514	0,256
ГИ – S2	0,514	0,384	0,384	0,384
ГИ – S3	0,514	0,192	0,514	0,514
ГИ05 – S1	0,384	0,128	0,384	0,384
ГИ05 – S2	0,514	0,514	0,256	0,384
ГИ05 – S3	0,384	0,128	0,096	0,514
МИ – S1	0,064	0,008	0	0
МИ – S2	0,008	0,514	0	0
МИ – S3	0,032	0,004	0	0

Таблица 3
Максимальный уровень квантования, при котором дисперсия фазы меньше 0,5%

Тип	КГ1	КГ2	КГ3	КГ4
ГИ – S1	0,514	0,514	0,514	0,384
ГИ – S2	0,384	0,514	0,514	0,514
ГИ – S3	0,514	0,514	0,514	0,514
ГИ05 – S1	0,256	0,514	0,384	0,384
ГИ05 – S2	0,514	0,514	0,514	0,192
ГИ05 – S3	0,514	0,514	0,514	0,384
МИ – S1	0,514	0,514	0	0
МИ – S2	0,514	0,514	0,096	0
МИ – S3	0,514	0,514	0	0

Анализ результатов показывает, что предложенный способ ГИ имеет большую точность в определении динамики в режиме реального времени. Из всех структур наилучшую

точность демонстрирует вариант идентификации без обратной связи S1. Наихудшие показатели – в случае воздействия на объект по каналу задания. Наличие обратной связи существенно влияет на форму сигналов, которые поступают на вход контроллера для анализа. Если для структуры S1 выход мало отличается от фрагмента, показанного на рис. 6 (только высокочастотные составляющие теряют амплитуду больше, чем низкочастотные), то S2 вносит значительные изменения в форму сигнала (рис. 8) и затрудняет анализ. Наибольшее уменьшение мощности отклонения выходного сигнала происходит в S2 вследствие его подавления обратной связью с регулятором.

Дальнейшая процедура предполагает восстановление всей АЧХ с помощью интерполяции. Одним из лучших вариантов является использование функции $\sin x / x$. Однако в большинстве технологических задач можно корректировать настройки регулятора непосредственно по колебаниям амплитуд и фаз КГ. Количество КГ можно также изменять в зависимости от требований точности и структурных особенностей динамики объекта наблюдения.

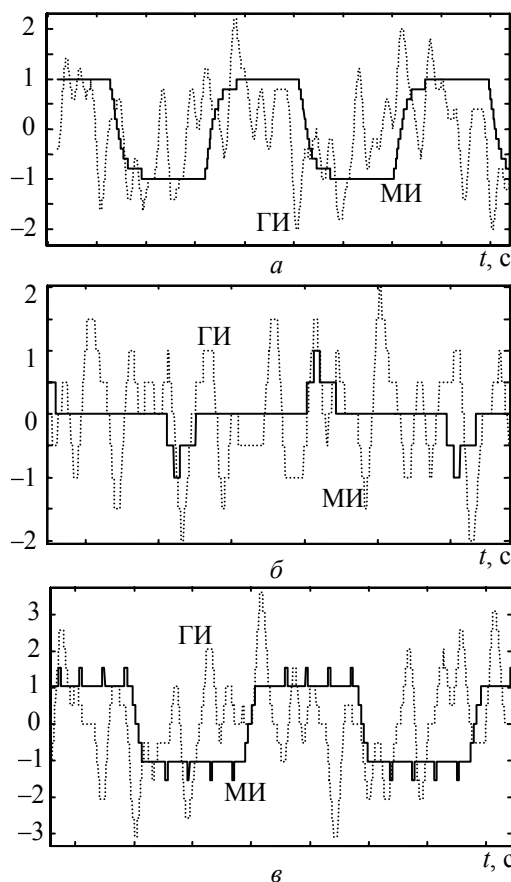


Рис. 8. Фрагмент зависимости Out для ГИ и МИ:
а – для S1; б – для S2; в – для S3

Для МИ можно повысить точность идентификации путем увеличения количества определяемых гармоник. МИ показывает лучшие результаты при работе по структуре S3. Наибольшие проблемы МИ проявляются в определении высокочастотной АЧХ объекта. В зависимости от особенностей объекта и настроек регулятора результаты могут изменяться. Следует отметить, что погрешность в определении гармоник во втором знаке начинается с уровня 0,05 квантования при МИ, что может быть приемлемо для ряда прикладных задач.

Заключение. 1. Результаты эксперимента показали, что ГИ обладает большим потенциа-

лом по сравнению с МИ. Даже в случае уменьшения мощности КГ метод сохраняет хорошую способность к идентификации.

2. Использование узкополосных фильтров квадратурной демодуляции дает возможность существенно уменьшить погрешности, которые вносит квантование. Такой подход также позволяет значительно снизить влияние шумов, которые всегда присутствуют в измерительном тракте на технологических объектах.

3. Раздельная генерация гармоник с индивидуальным изменением амплитуды обеспечивает точность определения частотной характеристики объекта на более широком диапазоне регулирования.

Литература

1. Макс Ж. Методы и техника обработки сигналов при физических измерениях. В 2 т. Т. 2. М.: Мир, 1983. 256 с.
2. Сухорукова И. Г., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Модификация интегральных критериев для повышения запаса по устойчивости // Труды БГТУ. 2012. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 118–121.

References

1. Maks Zh. *Metody i tekhnika obrabotki signalov pri fizicheskikh izmereniyakh. V 2 t. T. 2* [Methods and signal processing techniques and applications to physical measurements]. Moscow, Mir Publ., 1983. 256 p.
2. Suhorukova I. G., Hryniuk D. A., Orobei I. O. Modification of the integral criteria to improve margin stability. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2012 no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 118–121 (In Russian).

Информация об авторах

Олиферович Надежда Михайловна – ассистент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: bogosnadya@rambler.ru

Гринюк Дмитрий Анатольевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: hryniuk@tut.by

Оробей Игорь Олегович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: orobei@tut.by

Information about the authors

Oliferovich Nadezhda Mihaylovna – assistant lecturer, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: bogosnadya@rambler.ru

Hryniuk Dmitry Anatolyevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: hryniuk@tut.by

Orobei Igor Olegovich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: orobei@tut.by

Поступила 02.03.2016

УДК 621.373.52:539.1

М. А. Анкуда, И. О. Оробей

Белорусский государственный технологический университет

МОДЕЛЬ АВТОДИНА С ПАРАМЕТРИЧЕСКИМ ВОЗБУЖДЕНИЕМ

В данной статье рассмотрен анализатор для оценки качественных параметров технологических процессов, который основан на эффекте ядерного магнитного резонанса. Приведено математическое описание протекающих процессов в электронных компонентах первичного преобразователя, которое позволяет анализировать динамику процессов и оценивать влияние внешних воздействий. Описана работа параметрического усилителя мощности, в котором энергия от изменения реактивного параметра преобразуется в энергию сигнала. Усиление в предложенной параметрической схеме происходит за счет внесения генератором накачки в сигнальный контур условного отрицательного сопротивления, которое зависит от амплитуды накачки. В данном генераторе в качестве переменного реактивного элемента колебательного контура используется емкость p - n перехода полупроводникового варикапа. В качестве генератора накачки применяется схема возведения в квадрат, а петля обратной связи всего параметрического генератора реализуется через подачу сигнала на управляющий электрод варикапа после определенного усиления. Разработанный автодинный генератор обеспечивает повышенную точность измерений за счет увеличения помехоустойчивости, которая достигается благодаря параметрической обратной связи с частотой накачки, равной удвоенной частоте сигнала. Решение предложенной модели генератора реализовано с помощью метода медленно меняющихся амплитуд.

Ключевые слова: автодин, колебательный контур, параметрический резонанс, ядерный магнитный резонанс, генератор накачки, шумовой сигнал.

M. A. Ankuda, I. O. Orobei

Belarusian State Technological University

THE MODEL OF AUTODYNE WITH PARAMETRIC EXCITATION

In this article we have studied the analyzer to evaluate the quality parameters of the technological processes, which are based on the effect of nuclear magnetic resonance. The mathematical description of the processes in the electronic components of the primary device, which allows you to analyze the dynamics of the process and assess the impact of external influences is presented. The functioning of the parametric amplifier, in which the energy from the changes reactive parameter is converted into the energy of the signal is described. Parametric amplification in the proposed scheme is due to the introduction of the generator pumping conditional negative resistance in signal circuit that is independent of the pump amplitude. In this generator as a variable reactance element is used oscillation circuit with capacitance p - n transition semiconductor varicap. The pump generator is used by the squaring circuit. The feedback loop of all parametric oscillator is realized through a signal to the control electrode varicap after a certain gain. The designed autodyne provides improved measurement accuracy by increasing the noise immunity, which is achieved due to the parametric feedback from the pump frequency equal to twice the signal frequency. The solution of proposed model is implemented by the method of slowly varying amplitudes.

Key words: autodyne, oscillation circuit, parametric resonance, nuclear magnetic resonance, generator of pumping, noise signal.

Введение. Для оценки качественных параметров технологических процессов широкого распространение получили анализаторы, которые основаны на изучении интенсивности сигналов ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Математическое описание процессов в электронных компонентах первичных преобразователей ЯМР-измерителей позволяет более точно изучить динамику происходящих процессов, провести анализ сигналов и оценить реакцию при различном внешнем воздействии.

Основная часть. Метод автодинного детектирования спиновых резонансов достаточ-

но актуален в технике стационарной спектроскопии, в частности ЯМР [1]. Современные методы обработки сигналов позволяют существенно расширить возможности автодинных радиоспектрометров. Автодин, по сути, представляет собой генератор слабых высокочастотных колебаний, амплитуда которых зависит от внесенных в колебательный контур потерь за счет ядерной динамической восприимчивости образца [2]. Поглощение энергии радиочастотного поля на резонансной частоте ядерной спиновой системы исследуемого образца приводит к уменьшению добротности контура

и, как следствие, вызывает изменение амплитуды высокочастотных (ВЧ) колебаний. Для эффективного поглощения спиновой системой энергии радиочастотного поля необходимо, чтобы добротность катушки с исследуемым веществом была максимальной.

Обычно параллельный колебательный контур автодинного детектора характеризуется индуктивностью L , емкостью C и сопротивлением R , которые при своей независимости от сигналов в контуре образуют линейную систему, описываемую следующим дифференциальным уравнением:

$$\frac{1}{L} \int u dt + \frac{u}{R} + C \frac{du}{dt} = i_{\text{ввых}}, \quad (1)$$

где u – напряжение колебательного контура; $i_{\text{ввых}}$ – ток с выхода положительной обратной связи усилителя.

Если какой-либо из параметров контура зависит от величины сигнала в нем, то уравнение (1) становится нелинейным, а для нелинейной системы нет принципиального различия в получении резонанса либо воздействием на систему внешним ЭДС, либо параметрическим возбуждением. Периодическое изменение реактивного параметра при достаточной интенсивности и соответствующей частоте вызывает параметрическое возбуждение колебаний в системе [3]. Подобная система представляет собой усилитель мощности, в котором энергия от изменения реактивного параметра преобразуется в энергию сигнала. Усиление в параметри-

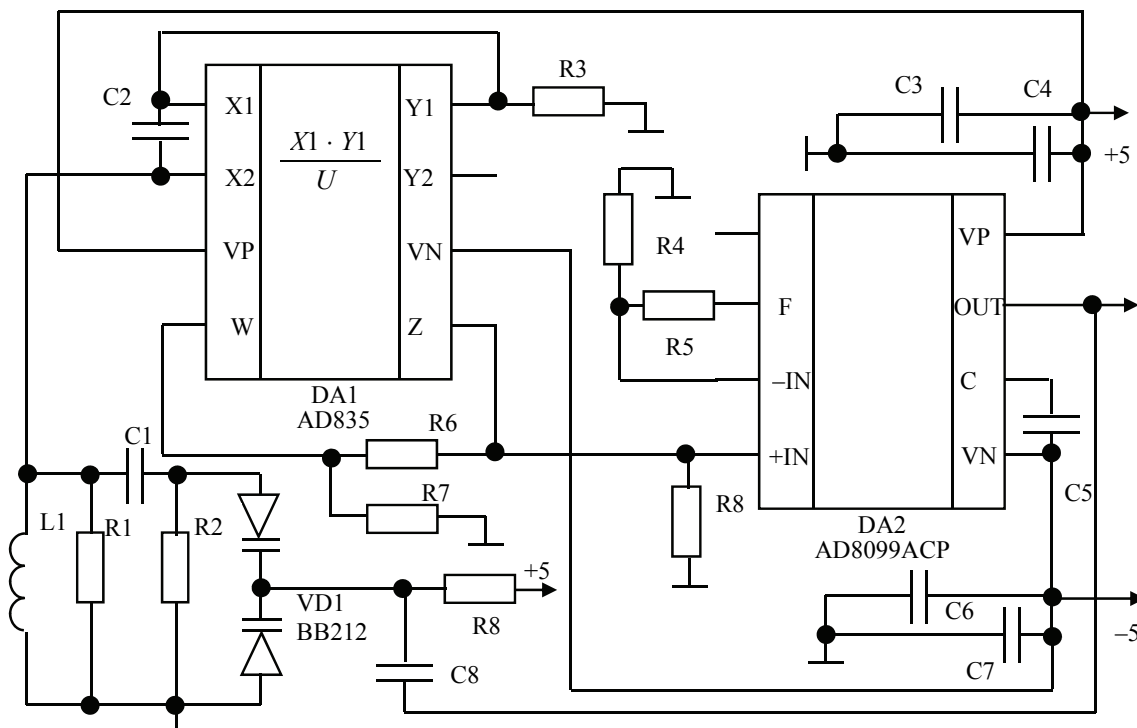
ческом усилителе происходит за счет внесения генератором накачки в сигнальный контур условного отрицательного сопротивления, которое зависит от амплитуды накачки.

Однако, помимо создания соответствующей амплитуды колебаний генератора накачки, необходимых для изменения емкости контура, требуется также обеспечить совпадение фаз сигналов накачки и контура. Причем частоту накачки следует выбирать в 2 раза больше частоты сигнала, чтобы обеспечить подвод мощности к контуру [3].

Таким образом, схема автодина с параметрическим возбуждением может быть условно разделена на несколько функциональных узлов: колебательный контур, генератор накачки и цепь обратной связи.

Схема автодина приведена на рисунке.

В рассматриваемом генераторе в качестве переменного реактивного элемента колебательного контура используется емкость p - n перехода полупроводникового варикапа VD1; в качестве генератора накачки применяется схема возбуждения в квадрат, которая построена на DA1. Поскольку в качестве опорного сигнала для параметрического изменения емкости используется непосредственно сигнал колебательного контура на удвоенной частоте, которая получается с выхода схемы умножения, то тем самым обеспечивается совпадение фаз. Обратная связь реализуется через подачу сигнала после усиления на схеме DA2 на управляющий электрод варикапа VD1.



Электрическая принципиальная схема автодина

Для составления математической модели рассмотрим колебательный контур, емкость которого представляет собой некоторую изменяемую величину. При этом зависимость емкости варикапа VD1 от приложенного обратного напряжения является обратно пропорциональной величиной $C = 1 / (1 + U_{обр})$. Поскольку обратное напряжение представлено гармоникой на частоте накачки и изменение емкости будет однозначно пропорционально сопоставляться изменению напряжения, то значение емкости варикапа можно записать в виде

$$C = \frac{C_0}{1 + m \cos 2\omega t}, \quad (2)$$

$$m = \frac{\Delta C}{2C} = \frac{C_{VD1max} - C_{VD1min}}{C_{VD1max} + C_{VD1min}},$$

где C_0 – значение емкости варикапа при фиксированном обратном напряжении; m – коэффициент модуляции емкости; C_{VD1max} – значение емкости варикапа при максимальном отклонении от фиксированного обратного напряжения; C_{VD1min} – значение емкости варикапа при минимальном отклонении от фиксированного обратного напряжения.

При определенных условиях подобный колебательный контур может стать параметрическим генератором.

Для получения математической модели в динамике продифференцируем уравнение (1):

$$\frac{1}{L1}u + \frac{1}{R1} \frac{du}{dt} + C \frac{d^2u}{dt^2} = 0. \quad (3)$$

Тогда подставляя уравнение (2) в (3) для колебательного контура можно будет получить:

$$\frac{1}{L1}u + \frac{1}{R1} \frac{du}{dt} + \frac{C_0 C1}{C1(1 + m \cos 2\omega t) + C_0} \frac{d^2u}{dt^2} = 0. \quad (4)$$

Уравнение (4) будет иметь место при условии, что $m < 1$, что является справедливым, так как ΔC – небольшое отклонение от C_0 . Если пренебречь потерями на $R1$ и принять значение $C1$ равным значению C_0 , то уравнение (4) можно записать в следующем виде:

$$\omega_0^2 (2 + m \cos 2\omega t)u + \frac{d^2u}{dt^2} = 0, \quad (5)$$

где

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{L1C_0}}.$$

Решим (5) методом медленно меняющихся амплитуд. При малой нелинейности емкости и малой глубине модуляции параметра можно ограничиться рассмотрением гармонического приближения и искать решение $u(t)$ как:

$$u = a(t) \sin \omega t + b(t) \cos \omega t, \quad (6)$$

где $a(t)$ и $b(t)$ – медленно меняющиеся во времени амплитуды искомого колебания.

Медленность изменения a и b во времени определяется тем, что их производные по времени являются величинами первого порядка малости по сравнению с произведениями ωa и ωb :

$$\frac{da}{dt} \ll \omega a, \quad \frac{db}{dt} \ll \omega b. \quad (7)$$

С учетом (7) первая производная:

$$\frac{du}{dt} \approx a\omega \cos \omega t - b\omega \sin \omega t + \sin \omega t \frac{da}{dt} + \cos \omega t \frac{db}{dt}$$

в первом приближении принимает вид

$$\frac{du}{dt} \approx a\omega \cos \omega t - b\omega \sin \omega t. \quad (8)$$

Для второй производной:

$$\begin{aligned} \frac{d^2u}{dt^2} &\approx -\omega^2 a \sin \omega t - \omega^2 b \cos \omega t + \\ &+ \omega \cos \omega t \frac{da}{dt} - \omega \sin \omega t \frac{db}{dt} + \\ &+ \frac{d^2a}{dt^2} \sin \omega t + \frac{d^2a}{dt^2} \cos \omega t + \\ &+ \omega \cos \omega t \frac{da}{dt} - \omega \sin \omega t \frac{db}{dt} \end{aligned}$$

пренебрежем слагаемыми второго порядка малости и оставим слагаемые первого порядка малости. Получим:

$$\begin{aligned} \frac{d^2u}{dt^2} &\approx -\left(\omega^2 a + 2\omega \frac{da}{dt}\right) \sin \omega t + \\ &+ \left(-\omega^2 b + 2\omega \frac{db}{dt}\right) \cos \omega t. \quad (9) \end{aligned}$$

Слагаемые первого порядка малости оставлены в (9) и ими пренебрегли в (8). Это объясняется тем, что схема обладает малыми потерями, поэтому амплитуда второго слагаемого левой части исходного уравнения относительно мала по сравнению с амплитудами первого и третьего слагаемых.

Подставив (6), (9) в уравнение (5), получим:

$$\begin{aligned} \omega_0^2 (2 + m \cos 2\omega t) (a \sin \omega t + b \cos \omega t) - \\ - \left(\omega^2 a + 2\omega \frac{db}{dt} \right) \sin \omega t + \\ + \left(-\omega^2 b + 2\omega \frac{da}{dt} \right) \cos \omega t = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Поскольку на систему не действует внешняя периодическая сила и частота автоколебаний равна ω_0 , а не ω , то (10) примет вид

$$\begin{aligned} \omega_0^2 (2 + m \cos 2\omega_0 t) a \sin \omega_0 t - \\ - \omega_0^2 a \sin \omega_0 t + 2\omega_0 \frac{da}{dt} \cos \omega_0 t = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Введем безразмерный параметр $\tau = \omega_0 t$, а производную будем брать по времени. Тогда решение уравнения (11) можно будет записать в виде

$$a(t) = B e^{-\frac{K1}{K2}t}, \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} K1 = \omega_0^2 (1 + m \cos 2\tau) \sin \tau, \\ K2 = 2\omega_0 \cos \tau. \end{aligned}$$

В момент времени $t = 0$ амплитуда определяется шумом Найквиста:

$$a(t = 0) = \sqrt{4kTR\Delta f}, \quad (13)$$

где $a(t = 0)$ – амплитуда напряжения при $t = 0$; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ – постоянная Больцмана; T – температура, К; R – общее сопротивление, Ом; Δf – ширина полосы.

В итоге общее решение примет следующий вид:

$$u(t) = \sqrt{4kTR\Delta f} e^{-\frac{\omega_0(1+m\cos 2\tau)\text{tg}\tau}{2}t} \sin \omega_0 t. \quad (14)$$

Для получения временной зависимости сигналов ЯМР на выходе автодина нужно выявить влияние на его работу движения вектора намагниченности в катушке регистрации. При помещении образца в постоянное поле B_0 , направленное по Oz , и наложении на него переменного вращающегося с частотой ω в плоскости Oxy поля B_r уравнениями движения вектора намагниченности являются уравнения Блоха [2]:

$$\frac{dM_x}{dt} - \gamma(M_y B_z - M_z B_y) + \frac{M_x}{T_2} = 0, \quad (15)$$

$$\frac{dM_y}{dt} - \gamma(M_z B_x - M_x B_z) + \frac{M_y}{T_2} = 0, \quad (16)$$

$$\frac{dM_z}{dt} - \gamma(M_x B_y - M_y B_x) + \frac{M_z}{T_1} = \frac{M_0}{T_1}, \quad (17)$$

где M_x, M_y, M_z – мгновенные значения проекций векторов намагниченности результирующего поля в образце на оси Ox, Oy, Oz , А/м; B_x, B_y, B_z – мгновенные значения проекций векторов индукции результирующего поля в образце на оси Ox, Oy, Oz , Вб/м²; M_0 – равновесная намагниченность ($M_0 = \chi_0 B_0$), А/м; $B_z = B_0$; T_1, T_2 – соответственно спин-решеточная и спин-спиновая релаксации вещества образца, с.

Общее решение (15)–(17) затруднено в связи с необходимостью прохождения резонансных условий, что требует изменения во времени $B_z = B_0$ или частоты ω . Поэтому переходят в ВСК с частотой ω вокруг Oz , полагая

$$\begin{aligned} M_x = u \cos \omega t - v \sin \omega t, \\ M_y = \mp (v \cos \omega t + u \sin \omega t), \end{aligned} \quad (18)$$

где u – намагниченность, вращающаяся синфазно с B_r , А/м; v – намагниченность, опережающая B_r на $\pi/2$, А/м.

С учетом (18) решение в комплексной форме даст вид

$$\begin{aligned} v + ju = -|\gamma| B_1 M_0 \times \\ \times \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{t'-t}{T_2} - j \int_t^{t'} \Delta\omega(t'') dt''\right) dt'. \end{aligned} \quad (19)$$

Спектр ЯМР снимают прохождением резонансных условий, изменением поля B_0 при постоянной частоте ω или изменением ω при постоянном B_0 . Уравнение (19) анализируется при разных вариантах изменения B_0 .

Заключение. Таким образом, была рассмотрена возможность создания генератора автоколебаний с параметрическим возбуждением; приведена его математическая модель и способ определения ее решения.

Разработанный автодинный генератор обеспечивает повышенную точность измерений в сравнении с классическими схемами автодинов, которые работают на усилителях с положительной обратной связью, за счет увеличения помехоустойчивости. Предложенная модель генератора имеет параметрическую обратную связь с частотой накачки, равной удвоенной частоте сигнала. Поскольку шум является обратно пропорциональной величиной частоте сигнала, то подобное удвоение необратимо приводит к повышению соотношения полезного сигнала к шумовой составляющей. Последнее является неоспоримым преимуществом при создании схем регистрации сигналов ЯМР.

Литература

1. Яценко А. В., Евдокимов С. В. Датчик сигналов ЯМР для исследования веществ с большим значением // ПТЭ. 2003. № 1. С. 64–66.
2. Леше А. Ядерная индукция. М.: Изд-во иностранной лит-ры, 1963. 684 с.
3. Мандельштам Л. И., Папалекси Н. Д. О параметрическом возбуждении электрических колебаний // Журн. техн. физики. 1934. № 3. С. 5–29.

References

1. Yatsenko A. V., Yevdokimov S. V. The sensor signals of NMR for research of materials with high. *Pribory i tekhnika eksperimenta* [Instruments and Experimental Technique], 2003, no. 1, pp. 64–66 (In Russian).
2. Leshe A. *Yadernaya induktsiya* [Nuclear induction]. Moscow, Izdatel'stvo inostrannoy literatury Publ., 1963. 684 p.
3. Mandel'shtam L. I., Papaleksi N. D. Parametric excitation of electrical oscillations. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Journal of Technical Physics], 1934, no. 3, pp. 5–29 (In Russian).

Информация об авторах

Анкуда Максим Анатольевич – ассистент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: M.Ankuda@belstu.by

Оробей Игорь Олегович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: I.Orobey@belstu.by

Information about the authors

Ankuda Maksim Anatol'yevich – assistant lecturer, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: M.Ankuda@belstu.by

Orobei Igor Olegovich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: I.Orobey@belstu.by

Поступила 01.03.2016

УДК 621.317

М. А. Анкуда, И. О. Оробей

Белорусский государственный технологический университет

АДАПТИВНЫЙ ВРЕМЕННОЙ ЯМР-РАСХОДОМЕР

В статье описан способ измерения расхода жидкостей, содержащих протоны. Измерения проводились бесконтактным образом при помощи полей, проникающих через стенки трубопровода. Этот метод основан на эффекте ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Предложена структурная схема однокатушечного ЯМР-измерителя расхода меточного типа с временным разделением процессов постановки и регистрации метки в потоке. Данный измеритель расхода имеет возможность изменять объем анализатора за счет переключения секций в катушке регистрации, что приводит к повышению точности и расширению диапазона измеряемых расходов. Также приведено описание системы обработки данных с возможностью изменения частоты постановки меток в потоке. Частота постановки метки зависит от значений времен релаксации веществ и времени перемещения метки ЯМР по измерительному участку. При расчетах учитывалось распределение скоростей в зависимости от режима течения и дополнительного намагничивания на измерительном участке. Представленный способ построения первичного преобразователя и системы регистрации позволяет за небольшие промежутки времени обрабатывать полученную информацию и адаптировать всю систему при изменении состава жидкости либо ее скорости перемещения.

Ключевые слова: расходомер, метка, адаптация, намагниченность, ядерный магнитный резонанс, релаксация.

M. A. Ankuda, I. O. Orobei

Belarusian State Technological University

THE ADAPTIVE TEMPORAL NMR FLOWMETER

This article describes a method for flow measurement of liquids containing protons. Measurements are made on the method of interaction with the test medium in a non-contact manner using fields that penetrate through the wall of the pipeline. This method is based on the effect of the nuclear magnetic resonance (NMR). The structural scheme of single-coil NMR marker-type flow meter with a division processes of creating and reading markers in the flow. This flow meter is able to modify the size of the analyzer by switching sections in the coil of registration, which leads to higher accuracy and expand the measurable flow diapason. The description of the data processing system for change a frequency setting marker in the flow is also included. The frequency setting of marker depends on the relaxation time substances and motion marker of NMR on the measurement portion. The calculations take into account the velocity distribution depending on the flow regime and the additional magnetization in the measuring portion. The present method of construction of the primary device and registration system allows for short periods of time to process the information received and to adapt the whole system when changing the composition of the liquid or its speed of movement.

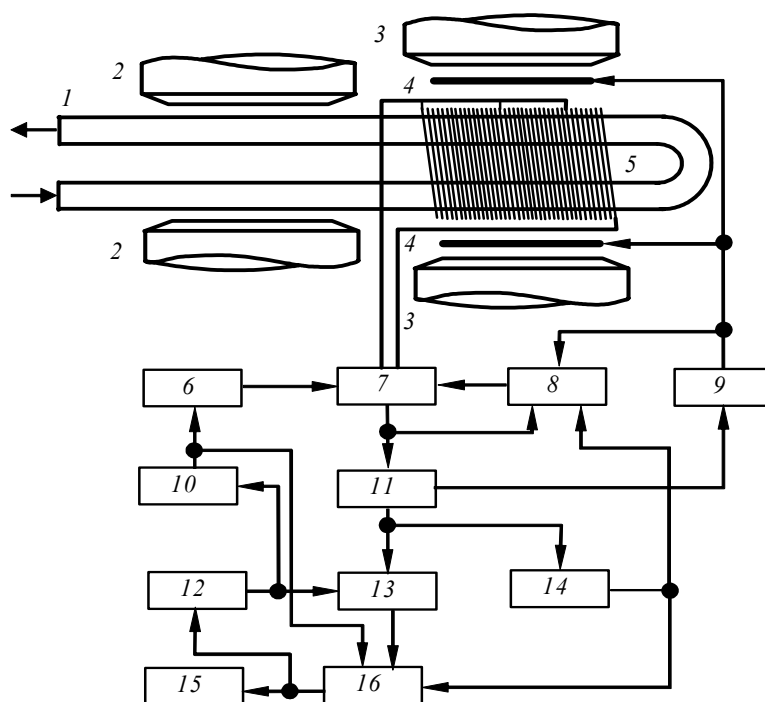
Key words: flowmeter, marker, adaptation, magnetization, nuclear magnetic resonance, relaxation.

Введение. Эффективное управление технологическими процессами требует применения устройств, фиксирующих технологические параметры. Значительная доля измерений приходится на определение расходов веществ, в частности протоносодержащих жидкостей. Измерения расхода удобно осуществлять методами, в которых взаимодействие с исследуемой средой осуществляется бесконтактным образом при помощи полей, проникающих через стенки трубопровода. Такие методы могут основываться на эффекте ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Использование ЯМР в движущихся средах для технологических процессов ограничивается жидкостями или сжатыми

газами, содержащими водород, фтор, литий, хлор и фосфор.

Основная часть. В работе рассматривается меточный однокатушечный ЯМР-расходомер с временным разделением процессов отметки и регистрации, в котором за счет изменения объема анализатора повышается точность и расширяется диапазон измеряемых расходов. Структурная схема расходомера приведена на рисунке.

Измеряемая жидкость по трубопроводу 1 через магнитное поле поляризатора 2 направляется в магнитное поле анализатора 3. После намагничивания в полях поляризатора и анализатора жидкость поступает в катушку регистрации 5.



Структурная схема адаптивного временного ЯМР-расходомера:

- 1 – трубопровод; 2 – магниты поляризатора; 3 – магниты анализатора;
 4 – катушки модуляции; 5 – катушка регистрации; 6 – генератор синхронизации;
 7 – спиновый детектор; 8 – устройство автопоиска и стабилизации
 резонансных условий; 9 – генератор модуляции; 10 – генератор синхронизации;
 11 – синхронный детектор (СД); 12 – функциональный преобразователь;
 13 – полосовой фильтр; 14 – детектор резонансных условий (ДРУ);
 15 – схема адаптивного усреднения; 16 – фазовый детектор

При включении прибора из-за расстройки резонансных условий в анализаторе отсутствует сигнал ЯМР на выходе спинового детектора 7. На выходе синхронного детектора (СД) 11 напряжение близко к нулю, при этом не превышает порог срабатывания детектора резонансных условий (ДРУ) 14, а на его выходе устанавливается высокий потенциал, соответствующий расстройке резонансных условий в анализаторе. ДРУ переключает в режим поиска устройство автопоиска и стабилизации резонансных условий 8, которое сканирует частоту генерации спинового детектора пилообразным напряжением и принудительно устанавливает высокое напряжение, соответствующее минимальным расходам, на выходе фазового детектора 16. Функциональный преобразователь 12 переключается в состояние с низким потенциалом и устанавливает минимальную частоту F_m генератора синхронизации 10 и полосу пропускания регулируемого полосового фильтра 13, амплитудно-частотная характеристика (АЧХ) которого согласуется с F_m [1].

В момент прохождения резонансных условий на выходе ДРУ появляется низкий потенциал, устройство 8 переключается в режим стабилизации, а управляющий вход фазового де-

тектора не оказывает воздействия на его выход, т. е. напряжение фазового детектора определяется разностью фаз между сигналами с генератора синхронизации и регулируемого полосового фильтра.

Сигнал ЯМР наблюдается периодически, для чего используется модулирующее синусоидальное поле звуковой частоты, создаваемое катушками модуляции 4, запитываемыми от генератора модуляции 9. Анализ вектора намагниченности движущейся жидкости производится при помощи катушки регистрации 5 анализатора, соединенной со спиновым детектором 7 [2]. В объеме катушки 5 с разделением по времени осуществляются постановка метки ЯМР и анализ ядерной намагниченности. Отметка жидкости в потоке производится инверсией вектора намагниченности при повышении амплитуды радиочастотного поля катушки 5 спинового детектора 7 под воздействием импульса генератора синхронизации 6. В момент отметки за малый промежуток времени намагниченность жидкости в катушке меняет знак, после чего отмеченный участок выносится из катушки. При этом намагниченность изменяется и после полного выхода метки принимает прежнее значение, равное намагниченности

неотмеченной жидкости. Далее метка перемещается со скоростью течения жидкости вдоль по петле трубопровода l и опять попадает в катушку 5, что приводит к изменению общей намагниченности в объеме этой катушки. При прохождении метки через катушку 5 знак средней намагниченности в объеме катушки не меняется, поскольку одновременно через катушку проходят ветви трубопровода с отмеченной и неотмеченной жидкостью. В анализаторе метка формирует сигнал на выходе спинового детектора 7, пропорциональный намагниченности в объеме катушки 5. Временная задержка от постановки метки до ее анализа в первом приближении обратно пропорциональна расходу жидкости.

При малом расходе из-за большего времени распространения метки по измерительному участку существует большой сдвиг фаз между сигналами с генератора синхронизации и регулируемого полосового фильтра, сохраняются состояние функционального преобразователя, малая частота отметки F_m , задаваемая генератором синхронизации, и АЧХ полосового фильтра. Увеличение расхода снижает информативный фазовый сдвиг. При этом уменьшается напряжение на выходе фазового детектора, переключается функциональный преобразователь, одновременно изменяя на F_6 частоту отметки и АЧХ полосового фильтра, оставляя неизменной ширину полосы его пропускания ΔF . Время адаптации системы регистрации не превышает периода отметки после изменения расхода. Схема измерения преобразует напряжение фазового детектора в расход и производит индикацию расхода. Это взаимодействие между блоками сохраняется при любых изменениях расхода.

Функциональный преобразователь, программное управление генератором синхронизации и регулируемым полосовым фильтром реализовано программным образом в микроконтроллере. ДРУ представляет собой пиковый детектор с постоянной времени, превышающей период отметки, и компаратор. В качестве фильтра с регулируемой полосой пропускания оптимальными являются цифровые фильтры [3], которые обладают стабильными фазовыми характеристиками и не вносят дополнительных погрешностей, обусловленных дрейфом фазовых сдвигов в тракте регистрации.

Из-за релаксации ядерной намагниченности происходит размагничивание ядерно-магнитной метки в случае, когда время перемещения метки по измерительному участку оказывается сопоставимым с временем релаксации. Это может приводить к ограничению минимального измеряемого расхода для жидкостей с малыми временами релаксации. С целью дополнитель-

ной адаптации системы было предложено при изменении величины расхода либо при изменении релаксирующих свойств вещества изменять величину петли путевого тракта трубопровода за счет переключения между обмотками многосекционной катушки регистрации.

Информативным параметром, по которому определяется расход, является время перемещения метки ЯМР по измерительному участку от момента ее постановки до момента регистрации. Проявление ряда особенностей ЯМР в движущихся жидкостях зависит от режима течения, определяемого числом Рейнольдса:

$$Re = \frac{\rho W L_x}{\mu^*} = \frac{W L_x}{\nu^*}, \quad (1)$$

где ρ – плотность жидкости, кг/м³; W – скорость движения жидкости, м/с; L_x – характерный линейный размер, м; μ^* – динамический коэффициент вязкости, Па/с; ν^* – кинематический коэффициент вязкости, м²/с.

Возможно существование ламинарного и турбулентного потоков в одном преобразователе. Распределение скоростей по сечению трубопровода [4] выполняется по следующим формулам:

$$W_L(r) = 2W_{cp} \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right); \quad (2)$$

$$W_T(r) = 1,23W_{cp} \left(1 - \frac{r}{R} \right)^{\frac{1}{7}},$$

где $W_L(r)$, $W_T(r)$ – скорость движения жидкости на расстоянии r от оси трубопровода при ламинарном и турбулентном режимах соответственно, м/с; W_{cp} – средняя скорость движения жидкости; r – радиальная координата, м; R – радиус трубопровода, м.

С учетом распределения скоростей и догадливания на измерительном участке зависимость от времени переменной части намагниченности в объеме регистрации выражается формулой

$$M(t) = \frac{16M_n}{\omega_n} e^{\frac{V_{tp}}{2T_1}} \times$$

$$\times \int_0^R e^{\frac{-(2V_a + V_n)}{S_n W(r) T_1}} W(r) \times$$

$$\times \sum_{n=1,3,\dots}^{\infty} \frac{1}{n^2} \sin \left(\frac{n\omega_n V_p}{2S_n W(r)} \right) \times$$

$$\times \sin \left(n\omega_n \left(t - \frac{2V_a + V_n}{S_n W(r)} \right) \right) r dr, \quad (3)$$

где M_n – намагниченность на выходе поляризатора, А/м; ω_n – частота импульсов отметки, рад/с; $V_{тр}$ – объем трубопровода между поляризатором и анализатором, м³; Q – расход жидкости, м³/с; T_1 – время спин-решеточной релаксации вещества, с; V_a – объем трубопровода в анализаторе, м³; V_n – объем трубопровода в петле, м³; S_n – площадь поперечного сечения трубопровода на измерительном участке, м²; $W(r)$ – распределение скоростей, м/с; n – номер гармоники в разложении импульсов намагниченности в ряд Фурье; V_p – объем катушки регистрации, м³; t – интервал времени от момента отметки, с.

Описание процессов, влияющих на скорость перемещения метки ЯМР, при помощи спектрального анализа намагниченности с последующим синтезом интегральной намагниченности позволяет провести расчет информативного параметра [5], но характеризуется большим временем вычисления. Интерес представляет интегральная оценка информативного параметра и сравнение полученных на ее основе результатов со значениями из (3). Введем величину нормированной относительно максимально возможной в потоке намагниченности, информирующей о метке ЯМР:

$$M_{\text{норм}}(r, dr) = \frac{M_{\text{пер}}(r)S(r, dr)}{M_{\text{max}}} = \frac{M_{\text{пер}}(r)2\pi r dr}{M_{\text{max}}}, \quad (4)$$

где $M_{\text{пер}}(r)$ – амплитуда метки для слоя на расстоянии r от центра трубопровода, А/м; $S(r, dr)$ – площадь кольца толщиной dr на расстоянии r , м²; M_{max} – максимальная амплитуда метки в потоке, А/м.

С учетом (3)

$$M_{\text{норм}}(r, dr) = \frac{\exp\left(-\frac{V_{\text{тр}} + 2V_a + V_n}{\pi R^2 T_1 W(r)}\right)}{\exp\left(-\frac{V_{\text{тр}} + 2V_a + V_n}{\pi R^2 T_1 W(0)}\right)} 2\pi r dr. \quad (5)$$

Определим скорость метки, принимая во внимание весовой вклад в результирующую метку нормированной переменной намагниченности (5):

$$W_{\text{ЯМР}} = \frac{\int_0^R M_{\text{норм}}(r, dr)W(r)}{\pi R^2} = \frac{2}{R^2} \int_0^R e^{-\frac{V_{\text{тр}} + 2V_a + V_n}{\pi R^2 T_1} \left(\frac{1}{W(0)} - \frac{1}{W(r)}\right)} W(r) r dr. \quad (6)$$

Из (6) следует равенство средней скорости потока и скорости метки ЯМР при большем T_1 или постоянстве скорости среды по сечению. Время прохождения меткой ЯМР измерительного участка находится из соотношения

$$t_{\text{пер}} = \frac{2V_a + V_n}{\pi R^2 W_{\text{ЯМР}}}. \quad (7)$$

Время, которое затрачивает метка на прохождение петли, определяется средней скоростью потока и длиной участка, который можно изменить переключением секций обмотки регистрации. С учетом распределения скорости потока по сечению трубопровода существует вероятность того, что сигнал метки размывается до такой степени, что последующая метка будет накладываться на предыдущую.

Также при постоянной частоте отметки случайные погрешности временного расходомера растут с увеличением расхода, а нижний предел измеряемого расхода задается условием $Q_{\text{min}} = (2V_a + V_n) / T_n$, которое вытекает из требования однозначности показаний $T_n \geq t_{\text{пер}}$, где T_n – интервал времени между метками. Идея адаптивного расходомера состоит в повышении частоты отметки пропорционально расходу и в соответствующем изменении полосы пропускания канала регистрации, а также в изменении длины петлевого участка.

Тем самым можно добиваться условий, при которых время релаксации определенного объема протоносодержащей жидкости всегда окажется больше, чем время, которое необходимо затратить на прохождение петлевого участка трубопровода. А сигнал каждого одиночного акта измерения может быть использован для оптимальной настройки системы регистрации при последующих измерениях. Такой учет предыстории в реальных системах возможен в связи с ограниченной скоростью изменения расхода.

Закключение. Разработанный адаптивный измеритель обеспечивает повышенную точность измерений за счет сужения полосы пропускания канала регистрации по сравнению с временными расходомерами, а также имеет повышенную точность на больших расходах за счет увеличения частоты отметки.

Предложенный однокатушечный меточный ЯМР-расходомер с временным разделением процессов отметки и регистрации позволяет подстраивать устройство таким образом, чтобы размагничивание метки не происходило быстрее, чем время, которое необходимо для прохождения тракта до анализатора.

Литература

1. Меточный ЯМР – расходомер временного типа с совмещением адаптации системы регистрации к измеряемому расходу и коррекцией измерительной базы по индукции поля анализатора / В. В. Сарока [и др.] // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2009. Вып. XVII. С. 73–76.
2. Keeler J. *Understanding NMR Spectroscopy*. Chichester: John Wiley&Sons, 2007. 526 p.
3. Титце У., Шенк К. Полупроводниковая схемотехника: справочное руководство. М.: ДодекаXXI, 2008. 512 с.
4. Лойцянский Л. Г. *Механика жидкости и газа*. М.: Наука, 1978. 736 с.
5. Методика определения информативного параметра меточного ЯМР – расходомера по спектральному разложению намагниченности при движении метки по измерительному участку / В. В. Сарока [и др.] // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2009. Вып. XVII. С. 77–81.

References

1. Saroka V. V., Orobey O. I., Grinuk D. A., Ankuda M. A., Orobey I. O. NMR marker – type flowmeter temporary registration with the registration system to adapt to the measured flow rate and correcting the measurement base for the analyzer field induction. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physical-mathematical sciences and informatics, 2009 issue XVII, pp. 73–76 (In Russian).
2. Keeler J. *Understanding NMR Spectroscopy*. Chichester, John Wiley&Sons, 2007. 526 p.
3. Tittse U., Shenk K. *Poluprovodnikovaya skhemotekhnika: spravochnoye rukovodstvo* [Electronic Circuits: Handbook for Design and Application]. Moscow, DodekaXXI Publ., 2008. 512 p.
4. Loytsyanskiy L. G. *Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid and gas mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1978. 736 p.
5. Saroka V. V., Orobey O. I., Grinuk D. A., Ankuda M. A., Orobey I. O. Method of determining informative parameter marker NMR-flowmeter on the spectral decomposition of the motion of the magnetization mark on the measuring section. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physical-mathematical sciences and informatics, 2009, issue XVII, pp. 77–81 (In Russian).

Информация об авторах

Анкуда Максим Анатольевич – ассистент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: M.Ankuda@belstu.by

Оробей Игорь Олегович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: I.Orobey@belstu.by

Information about the authors

Ankuda Maksim Anatol'yevich – assistant lecturer, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: M.Ankuda@belstu.by

Orobei Igor Olegovich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: I.Orobey@belstu.by

Поступила 01.03.2016

УДК 621.391.26

А. А. Дятко¹, А. С. Храменков², С. Н. Ярмолик², П. Н. Шумский³¹Белорусский государственный технологический университет²Военная академия Республики Беларусь³РНПЦ «Центр радиотехники Национальной академии наук Беларуси»

**КВАЗИОПТИМАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РАСПОЗНАВАНИЯ
РАДИОЛОКАЦИОННЫХ ОБЪЕКТОВ С ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫМ
УТОЧНЕНИЕМ ИНФОРМАЦИИ О КЛАССЕ ОБЪЕКТА
И О ПРОДОЛЖЕНИИ НАБЛЮДЕНИЯ**

Статья посвящена задаче повышения эффективности распознавания радиолокационных объектов. Для повышения достоверности классификации радиолокационных объектов предлагается использовать квазиоптимальный алгоритм распознавания с последовательным уточнением информации о классе объекта и о продолжении наблюдения. Рассмотрены особенности построения устройства радиолокационного распознавания с последовательным уточнением информации о классе объекта и о продолжении наблюдения. Процедура принятия решения в таком устройстве разделяется на два этапа: принятие предварительного решения (о наблюдении объекта k -го класса) и окончательного решения (в пользу объекта k -го класса или о продолжении наблюдения). Возможность последовательного уточнения информации о классе объекта позволила в качестве априорных вероятностей для последующих шагов использовать апостериорные вероятности предыдущего шага классификации. Качество функционирования последовательного устройства радиолокационного распознавания для текущего значения отношения сигнал-шум характеризовалось совокупностью M (количество классов) условных вероятностей правильного распознавания, M средних вероятностей ложного распознавания. Кроме того, важной характеристикой последовательной процедуры классификации является ее средняя длительность. Для предложенного квазиоптимального алгоритма распознавания с последовательным уточнением информации о классе объекта и о продолжении наблюдения приведены результаты расчета характеристик распознавания радиолокационных объектов трех классов.

Ключевые слова: решение о классе объекта, средний риск, последовательная процедура проверки гипотез, уточнение информации, характеристики распознавания.

A. A. Dyatko¹, A. S. Khramenkov², S. N. Yarmolik², P. N. Shumskiy³¹Belarusian State Technological University²Military Academy of the Republic of Belarus³RSPC “Center of the Radio Engineering of the National Academy of Sciences of Belarus”

**QUASIOPTIMUM ALGORITHM OF RADAR-TRACKING RECOGNITION
WITH SEQUENTIAL SPECIFICATION OF THE INFORMATION
ON THE OBJECT CLASS AND ABOUT SUPERVISION CONTINUATION**

The article is devoted to the problem of increasing efficiency of radar-tracking recognition. To increase the radar-tracking classification reliability the quasioptimum algorithm of recognition with sequential specification of the information on the object class and about supervision continuation is offered to be used. The features of radar-tracking recognition device construction with sequential specification of the information on the object class and about supervision continuation are considered. Decision-making procedure in such a device is divided into two stages: the acceptance of the preliminary decision and the definitive decision. As aprioristic probabilities for the subsequent steps posterior probabilities of the previous step of classification are used. Quality functioning of the sequential radar-tracking recognition device was characterized by conditional probabilities of correct recognition, average probabilities of false recognition. The results of calculation of radar-tracking recognition characteristics of three classes are presented for offered quasioptimum algorithm of recognition with sequential specification of the information on the object class and about continuation of supervision.

Key words: the decision about object class, average risk, sequential procedure of hypotheses check, specification of the information, the recognition characteristic.

Введение. Современные радиолокационные системы, особенно военного назначения, должны характеризоваться высокой информативностью.

С этой целью радиолокационные комплексы оснащаются системами распознавания объектов. Радиолокационное распознавание заключается

в установлении факта принадлежности наблюдаемого объекта к определенному классу [1]. Информация о классе объекта может использоваться при решении широкого круга задач: целеуказания, целераспределения, селекции объектов на фоне ложных целей, определения очередности сопровождения и обстрела целей и т. п. [1].

Поскольку в практически важных случаях радиолокатор имеет возможность последовательного многократного обращения к наблюдаемому объекту, то использование последовательных процедур для решения задач распознавания позволяет повысить качество принимаемых решений [1]. Следует отметить, что в литературе, как правило, освещаются последовательные правила применительно к двум гипотезам [2, 3]. Последовательные методы решения многоальтернативных задач зачастую рассматриваются в обобщенном виде [3], а приведенные результаты носят эмпирический характер.

В [4] представлен последовательный байесовский алгоритм распознавания, обеспечивающий минимизацию среднего риска принимаемых решений на каждом шаге наблюдения. Приведенный алгоритм позволяет повысить эффективность распознавания радиолокационных объектов по сравнению с одноэтапными процедурами. Вместе с этим оптимальный алгоритм классификации требует использования ряда априорных данных, что может затруднять его практическое применение. В связи с этим определенный интерес представляет задача получения квазиоптимального алгоритма распознавания радиолокационных объектов с последовательным уточнением информации о классе объекта и о продолжении наблюдения.

Синтез квазиоптимального устройства распознавания радиолокационных объектов с последовательным уточнением информации о классе объекта и о продолжении наблюдения. Приведенный в [4] оптимальный алгоритм последовательной классификации предполагает, что решению о принадлежности наблюдаемого объекта к одному из M классов или о продолжении наблюдения ($M + 1$ гипотеза) на n -м шаге соответствует гипотеза, характеризующаяся минимальным значением одного из выражений:

$$J_n^k(\xi_n) = \sum_{i=1, i \neq k}^M P_n(A_i)(C_{ki}^n - C_{ii}^n)\Lambda(\xi_n | A_i), \quad (1)$$

$$k = \overline{1, M},$$

$$J_n^{M+1}(\xi_n) = \sum_{i=1}^M P_n(A_i)(C_{M+1i}^n - C_{ii}^n)\Lambda(\xi_n | A_i), \quad (2)$$

где $J_n^k(\xi_n) = J_k^n$ – значение апостериорного риска, характеризующее принадлежность наблюдаемого объекта к k -му классу на n -м шаге процедуры распознавания; ξ_n – вектор принятого сигнала на n -м шаге, представляющий собой аддитивную смесь радиолокационного портрета (РЛП) цели и фона; $P_n(A_i) = P_i^n$ – априорная вероятность наличия объекта i -го класса на n -м шаге; C_{ki}^n – цена за принятое решение в пользу k -го класса при наличии объекта i -го класса на n -м шаге; $\Lambda(\xi_n | A_i) = \Lambda_i^n$ – отношение правдоподобия объекта i -го класса на n -м шаге процедуры распознавания; $J_n^{M+1}(\xi_n) = J_{M+1}^n$ – значение апостериорного риска, характеризующее продолжение наблюдения на n -м шаге процедуры распознавания; C_{M+1i}^n – цена за принятое решение о продолжении наблюдения при наличии объекта i -го класса на n -м шаге.

На основании выражений (1), (2) процедуру принятия решения можно разделить на два этапа: предварительное решение о наблюдении объекта k -го класса A_k^* и окончательное решение в пользу объекта k -го класса A_k^* или продолжение наблюдения A_{M+1}^* . Если $J_k^n \leq J_l^n$, $l = \overline{1, M}$, $l \neq k$, то принимается предварительное решение о наблюдении объекта k -го класса A_k^* . После принятия предварительного решения A_k^* проверяется возможность остановки последовательной процедуры наблюдения. Если $J_k^n \leq J_{M+1}^n$, то принимается окончательное решение о принадлежности наблюдаемой цели к k -му классу A_k^* . Если указанное условие не выполняется (т. е. риск продолжения наблюдения меньше риска принимаемого решения), то принимается решение о продолжении наблюдения A_{M+1}^* и осуществляется переход к $n + 1$ шагу процедуры распознавания.

Переход к квазиоптимальному байесовскому последовательному алгоритму предполагает исключение зависимости стоимостей принятых решений от номера шага процедуры распознавания ($C_{ki}^n = C_{ki}$), а также по аналогии с критерием «идеального наблюдателя» выбор стоимостей правильных решений равными нулю $C_{ii}^n = 0$, $i = \overline{1, M}$, а цен за ошибочные решения

равными единице $C_{ki}^n = 1, i = \overline{1, M}$. Стоимость продолжения наблюдения может быть выбрана $C_{M+1i}^n = C_{obs}^n < 1, i = \overline{1, M}$.

Согласно введенным допущениям, предварительное решение о наблюдении объекта k -го класса A_k^* принимается в соответствии с правилом:

$$\text{если } \sum_{i=1, i \neq k}^M P_i^n \Lambda_i^n \leq \sum_{i=1, i \neq l}^M P_i^n \Lambda_i^n, \quad (3)$$

$$l = \overline{1, M}, l \neq k, \text{ то } A_k^*.$$

Преобразовав выражение (3), получим правило принятия предварительного решения в виде

$$\text{если } P_k^n \Lambda_k^n \geq P_l^n \Lambda_l^n, l = \overline{1, M}, l \neq k, \text{ то } A_k^*. \quad (4)$$

Для проверки возможности остановки процедуры классификации проверяется условие $J_k^n \leq J_{M+1}^n$. После подстановки (1) и (2) в приведенное неравенство, решающее правило принимает следующий вид:

$$\text{если } \sum_{i=1, i \neq k}^M P_i^n \Lambda_i^n \leq \sum_{i=1}^M P_i^n C_{obs}^n \Lambda_i^n, \text{ то } A_k^*. \quad (5)$$

Преобразовав выражение (5), получим условие прекращения наблюдения:

$$\text{если } P_k^n C_{obs}^n \Lambda_k^n \leq (1 - C_{obs}^n) \sum_{i=1, i \neq k}^M P_i^n \Lambda_i^n, \text{ то } A_k^*. \quad (6)$$

Таким образом, с учетом выражений для предварительного (4) и окончательного (6) решений правило принятия решения в пользу k -го класса для квазиоптимального последовательного алгоритма на n -м шаге примет вид

$$\text{если } \begin{cases} P_k^n \Lambda_k^n \geq P_l^n \Lambda_l^n, l = \overline{1, M}, l \neq k \\ P_k^n C_{obs}^n \Lambda_k^n \leq (1 - C_{obs}^n) \sum_{i=1, i \neq k}^M P_i^n \Lambda_i^n, \end{cases} \text{ то } A_k^*. \quad (7)$$

Возможность последовательного уточнения информации позволяет в качестве априорных вероятностей для последующих шагов использовать апостериорные вероятности предыдущего шага классификации. Исходя из максимальной априорной неопределенности, на первом шаге процедуры априорные вероятности появления распознаваемых объектов принято считать одинаковыми $P_{n=1}^l = 1/M, l = \overline{1, M}$ [1]. Выражение для априорной вероятности l -го класса на $n+1$ шаге определяется в соответствии с формулой Байеса:

$$P_l^{n+1} \cong P_n(A_l | \xi_n) = \frac{P_l^n \Lambda_l^n}{\sum_{i=1}^M P_i^n \Lambda_i^n}, \quad (8)$$

где $P(A_l | \xi_n)$ – апостериорная вероятность принадлежности цели к l -му классу на n -м шаге.

Обобщенная структурная схема, реализующая последовательное решающее правило, минимизирующее средний риск принимаемых решений, представлена на рис. 1.

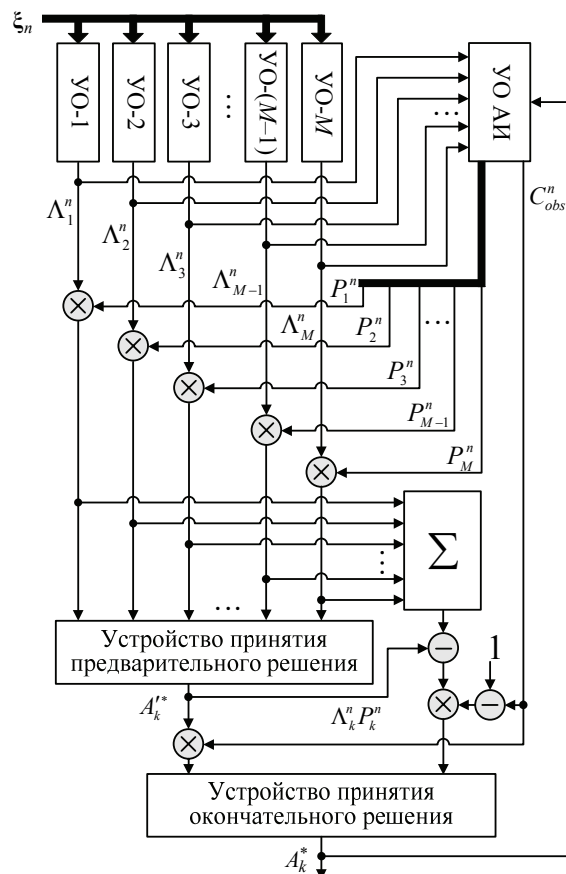


Рис. 1. Структурная схема квазиоптимального устройства последовательного распознавания

На n -м шаге процедуры классификации на входы каждого из M устройств обработки (УО) радиолокационного портрета поступает реализация РЛП ξ_n . На выходах УО РЛП формируются значения отношения правдоподобия (ОП) $\Lambda_l^n, l = \overline{1, M}$ для каждого из M распознаваемых классов. В устройстве оценивания апостериорной информации (УО АИ) на основе сформированных ОП в соответствии с (8) рассчитываются значения апостериорных вероятностей $P(A_l | \xi_n)$ для каждого класса, которые на следующем

шаге процедуры распознавания будут использоваться в качестве априорных. Кроме того, УО АИ хранит информацию о стоимости продолжения наблюдения C_{obs}^n . Согласно (4), производится коррекция сформированных ОП с учетом имеющейся априорной информации. В устройстве принятия предварительного решения по максимальному значению $P_l^n \Lambda_l^n, l = \overline{1, M}$ принимается предварительное решение о наблюдаемом объекте A_k^{n*} и выдается значение $P_k^n \Lambda_k^n$, соответствующее данному классу. На основе сформированных значений $P_k^n C_{obs}^n \Lambda_k^n$ и $(1 - C_{obs}^n) \sum_{i=1, i \neq k}^M P_i^n \Lambda_k^n$, в соответствии с (6), принимается решение о наличии объекта k -го класса или о переходе к $n + 1$ шагу наблюдения.

Результаты расчета показателей качества распознавания объектов. Качество функционирования устройств радиолокационного распознавания для текущего значения отношения сигнал-шум (ОСШ) γ принято [1] характеризовать совокупностью M условных вероятностей правильного распознавания D_k и M средних вероятностей ложного распознавания: $F_k = 1 / (M - 1) \sum_{l=1, l \neq k}^M F_{k/l}$, где $F_{k/l}$ – условные вероятности ложного распознавания $l, k = \overline{1, M}, l \neq k$. Последовательные устройства распознавания дополнительно характеризуют средней длительностью процедуры принятия решения \bar{N}_k .

Оценивание качества функционирования разработанного квазиоптимального алгоритма распознавания радиолокационных объектов с последовательным уточнением информации о классе объекта и о продолжении наблюдения проводилось методом математического моделирования. С этой целью имитировались флуктуационные РЛП [1] целей трех классов, исходными данными для моделирования были: число элементов РЛП – $N = 10$; время корреляции флуктуаций сигнала для объектов анализируемых классов – $\tau_1 = 12$ мс, $\tau_2 = 40$ мс, $\tau_3 = 80$ мс. Цена за продолжение наблюдения не изменялась в зависимости от номера шага $C_{obs}^n = C_{obs} = 0,1$. Максимальное число этапов

процедуры $N_{max} = 10$, по достижению N_{max} принималось предварительное решение. Полученные вероятности правильного распознавания приведены на рис. 2.

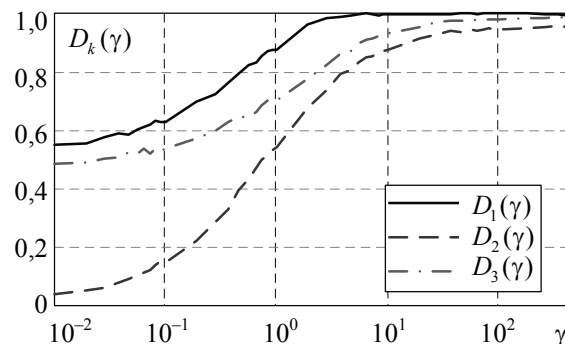


Рис. 2. Вероятности правильного распознавания в зависимости от ОСШ

Полученные вероятности ложного распознавания представлены на рис. 3.

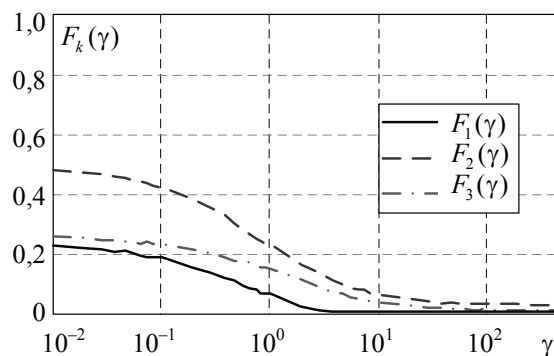


Рис. 3. Вероятности ложного распознавания в зависимости от ОСШ

Значения средней длительности процедуры распознавания приведены на рис. 4.

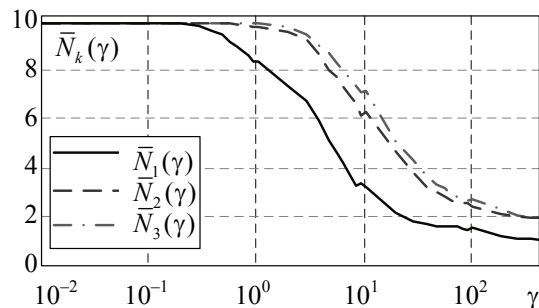


Рис. 4. Значения средней длительности последовательной процедуры распознавания

Заключение. Полученный квазиоптимальный алгоритм последовательного распознавания радиолокационных объектов, обеспечивающий минимизацию среднего риска принимаемых

решений о классе объекта и о продолжении наблюдения, характеризуется достаточной простотой и высокими показателями качества класси-

фикации. Это достигается благодаря использованию подхода, основанного на последовательном уточнении априорной информации.

Литература

1. Охрименко А. Е. Основы радиолокации и РЭБ. М.: Воениздат, 1983. 456 с.
2. Вальд А. Последовательный анализ. М.: Физматгиз, 1960. 328 с.
3. Фу К. Последовательные методы в распознавании образов и обучении машин. М.: Наука, 1971. 256 с.
4. Храменков А. С., Ярмолик С. Н. Алгоритм последовательного распознавания радиолокационных объектов, обеспечивающий минимизацию среднего риска принимаемых решений // Доклады БГУИР. 2016. Т. 1, № 3. С. 28–32.

References

1. Okhrymenko A. E. *Osnovy radiolokatsii i REB* [Bases of a radar-location and RES]. Moscow, Voenizdat Publ., 1983. 456 p.
2. Wal'd A. *Posledovatel'nyy analiz* [Sequential analysis]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1960. 328 p.
3. Fu K. *Posledovatel'nyye metody v raspoznavanii obrazov i obuchenii mashin* [Sequential methods in pattern recognition and machine learning]. Moscow, Nauka Publ., 1971. 256 p.
4. Khramenkov A. S., Yarmolik S. N. Radar-tracking objects sequential recognition algorithm, providing minimization average risk of accepted decisions. *Doklady BGUIR* [Papers of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics], 2016, vol. 1, no. 3, pp. 28–32 (In Russian).

Информация об авторах

Дятко Александр Аркадьевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: Dyatko_A@tut.by

Храменков Андрей Сергеевич – адъюнкт кафедры радиолокации и приемо-передающих устройств. Военная академия Республики Беларусь (220057, г. Минск, пр-т Независимости, 220, Республика Беларусь). E-mail: Xras.tech@mail.ru

Ярмолик Сергей Николаевич – кандидат технических наук, доцент, профессор кафедры радиолокации и приемо-передающих устройств. Военная академия Республики Беларусь (220057, г. Минск, пр-т Независимости, 220, Республика Беларусь). E-mail: Yarmsergei@yandex.ru

Шумский Петр Николаевич – кандидат технических наук, доцент, заместитель директора по научной работе. РНПЦ «Центр радиотехники Национальной академии наук Беларуси» (220072, г. Минск, ул. П. Бровки, 15/5, Республика Беларусь). E-mail: Shumski_petr@open.by

Information about the authors

Dyatko Aleksandr Arkad'yevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Informatics and Web-design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Dyatko_A@tut.by

Khramenkov Andrey Sergeevich – post-graduate student, the Department of Radar-location and Send-receive Devices. Military Academy of the Republic of Belarus (220, Nezavisimosti Ave., 220057, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Xras.tech@mail.ru

Yarmolik Sergey Nikolaevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Professor, the Department of Radar-location and Send-receive Devices. Military Academy of the Republic of Belarus (220, Nezavisimosti Ave., 220057, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Yarmsergei@yandex.ru

Shumskiy Petr Nikolaevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Deputy Director for science. RSPC “Center of the Radio Engineering of the National Academy of Sciences of Belarus” (15/5, P. Brovki str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Shumski_petr@open.by

Поступила 12.03.2016

УДК 621.391.26

А. А. Дятко¹, С. М. Костромицкий², П. Н. Шумский²¹Белорусский государственный технологический университет²РНПЦ «Центр радиотехники Национальной академии наук Беларуси»**РАСЧЕТ МОЩНОСТИ РАДИОЛОКАЦИОННОГО СИГНАЛА,
ОТРАЖЕННОГО ОТ МОРСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ,
ПРИ НАЛИЧИИ НАДВОДНЫХ СУДОВ**

В статье представлен метод вычисления мощности радиолокационного сигнала, отраженного от морской поверхности, при наличии надводных судов. Отмечено, что особенностью модели радиолокационного сигнала, отраженного от морской поверхности, является то, что в диаграмму направленности антенны (ДНА) радиолокационной станции (РЛС) могут попадать крупногабаритные суда. Наличие таких судов приводит к образованию участков морской поверхности, недоступных для электромагнитной волны, излученной антенной РЛС, – участков тени. Это в свою очередь вызывает уменьшение мощности отраженного от поверхности сигнала, что должно быть учтено при построении модели сигнала. В работе показано, что затенение морской поверхности при расчете мощности отраженного сигнала может быть учтено путем вычитания площади затененной части поверхности из общей площади, которая попадает в ДНА радиолокационного комплекса. Вводится понятие коэффициента коррекции как отношение площади затененного судном участка морской поверхности к общей площади поверхности, попадающей в ДНА радиолокационного комплекса. Показано, что площадь морской поверхности, которая должна быть использована при вычислении мощности отраженного сигнала, может быть найдена с использованием коэффициента коррекции для каждой элементарной площадки, на которые разбивается вся отражающая сигнал площадь морской поверхности.

Ключевые слова: модель радиолокационного сигнала, диаграмма направленности антенны.

A. A. Dyatko¹, S. M. Kostromitskiy², P. N. Shumskiy²¹Belarusian State Technological University²RSPC “Center of the Radio Engineering of the National Academy of Sciences of Belarus”**CALCULATION OF POWER OF RADIOLOCATION SIGNAL,
REFLECTED FROM MARINE SURFACE, IN THE PRESENCE
OF SURFACE VESSELS**

The method of calculation of power of the radiolocation signal reflected from marine surface in the presence of surface vessels is presented in the article. It is marked that the feature of model of the radiolocation signal reflected from a marine surface is that in the diagram of orientation of aerial RLS the ships of largenesses can get. The presence of such courts results in formation of areas of marine surface, inaccessible for the hertzian wave radiated by aerial RLS – areas of shade. It causes the reduction of power of the signal reflected from the surface in turn, that it must be taken into account at the construction of the model of signal. It is shown that shading of marine surface at the calculation of power of the reflected signal can be taken into account by deduction of area of the shaded part of surface from the general area, that gets in the diagram of orientation of aerial of radiolocation complex. The concept of correction coefficient is introduced as the ratio of the area of the shaded portion of the sea surface to the total surface area getting into the diagram of orientation of the ariel of the radiolocation complex. It shows that the area of the sea surface which showed be used in calculating the power of the reflected signal can be calculated with the use of the correction coefficient for each elementary area to which all the sea surface reflecting the signal is broken.

Key words: model of radiolocation signal, diagram of orientation of aerial.

Введение. Как отмечалось в работах [1, 2], в настоящее время все большее распространение получает использование аппаратно-программных комплексов для испытаний радиолокационных систем различного назначения. В этом случае совокупность управляющих сигналов, требуемых для анализа работы системы, вырабаты-

вается с помощью специальных имитаторов, основанных на ЭВМ [3]. Такой подход обеспечивает воспроизводимость условий испытаний и значительно уменьшает затраты на их проведение. В связи с этим важное значение приобретает разработка математических моделей [4] сигналов, имеющих место для тех или иных условий

функционирования радиолокационной системы, и алгоритмов для их реализации на ЭВМ. В частности, одной из задач, возникающей при моделировании радиолокационных сигналов, является задача построения математической модели сигнала, отраженного от подстилающей поверхности. В качестве такой поверхности может выступать поверхность суши или моря. На некотором этапе построения данной модели возникает задача расчета мощности сигнала, отраженного от некоторого элементарного участка поверхности. При этом особенностью модели для морской поверхности является то, что в диаграмму направленности антенны (ДНА) РЛС могут попадать крупногабаритные суда, которые будут создавать участки морской поверхности, недоступные для электромагнитной волны, излученной антенной РЛС, – участки тени. Это в свою очередь приведет к уменьшению мощности отраженного от поверхности сигнала, что должно быть учтено при построении модели.

Целью данной работы является расчет мощности радиолокационных сигналов, отраженных от морской поверхности, при наличии затенений, обусловленных наличием надводных судов.

Основная часть. Как показано в [1, 2], модель входного сигнала антенны РЛС, отраженного от подстилающей поверхности, может быть представлена как сумма сигналов, отраженных от некоторого числа элементарных участков, составляющих эту поверхность:

$$s(t) = e^{j(\omega_0 t + \varphi_0)} \sum_{i=0}^{N-1} A_i(t) U(t - \tau_E^i), \quad (1)$$

где ω_0 – частота зондирующего сигнала РЛС; φ_0 – начальная фаза зондирующего сигнала РЛС; $A_i(t)$ – амплитуда сигнала, отраженного от i -го участка поверхности; $U(t)$ – закон модуляции зондирующего сигнала; τ_E^i – задержка сигнала на входе антенны РЛС при отражении от i -го участка поверхности по отношению к моменту посылки зондирующего импульса;

$$D_i = M \left\{ |A_i(t)|^2 \right\} = \frac{H_A^2 P_0 S_A G_A p_i}{16\pi^2 r_i^6} r_i \Delta\Theta_\beta \Delta r \alpha_0^S = \frac{H_A^2 P_0 S_A G_A p_i}{16\pi^2 r_i^6} \Delta S_i \alpha_0^S - \quad (2)$$

мощность сигнала, отраженного от i -го участка поверхности; $\Delta S_i = r_i \Delta\Theta_\beta \Delta r$ – площадь i -го участка поверхности;

$$r_i = R_{\min} + \frac{\Delta r}{2} + i\Delta r - \quad (3)$$

горизонтальная дальность до центра i -го участка поверхности; Δr – протяженность элементарного участка поверхности по радиальной дальности; H_A – высота антенны; P_0 – мощность зондирующего сигнала; S_A – эффективная площадь раскрытия приемной антенны; G_A – коэффициент усиления антенны РЛС; p_i – коэффициент (случайное число из $[0, 1]$), статистически моделирующий колебания значения площади видимой части (со стороны антенны РЛС) i -го участка поверхности в результате волнение моря; α_0^S – среднее значение удельной эффективной площади рассеивания (ЭПР) элемента морской поверхности.

Пусть L_{sh} – длина надводного судна, D_{sh} – ширина надводного судна, H_{sh} – средняя высота надводного судна, β_{sh}^L – азимут продольной оси судна (может совпадать с азимутом скорости судна при его движении), \vec{e}_{sh}^β – единичный вектор вдоль направления азимута судна β_{sh} (азимута центра масс), \vec{e}_{sh}^L – единичный вектор, направленный вдоль продольной оси судна. Будем рассматривать судно как параллелепипед длиной L_{sh} , шириной D_{sh} и высотой H_{sh} , ориентированный относительно своего азимута под углом $\Delta\beta_{sh}$, где $\Delta\beta_{sh}$ – угол между векторами \vec{e}_{sh}^β и \vec{e}_{sh}^L (рис. 1):

$$\Delta\beta_{sh} = \beta_{sh}^L - \beta_{sh}. \quad (4)$$

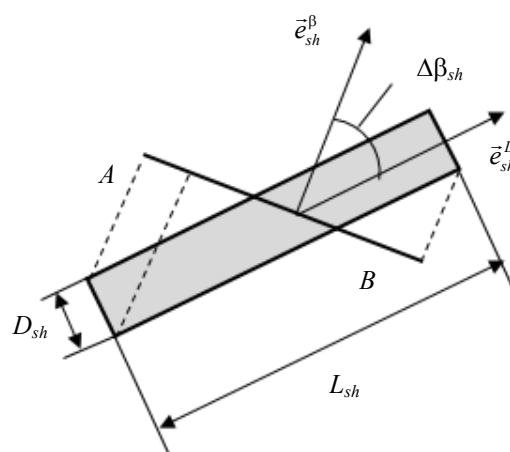


Рис. 1. Условное изображение морского судна

Очевидно, что степень затенения водной поверхности судном будет зависеть от его ориентации относительно РЛС и определяться длиной отрезка $AB = L_{sh}^L$ – размером судна, видимого со стороны антенны РЛС (рис. 1):

$$L_{sh}^\perp = L_{sh} \left| \sin(\beta_{sh}^L - \beta_{sh}) \right| + D_{sh} \left| \cos(\beta_{sh}^L - \beta_{sh}) \right|. \quad (5)$$

Пусть R_{sh} – горизонтальная дальность до судна, тогда

$$\delta\beta_{sh} = 2 \arctg \frac{L_{sh}^\perp}{2R_{sh}} \quad (6)$$

угловой размер судна.

Если оказывается, что

$$\delta\beta_{sh} \ll \Delta\Theta_\beta, \quad (7)$$

где $\Delta\Theta_\beta$ – ширина ДНА РЛС по азимуту, то рассматривать затенение не имеет смысла. В противном случае вычислим длину ΔR_{sh} затененного участка морской поверхности.

Составим пропорцию (рис. 2):

$$\frac{\Delta R_{sh}}{R_{sh} + \Delta R_{sh}} = \frac{H_{sh}}{H_A}. \quad (8)$$

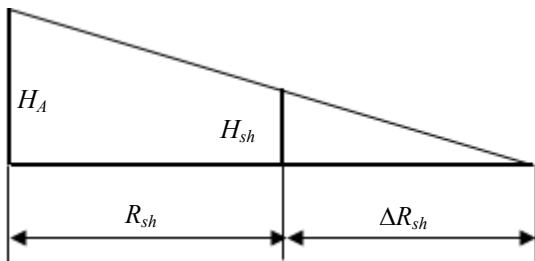


Рис. 2. Схема для расчета протяженности области затенения

Из (8) найдем выражение для определения протяженности зоны затенения:

$$\Delta R_{sh} = \frac{R_{sh}}{H_A/H_{sh} - 1}. \quad (9)$$

Полученное выражение имеет смысл при $H_A > H_{sh}$. При этом область тени определяется фигурой $BCDE$ (рис. 3). При $H_A \leq H_{sh}$ будем полагать, что

$$\Delta R_{sh} = R_{max} - R_{sh}, \quad (10)$$

где R_{max} – максимальная дальность, с которой собирается отраженный от морской поверхности сигнал. В этом случае область затенения будет определяться фигурой $BCD'E'$ (рис. 3).

Вычислим площадь поверхности, с которой собирается отраженный от морской поверхности сигнал в отсутствии надводного судна:

$$\Delta S = \int_{R_{min}}^{R_{max}} \int_0^{\Delta\Theta_\beta} r dr d\beta = \left(R_{min} + \frac{\Delta R}{2} \right) \Delta R \Delta\Theta_\beta, \quad (11)$$

где R_{min} – минимальная дальность, с которой собирается отраженный от морской поверхности сигнал ($\Delta R = R_{max} - R_{min}$).

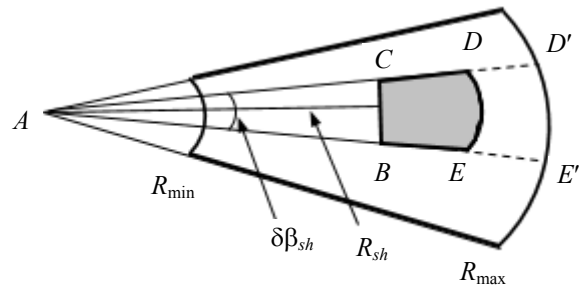


Рис. 3. Схема для вычисления площади тени

Найдем теперь площадь поверхности, затененной надводным судном:

$$\begin{aligned} \Delta S_{sh} &= \int_{R_{sh}}^{R_{sh} + \Delta R_{sh}} \int_0^{\delta\beta_{sh}} r dr d\beta = \\ &= \left(R_{sh} + \frac{\Delta R_{sh}}{2} \right) \Delta R_{sh} \delta\beta_{sh}. \end{aligned} \quad (12)$$

Определим площадь морской поверхности, формирующей отраженный сигнал, при наличии затенения части поверхности надводным судном:

$$\Delta S_x = \Delta S - \Delta S_{sh} = \Delta S(1 - ks), \quad (13)$$

где

$$ks = \frac{\Delta S_{sh}}{\Delta S} = \frac{\left(R_{sh} + \frac{\Delta R_{sh}}{2} \right) \Delta R_{sh} \delta\beta_{sh}}{\left(R_{min} + \frac{\Delta R}{2} \right) \Delta R \Delta\beta} \quad (14)$$

коэффициент затенения.

Представим область площадью ΔS как набор элементарных площадок ΔS_i :

$$\Delta S = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta S_i, \quad (15)$$

где N – число элементарных площадок.

Подставляя (15) в (13), получим:

$$\Delta S_x = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta S_i (1 - ks) = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta S'_i, \quad (16)$$

где

$$\Delta S'_i = \Delta S_i (1 - ks). \quad (17)$$

Из выражения (17) следует, что если морская поверхность, отражающая сигнал, представляется в виде набора элементарных площадок, то

при затенении участка поверхности надводным судном площадь элементарной площадочки следует скорректировать, используя коэффициент ks (14). Полученное значение $\Delta S'_i$ должно использоваться в (2) при вычислении значения мощности.

Заметим, что если в ДНА РЛС находятся несколько надводных судов, то полагая, что создаваемые ими области затенения не пересекаются, получим:

$$\begin{aligned} \Delta S_x &= \Delta S - \sum_{i=1}^M \Delta S_{sh}^i = \Delta S \left(1 - \sum_{i=1}^M \frac{\Delta S_{sh}^i}{\Delta S} \right) = \\ &= \Delta S \left(1 - \sum_{i=1}^M ks_i \right), \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$ks_i = \frac{\Delta S_{sh}^i}{\Delta S} \quad (19)$$

коэффициент затенения (14), который вычисляется для каждого надводного судна; M – число надводных судов.

Представляя область площадью ΔS как набор элементарных площадок (15), имеем:

$$\Delta S_x = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta S_i \left(1 - \sum_{j=1}^M ks_j \right) = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta S_i'' \quad (20)$$

где

$$\Delta S_i'' = \Delta S_i \left(1 - \sum_{j=1}^M ks_j \right). \quad (21)$$

Полученное значение $\Delta S_i''$ должно использоваться в (2) при определении значения мощности.

Заключение. В статье представлен метод вычисления мощности радиолокационного сигнала, отраженного от морской поверхности, при наличии надводных судов. Отмечено, что затенение морской поверхности при расчете мощности отраженного сигнала может быть учтено путем вычитания площади затененной части поверхности из общей площади, которая попадает в ДНА радиолокационного комплекса. Вводится понятие коэффициента коррекции как отношение площади затененного судном участка морской поверхности к общей площади поверхности, попадающей в диаграмму направленности антенны радиолокационного комплекса. Показано, что площадь морской поверхности, которая должна быть использована при вычислении мощности отраженного сигнала, может быть найдена с использованием коэффициента коррекции для каждой элементарной площадочки, на которые разбивается вся отражающая сигнал площадь морской поверхности.

Литература

1. Дятко А. А., Костромицкий С. М., Шумский П. Н. Математическая модель сигнала, отраженного от земной поверхности, при сопровождении РЛС низколетящей цели // Доклады БГУИР. 2015. № 8. С. 17–23.
2. Дятко А. А., Костромицкий С. М., Шумский П. Н. Математическая модель радиолокационного сигнала, отраженного от земной поверхности // Труды БГТУ. 2012. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 127–130.
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.
4. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. М.: Физматлит, 2005. 320 с.

References

1. Dyatko A. A., Kostromitskiy S. M., Shumskiy P. N. Mathematical model of the signal reflected from the ground during radar accompanying low-flying targets. *Doklady BGUIR* [Papers of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics], 2015, no. 8, pp. 17–23 (In Russian).
2. Dyatko A. A., Kostromitskiy S. M., Shumskiy P. N. Mathematical model of the radiolocation signal reflected from an earth surface. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2012, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 127–130 (In Russian).
3. Kobaylo A. S. Theory of computing systems for real-time simulation of physical processes on the example of radiosignals. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2014, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 135–137 (In Russian).
4. Samarskiy A. A., Mikhaylov A. P. *Matematicheskoye modelirovaniye: Idei. Metody. Primery* [Mathematical modelling: Ideas. Methods. Examples]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2005. 320 p.

Информация об авторах

Дятко Александр Аркадьевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: Dyatko_A@tut.by

Костромицкий Сергей Михайлович – доктор технических наук, профессор, член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, директор РНПЦ «Центр радиотехники Национальной академии наук Беларуси» (220072, г. Минск, ул. П. Бровки, 15/5, Республика Беларусь). E-mail: sleus@mail.ru

Шумский Петр Николаевич – кандидат технических наук, доцент, заместитель директора по научной работе. РНПЦ «Центр радиотехники Национальной академии наук Беларуси» (220072, г. Минск, ул. П. Бровки 15/5, Республика Беларусь). E-mail: Shumski_petr@open.by

Information about the authors

Dyatko Aleksandr Arkad'yevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Informatics and Web-design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Dyatko_A@tut.by

Kostromitskiy Sergey Mikhaylovich – DSc (Engineering), Professor, Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, Director of RSPC “Center of the Radio Engineering of the National Academy of Sciences of Belarus” (15/5, P. Brovki str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: sleus@mail.ru

Shumskiy Petr Nikolaevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Deputy Director for science. RSPC “Center of the Radio Engineering of the National Academy of Sciences of Belarus” (15/5, P. Brovki str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Shumski_petr@open.by

Поступила 12.03.2016

УДК 531.19

Р. Н. Ласовский, Д. В. Гапанюк

Белорусский государственный технологический университет

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ
ХАРАКТЕРИСТИК ТОКОПРОВОДЯЩЕЙ КЕРАМИКИ**

Модифицированная система уравнений Нернста – Планка – Пуассона применяется для описания распределения электрического потенциала, напряженности электрического поля и заряда по пространству твердого электролита при стационарном переносе заряда. Свободная энергия рассматривается как функционал поля плотности и используется его разложение в ряд до квадратичных по градиенту слагаемых, вследствие чего выражение для химического потенциала дополняется градиентным слагаемым, и в уравнениях переноса появляется градиентная составляющая, вносящая определяющий вклад в области существования двойного слоя. Сформулирована система трех дифференциальных уравнений четвертого порядка для задачи о контакте трех твердотельных фаз и получено ее аналитическое решение, описывающее немонотонное распределение заряда. Для определения постоянных интегрирования используются условия шивки, заключающиеся в требовании непрерывности функции, ее первой, второй и третьей производных на границах областей. Несмотря на наличие трех областей, распределения потенциала и заряда являются гладкими функциями ввиду принятых условий шивки. Следует отметить, что полученное решение записывается сразу во всей области твердого электролита без его искусственного деления на отдельные зоны.

Ключевые слова: электропроводящая керамика, уравнения Нернста – Планка – Пуассона, химический потенциал, электропроводность, коэффициент диффузии, плотность заряда.

R. N. Lasovsky, D. V. Gapanjuk

Belarusian State Technological University

**SIMULATION OF ELECTROPHYSICAL CHARACTERISTICS
OF ELECTROCONDUCTING CERAMICS**

The modified system of Nernst – Planck – Poisson equations is used to describe the distribution of electric potential, electric field and space charge of the solid electrolyte under a stationary charge transfer. The free energy is considered as the density field functional and its series decomposition up to quadratic in the gradient terms is used, resulting in the expression for the chemical potential that is complemented by a gradient term. The gradient component appears in the transport equations, making a decisive contribution to the area of a double layer. A system of three fourth-order differential equations for the problem of the contact of three solid phases is formulated, and its analytic solution describing nonmonotonic distribution of charge is obtained. To determine the constants of integration the cross-linking conditions requiring continuity of the electric field, its first, second and third derivatives on the boundary are used. Despite the presence of the three areas, the potential distribution and the charge density are smooth functions due to the conditions adopted by the cross-linking. It should be noted that the solution obtained is recorded in the entire region of the solid electrolyte without artificial division into separate zones.

Key words: conductive ceramics, Nernst – Planck – Poisson equations, chemical potential, electrical conductivity, diffusion coefficient, charge density.

Введение. В настоящее время наблюдается значительный интерес к области энергетики, связанной с твердотельными химическими источниками тока [1, 2]. Это обусловлено возросшей потребностью в портативных источниках электрической энергии различного назначения. Отмечается динамичное развитие рынка батарей для нужд мобильных устройств [3, 4].

В современных литиевых батареях в основном применяются жидкие полимерные материалы. Переход к твердым электролитам позволит повысить экологичность и безопасность источников энергии. Важной задачей

является теоретическое описание равновесного распределения и движения ионов в таких системах.

Одним из подходов считается решение системы уравнений Нернста – Планка – Пуассона (НПП), позволяющее устанавливать механизмы электропереноса в различных случаях, опираясь на методы электрохимического импеданса, и исследовать кинетические характеристики электрохимических систем при различных термодинамических условиях в широком диапазоне характеристических частот или характерных масштабов времени.

Ранее рассматривались варианты решения линеаризованных уравнений. В соответствии с ними суммарный поток частиц в среде определяется градиентом электрохимического потенциала и состоит из двух составляющих, порождаемых движущими силами, пропорциональными градиентам электрического потенциала и концентрации числа частиц. Этот подход оказался успешным при анализе миграции частиц в пределах одной фазы и при малой неоднородности распределения плотности в системе.

В данной работе рассмотрен вариант модификации уравнений НПП [5, 6] для описания распределения заряда по пространству твердого электролита при стационарном переносе заряда. При этом химический потенциал рассматривается не как функция, а как функционал поля плотности. Вследствие этого в уравнениях переноса появляется градиентная составляющая, вносящая определяющий вклад в области существования двойного слоя.

Система определяющих уравнений.

Рассмотрим процесс стационарного переноса заряда в электрохимической среде при условии суммарной электронейтральности среды. При этом полагаем, что исследуется фрагмент среды, моделирующий токопроводящую керамику, состоящую из трех областей: приэлектродная, объемная фаза и межзеренная.

Неравновесное состояние среды описывается электрохимическим потенциалом [6]:

$$\mu(x) = \mu_{ch} + q\varphi + \alpha \frac{\partial^2 \delta\rho}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где μ_{ch} – химический потенциал; q – заряд частицы; φ – электрический потенциал; α – параметр взаимодействия; $\delta\rho$ – отклонение плотности заряда от равновесного значения.

Рассматривается случай одномерной неоднородной вариации плотности $\delta\rho$, возникающей в среде под действием внешней разности потенциалов $2\Delta\varphi$, приложенной к электродам, расположенным на расстоянии $2L$ друг от друга вдоль оси x . Ширину межфазной области примем равной $2l$, а начало координат выберем по центру этой области. В условиях стационарности, учитывая симметрию, можно утверждать, что распределение потенциала и плотности заряда вдоль оси x антисимметрично.

Для получения плотности распределения заряда выразим электрохимический потенциал через отклонение плотности:

$$\mu_{ch}(x) = \mu_{eq} + \gamma\delta\rho(x) \quad (2)$$

и используем уравнение Пуассона:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\varepsilon} \delta\rho(x), \quad (3)$$

где μ_{eq} – значение химического потенциала, соответствующее выбранному равновесному состоянию среды; $\gamma = \partial\mu_{eq} / \partial\rho$ – термодинамический фактор; ε – диэлектрическая проницаемость среды.

Соотношения (1)–(3) позволяют записать вариацию электрохимического потенциала в форме

$$\delta\mu(x) = -\frac{\alpha\varepsilon}{q} \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + q\varphi - \frac{\gamma\varepsilon}{q} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}. \quad (4)$$

Уравнение для плотности тока имеет вид

$$J = -qD \frac{\partial}{\partial x} \delta\mu, \quad (5)$$

где D – коэффициент диффузии.

При стационарных условиях ($J = \text{const}$) соотношение (5) после интегрирования по x с учетом выражения (4) приобретает вид

$$\frac{Jx}{qD} = \frac{\alpha\varepsilon}{q} \varphi^{(4)} + \frac{\gamma\varepsilon}{q} \varphi^{(2)} - q\varphi + A, \quad (6)$$

где A – постоянная, учитывающая граничные условия на левой границе участка (ось x предполагается направленной вправо, при этом рассматривается область $x > 0$, поскольку распределение потенциала электрического поля считается антисимметричным), а верхний индекс при φ указывает порядок производной по пространственной переменной.

Из уравнения (6) следует, что φ удовлетворяет неоднородному линейному дифференциальному уравнению со специальной правой частью, которое для трех участков запишется в виде системы трех уравнений в стандартной форме:

$$\varphi^{(4)} + a_1\varphi^{(2)} + b_1\varphi = d_1x, \quad x \leq l, \quad (7)$$

$$\varphi^{(4)} + a_2\varphi^{(2)} + b_2\varphi = d_1l + d_2(x-l), \quad x > l, \quad (8)$$

$$\varphi^{(4)} + a_2\varphi^{(2)} + b_2\varphi = d_1l + d_2(L-l), \quad x \geq L, \quad (9)$$

где

$$a_1 = \frac{\gamma_1}{\alpha_1} < 0; \quad b_1 = -\frac{q^2}{\alpha_1\varepsilon_1} > 0, \quad (10)$$

$$a_2 = \frac{\gamma_2}{\alpha_2} < 0; \quad b_2 = -\frac{q^2}{\alpha_2\varepsilon_2} > 0, \quad (11)$$

$$d_1 = \frac{J}{D_1\alpha_1\varepsilon_1}, \quad d_2 = \frac{J}{D_2\alpha_2\varepsilon_2}. \quad (12)$$

Индексы 1 и 2 обозначают номер участка в порядке следования уравнений (7)–(9), при-

чем параметры среды предполагаются одинаковыми для участков 2 и 3. Правые части этих уравнений сформированы определением константы A последовательным интегрированием левой части исходного уравнения (6) при условии, что $\delta\mu(0) = 0$:

$$A_1 = 0 \quad \text{для} \quad 0 \leq x < l, \quad (13)$$

$$A_2 = \frac{Jl}{qD_1} \quad \text{для} \quad l \leq x < L, \quad (14)$$

$$A_3 = \frac{Jl}{qD_1} + \frac{J(L-l)}{qD_2} \quad \text{для} \quad x \geq L. \quad (15)$$

Кроме того, в системе уравнений (7)–(9) учтено, что ток протекает между электродами, и, следовательно, на третьем участке ток равен нулю.

Ввиду характера правой части и граничных условий уравнение (7) должно удовлетворять следующему условию симметрии:

$$\varphi(x) = -\varphi(-x). \quad (16)$$

Корни характеристических уравнений (значения величин a и b выбираются согласно уравнениям (10) с параметрами, соответствующими рассматриваемому участку):

$$k_{1,2}^2 = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{\frac{a^2}{4} - b} > 0 \quad \text{при} \quad -\alpha < \frac{\gamma^2 \varepsilon}{4q^2}. \quad (17)$$

Следовательно, с учетом свойства симметрии (16) решение уравнения (7) должно содержать лишь нечетные функции координаты x :

$$\varphi_1(x) = C_1 \text{sh}(k_1 x) + C_2 \text{sh}(k_2 x) + \frac{d_1}{b_1} x. \quad (18)$$

В объемной области решение уравнения (8) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \varphi_2(x) = & C_3 e^{-k_3(x-l)} + C_4 e^{k_3(x-l)} + C_5 e^{-k_4(x-l)} + \\ & + C_6 e^{k_4(x-l)} + \frac{d_1 l}{b_1} + \frac{d_2(x-l)}{b_2}. \end{aligned} \quad (19)$$

Также с учетом ограниченности потенциала на бесконечности решение уравнения (9) записывается в виде

$$\begin{aligned} \varphi_3(x) = & C_7 e^{-k_3(x-L)} + C_8 e^{-k_4(x-L)} + \\ & + \frac{d_1 l}{b_2} + \frac{d_2(L-l)}{b_2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Для определения постоянных интегрирования C_j ($j = 1, \dots, 8$) используются условия сшивки, заключающиеся в требовании непре-

рывности функции, ее первой, второй и третьей производных на границах областей, что дает 8 условий для 8 коэффициентов.

Решение в явном виде достаточно громоздкое и здесь не приводится, а конкретные вычисления выполнены в программном пакете Mathcad.

В результате распределения потенциала φ , напряженности поля E , плотности заряда ρ выражаются зависимостями

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_1(x) & \text{при} \quad 0 \leq x \leq l, \\ \varphi_2(x) & \text{при} \quad l < x \leq L, \\ \varphi_3(x) & \text{при} \quad x > L, \end{cases} \quad (21)$$

$$E(x) = \frac{d\varphi}{dx}, \quad \rho(x) = \frac{d^2\varphi}{dx^2}. \quad (22)$$

Функции (21) и (22) описывают распределение электрических характеристик при перетекании постоянного тока из точки $x = -L$ в точку $x = L$.

Результаты вычислений и их анализ.

На рис. 1 и 2 представлены зависимости электрического потенциала, напряженности электрического поля и плотности заряда от координаты, полученные по формулам (21) и (22) при $k_1 = 0,1$, $k_2 = 0,3$, $k_3 = 0,5$, $k_4 = 0,6$, $d_1 = 0,5$, $b_1 = b_2 = 2$, $d_2 = 0,3d_1$, с различной шириной межфазной области.

На рисунках приведена лишь область $x > 0$, поскольку распределение потенциала электрического поля и заряда антисимметрично, а напряженности поля симметрично по пространственной координате.

Графики указанных зависимостей показывают, что, несмотря на наличие трех областей, распределения потенциала и заряда являются гладкими функциями ввиду принятых условий сшивки.

Следует также отметить немонотонный характер изменения плотности заряда в каждой из фаз при приближении к границе, их разделяющей (появление «крыльев»).

Как и следовало ожидать, ширина межфазной прослойки не влияет на ширину «крыльев» распределения заряда (которая определяется волновыми числами k_j) или быстроту изменения характеристик электрического поля по длине системы, а меняет лишь их местоположение, если только «крылья» не перекрываются. При этом напряженность поля имеет четко выраженные горизонтальные участки в областях нулевого заряда.

Локальные плотности заряда отличаются от нуля на границах участков вследствие скачков электрофизических характеристик среды либо присутствия электродов.

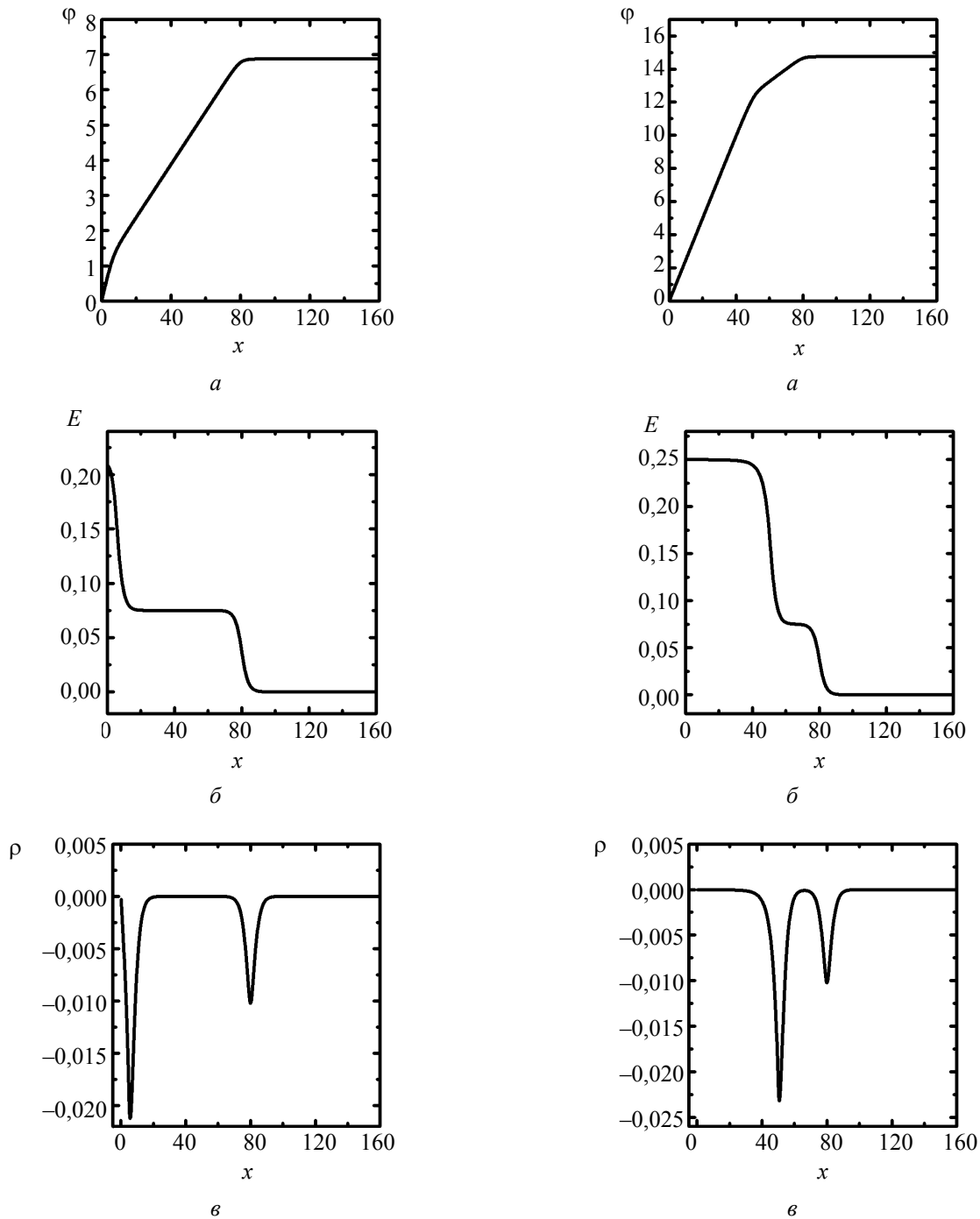


Рис. 1. Зависимости электрического потенциала φ (а), напряженности электрического поля E (б) и плотности заряда ρ (в) от координаты при $l = 5$ и $L = 80$

Рис. 2. Зависимости электрического потенциала φ (а), напряженности электрического поля E (б) и плотности заряда ρ (в) от координаты при $l = 50$ и $L = 80$

В целом система остается электронейтральной, поскольку в области межзеренной прослойки формируется двойной электрический слой, причем при достаточной ширине слоя положительная и отрицательная части заряда пространственно разделены (рис. 2), тогда как при малой ширине (по сравнению с обратными величинами волновых чисел k_1 и k_2) они образуют компактный двойной слой.

Заключение. Выполнен анализ распределения плотности заряда в неоднородных многофазных системах, которыми являются керамические ионные проводники. В таких системах изменение распределения плотности заряда в каждой из фаз при приближении к границе, их разделяющей, должно быть немонотонным. Однако изучение решений линейаризованной системы уравнений (НПП) при

стационарных условиях показало, что они носят монотонный характер и, следовательно, эта система неприменима для описания выше-названных систем.

Разработан вариант модификации уравнений НПП, устраняющий отмеченный недостаток. В результате в уравнениях переноса появляется градиентная составляющая, вносящая определяющий вклад в области межфазных слоев.

Сформулирована система трех дифференциальных уравнений четвертого порядка

для задачи о контакте трех твердотельных фаз и получено ее аналитическое решение, описывающее немонотонное распределение заряда.

Следует отметить, что полученное решение записывается сразу во всей области твердого электролита без его искусственного деления на отдельные зоны (приэлектродная область, область объема зерна, прослойка между зернами и т. п.) и четко отражает наличие неоднородностей в системе.

Литература

1. Armand M., Tarascon J.-M. Building better batteries // *Nature*. 2008. Vol. 451. P. 652–657.
2. Rechargeable Batteries: Grasping for the Limits of Chemistry / E. J. Berg [et al.] // *Journ. Electrochem. Soc.* 2015. Vol. 162, no. 14. P. A2468–A2475.
3. The Industry Review 2013. URL: <http://fuelcelltoday.com/analysis/industry-review/2013/the-industry-review-2013> (date of access: 27.09.2015).
4. Tarascon J.-M. Key challenges in future Li-battery research // *Phil. Trans. Royal Soc. A.* 2010. Vol. 368. P. 3227–3241.
5. Бокун Г. С. Асимптотическое решение уравнений Нернста – Планка – Пуассона для ионного кристалла // *Труды БГТУ*. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 32–34.
6. Бокун Г. С., Вихренко В. С. Химический потенциал в форме функционала плотности для описания импеданса электрохимической системы // *Труды БГТУ*. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 43–47.

References

1. Armand M., Tarascon J.-M. Building better batteries. *Nature*, 2008, vol. 451, pp. 652–657.
2. Berg E. J., Villevieille C., Streich D., Trabesinger S., Novák P. Rechargeable Batteries: Grasping for the Limits of Chemistry. *Journ. Electrochem. Soc.*, 2015, vol. 162, no. 14, pp. A2468–A2475.
3. The Industry Review 2013. Available at: <http://fuelcelltoday.com/analysis/industry-review/2013/the-industry-review-2013> (accessed 27.09.2015).
4. Tarascon J.-M. Key challenges in future Li-battery research. *Phil. Trans. Royal Soc. A.*, 2010, vol. 368, pp. 3227–3241.
5. Bokun G. S. Asymptotic solution of the Nernst – Planck – Poisson equation for the ionic crystal. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2014, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 32–34 (In Russian).
6. Bokun G. S., Vihrenko V. S. Chemical potential in the form of density functional for description of inhomogeneous electrochemical system. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 43–47 (In Russian).

Информация об авторах

Ласовский Руслан Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: lasovsky@tut.by

Гапанюк Дмитрий Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gapdm@mail.ru

Information about the authors

Lasovsky Ruslan Nikolaevich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lasovsky@tut.by

Gapanjuk Dmitry Vladimirovich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gapdm@mail.ru

Поступила 10.03.2016

ОБРАБОТКА И ПЕРЕДАЧА ИНФОРМАЦИИ

УДК 004.772

И. А. Миронов, Я. А. Жук

Белорусский государственный технологический университет

ЦЕНТРАЛИЗОВАННАЯ СИСТЕМА ХРАНЕНИЯ И СИНХРОНИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ УЧЕБНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ «ОБЛАЧНЫХ» ТЕХНОЛОГИЙ

Статья посвящена описанию проблем доступности и синхронизации версий учебных материалов на устройствах преподавателей и студентов. В качестве решений данной проблемы рассматриваются такие программные средства, как FTP- и web-серверы, а также современные «облачные» хранилища. Поскольку FTP- и web-серверы решают проблему доступности, но нуждаются в дополнительных средствах оповещения о необходимости синхронизации, рекомендуется применять «облачные» хранилища, решающие весь комплекс рассматриваемых проблем. При выборе «облачного» хранилища акцент сделан на необходимость доступа к учебным материалам во время занятий, поэтому в качестве наиболее приемлемого предлагается решение с открытым исходным кодом OwnCloud, которое размещается на web-сервере в локальной сети образовательного учреждения с возможностью доступа из сети Интернет. Для данного решения рассматриваются как общие принципы организации решения в целом, так и детали реализации базы данных, файлового хранилища, серверного и клиентского приложений, синхронизации данных. Особое внимание уделено возможности расширения данного программного комплекса при помощи дополнительных пакетов из репозитория и принципам разработки собственных дополнений на основе классов серверного и клиентского приложений при помощи специализированного инструментария.

Ключевые слова: централизованное хранение, синхронизация, надежность, «облачные» технологии.

I. A. Mironov, Ya. A. Zhuk

Belarusian State Technological University

CENTRAL STORAGE AND SYNCHRONIZATION SYSTEM FOR E-LEARNING MATERIALS BASED ON “CLOUD” TECHNOLOGIES

The article describes the problems of accessibility and version synchronization of educational materials on the teachers' and students' devices. As solutions to this problem such tools as FTP and web servers, as well as modern “cloud” storages are discussed. Since the FTP and web servers solve the problem of availability, they require additional tools for synchronization, that's why the use of “cloud” storages, solving the whole complex of the problems under consideration is recommended. When choosing cloud storage, the emphasis is on the need of access to educational materials in the classroom, therefore, the most acceptable solution is open source software OwnCloud, which is hosted on a web server in the educational institutions local network with access to the Internet. The general principles of the overall solution organization and implementation details of the database, file storage, server and client applications, data synchronization are discussed for this solution. Special attention is paid to the possibility of extending this software with additional packages from a repository, design principles and specialized tools for self-made extensions development based on server and client application classes.

Key words: central storage, synchronization, reliability, “cloud” technologies.

Введение. В современной учебной практике широкое распространение получили электронные учебные материалы. Одним из преимуществ данных материалов является возможность более частого внесения изменений и до-

полнений по сравнению с печатными изданиями. Однако простота копирования данных материалов создает проблему распространения устаревших версий учебных материалов. Это обусловлено отсутствием постоянного доступа

к наиболее актуальной версии материала и механизмов синхронизации между устройствами студентов и преподавателей.

Основная часть. Одним из способов решения данных проблем является размещение учебных материалов на web- и FTP-серверах, однако все обозначенные проблемы не решаются, так как требуется дополнительное оповещение о размещении на сервере новой версии материала. Поэтому необходимо более полноценное решение, соответствующее современным тенденциям в области информационных технологий.

Современное общество, став за последнее десятилетие информационным, теперь стремительно становится мобильным. Это означает, что доступ к информации и услугам обеспечивается пользователям постоянно, независимо от времени и места нахождения. Для обеспечения такой мобильности появились новые классы компьютерных устройств (смартфоны, планшеты и т. п.), а также новые технологии работы с информационными ресурсами и услугами («облачные» технологии).

Как отмечено в «Концепции информатизации системы образования Республики Беларусь на период до 2020 года» [1], одной из устойчивых мировых тенденций развития средств информатизации является миграция к так называемым «облачным» технологиям. Эти технологии основаны на централизованном хранении и обработке информации в центрах обработки данных (ЦОД), на гибких механизмах управления ресурсами и выделения их удаленным пользователям. В настоящее время концепция «облачных» технологий предполагает оказание следующих типов услуг пользователям:

– все как услуга (Everything as a Service). При таком виде сервиса пользователю будет предоставлено все от программно-аппаратной части до управления бизнес-процессами, включая взаимодействие между пользователями. От пользователя требуется только наличие доступа в сеть Интернет. Данный вид сервиса – это более общее понятие по отношению к другим услугам, являющимся более частными случаями;

– инфраструктура как услуга (Infrastructure as a service). Пользователю предоставляется компьютерная инфраструктура, обычно виртуальные платформы (компьютеры), связанные в сеть, которые он самостоятельно настраивает под собственные цели;

– платформа как услуга (Platform as a service). Пользователю предоставляется компьютерная платформа с установленными операционной системой и программным обеспечением;

– программное обеспечение как услуга (Software as a service). Данный вид услуги

обычно позиционируется как «программное обеспечение по требованию». Это программное обеспечение развернуто на удаленных серверах, и пользователь получает к нему доступ посредством Интернета, причем все вопросы обновления и лицензий на данное программное обеспечение регулируются поставщиком данной услуги. Оплата в данном случае производится за фактическое использование программного обеспечения;

– аппаратное обеспечение как услуга (Hardware as a Service). В данном случае пользователю услуги предоставляется оборудование на правах аренды, которое он может использовать для собственных целей. Данный вариант позволяет экономить на обслуживании оборудования, хотя по своей сути мало чем отличается от вида услуги «Инфраструктура как сервис», за исключением того, что вы имеете «голое» оборудование, на основе которого разворачиваете свою собственную инфраструктуру с использованием наиболее подходящего программного обеспечения;

– рабочее место как услуга (Workplace as a Service). В данном случае компания использует «облачные» вычисления для организации рабочих мест своих сотрудников, настроив и установив все нужное программное обеспечение, необходимое для работы персонала;

– безопасность как сервис (Security as a Service). Данный вид услуги предоставляет возможность пользователям быстро разворачивать продукты, позволяющие обеспечить безопасное использование web-технологий, безопасность электронной переписки, а также безопасность локальной системы, что дает возможность пользователям данного сервиса экономить на разворачивании и поддержании своей собственной системы безопасности;

– данные как услуга (Data as a Service). Основная идея данного вида услуги заключается в том, что пользователю предоставляется дисковое пространство, которое он может использовать для хранения больших объемов информации.

Также в концепции отмечен переход от персональных компьютеров к широкому ряду личных мобильных устройств, что позволяет повысить качество обучения путем вовлечения данных устройств в учебный процесс.

Таким образом, в качестве полноценного решения обозначенных проблем предлагается использовать «облачные» и мобильные технологии и, в частности, «облачные» хранилища, выполняющие контроль версий учебных материалов и их синхронизацию со всем спектром устройств пользователей. В настоящее время общедоступные «облачные» хранилища предоставляются

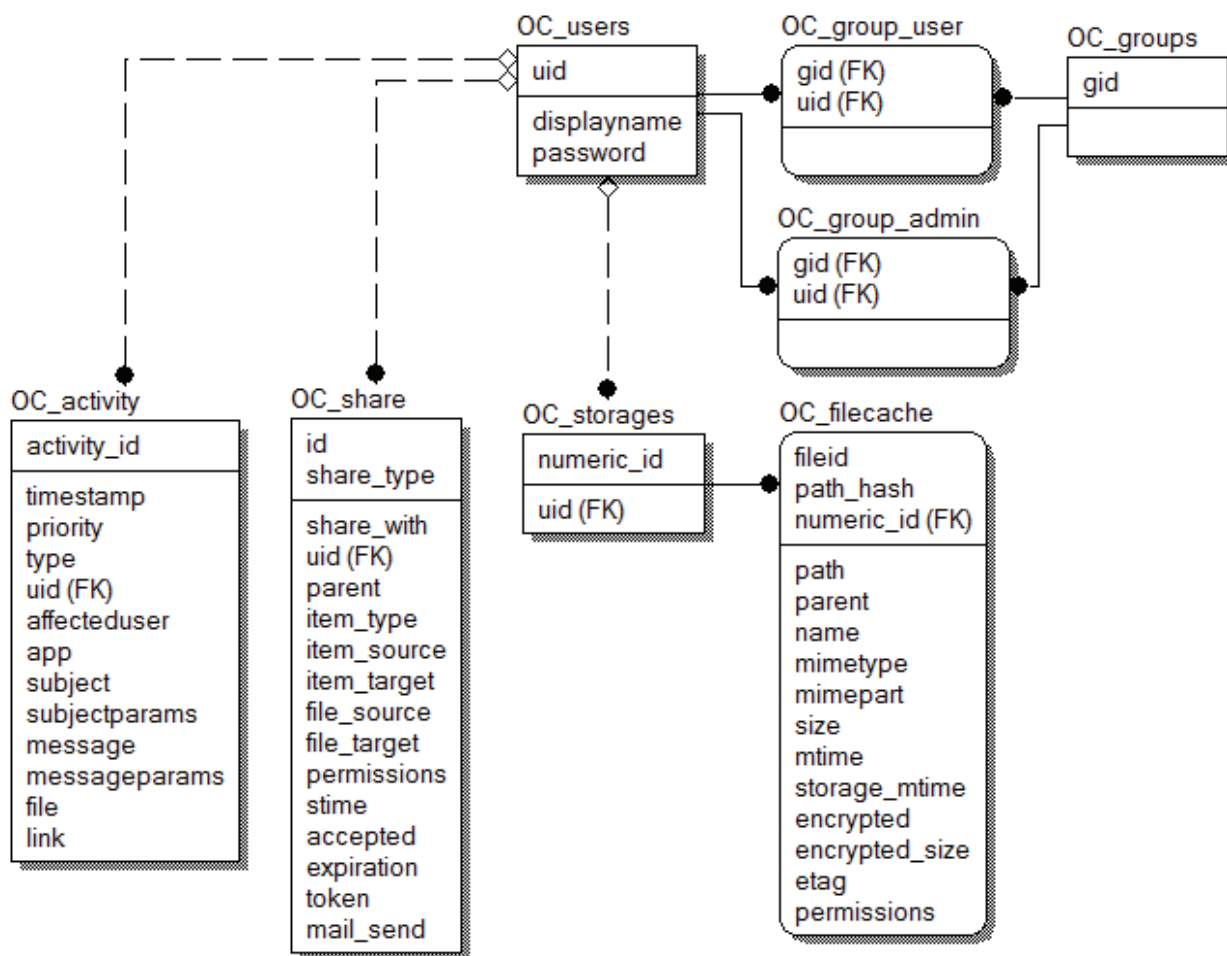
рядом крупных компаний, однако с целью снижения времени доступа к учебным материалам и повышения надежности доступа к материалам на учебных занятиях было решено развернуть решение под названием OwnCloud на базе ЦОД БГТУ.

Данное решение является проектом с открытым исходным кодом. Серверное приложение разработано на языке программирования PHP и способно взаимодействовать с сервером баз данных MySQL. В серверном приложении с помощью media-запросов в таблицах стилей CSS и JavaScript библиотеки JQuery реализован адаптивный интерактивный web-интерфейс. Фрагмент структуры базы данных с наиболее важными таблицами представлен на рисунке.

Как видно из рисунка, для хранения логинов пользователей, их отображаемых имен и паролей используется таблица *OC_users*. Объединение пользователей в группы выполняется при помощи таблицы *OC_group_user*. Администраторы групп добавляются в таблицу *OC_group_admin*. Текущие действия пользователей хранятся в таблице *OC_activity* для реализации совместной работы с документами. Выдаваемые пользова-

телями разрешения на общий доступ по ссылке и на доступ для других пользователей облака записываются в таблицу *OC_share*. Свойства файлов, среди которых стоит отметить хеш-сумму и дату, хранятся в таблице *OC_filecache*, которая соединяется с таблицей *OC_users* при помощи вспомогательной таблицы *OC_storages*. Сами файлы хранятся в файловой системе сервера в папке *data*, внутри которой для каждого пользователя создается своя подпапка.

Хеш-сумма используется для определения необходимости синхронизации: если рассчитанная клиентским приложением хеш-сумма не совпадает с хеш-суммой, хранящейся на сервере, и при этом дата синхронизации больше, чем дата изменения файла на клиентском устройстве, то выполняется передача файла с сервера на клиентское устройство, а если дата синхронизации меньше, чем дата изменения файла на клиентском устройстве, реализуется загрузка файла с клиента на сервер. При совпадении хеш-сумм на клиентском устройстве и на сервере передача файлов не выполняется, так как с момента последней синхронизации изменений не произошло.



Фрагмент структуры базы данных OwnCloud

Клиентские приложения разработаны при помощи кроссплатформенного инструментария QT. Компиляция исходного кода приложения в исполняемые файлы для различных операционных систем является встроенной функцией QT. Тем не менее отдельные функции интеграции с операционными системами, такие как отображение клиентского приложения на панели задач, добавление пунктов в контекстное меню и др., выполнены отдельно для операционных систем (Windows, Mac OS) и файловых менеджеров (Nautilus, Dolphin). Также для обеспечения кроссплатформенности используются директивы компилятора вида `#ifdef Q_OS_WIN`.

Инициаторами синхронизации выступают клиентские приложения. Связь между клиентским и серверным приложениями выполняется по защищенному протоколу HTTPS. Обработкой всех запросов, как от клиентских приложений, так и от браузеров, занимается главный файл серверного приложения `index.php`.

Структура серверного приложения представляет собой панель, в которую подключаются различные модули. Главным модулем является модуль «Файлы», позволяющий просматривать, загружать и делиться файлами. Дополнительные модули, такие как текстовый редактор, календарь и др., могут быть подключены администратором.

Дополнительные модули доступны для загрузки из репозитория. Для создания собственного модуля необходимо использовать специальный инструментарий `osdev`. Данный инструментарий позволяет создать все необходимые

для разработки модуля папки и файлы, включающие в себя ресурсы и маршруты, контроллер, описание структуры дополнительных таблиц базы данных, сущности, фабрики, службы, исключения и ошибки, тесты, конфигурацию. Внутри создаваемых файлов размещаются классы, наследующие соответствующие базовые классы. Для работы со списком пользователей и файловым хранилищем в собственных классах необходимо использовать соответствующие встроенные функции.

Описание таблиц базы данных выполняется в XML-документах в нотации MDB2. Обновление базы данных осуществляется автоматически при изменении в файле описания версии базы данных.

Аналогично серверному приложению, библиотеки клиентских приложений могут быть использованы для разработки собственных приложений по управлению файлами в хранилище.

Заключение. Развернутая в ЦОД БГТУ централизованная система хранения и синхронизации учебных материалов положительно зарекомендовала себя в ходе лабораторных учебных занятий студентов факультета информационных технологий. Данная система позволила преподавателям сконцентрироваться на улучшении учебных материалов, не отвлекаясь на проблемы их распространения среди студентов. Также снабжение актуальными версиями учебных материалов позволило избавиться студентов от поиска актуальной информации по изучаемым дисциплинам, что было воспринято ими положительно.

Литература

1. Концепция информатизации системы образования Республики Беларусь на период до 2020 года: утв. С. А. Маскевичем 24 июня 2013 г. Минск, 2013. 20 с.

References

1. *Kontseptsiiya informatizatsii sistemy obrazovaniya Respubliki Belarus' na period do 2020 goda* [The concept of the Republic of Belarus education system informatization for the period till 2020 year]. Minsk, 2013. 20 p.

Информация об авторах

Миронов Игорь Александрович – ассистент кафедры информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Сverdlova, 13a, Республика Беларусь). E-mail: miroнов@belstu.by

Жук Ярослав Александрович – аспирант. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Сverdlova, 13a, Республика Беларусь). E-mail: zhuk@belstu.by

Information about the authors

Mironov Igor Aleksandrovich – assistant lecturer, the Department of Informatics and Web-design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: miroнов@belstu.by

Zhuk Yaroslav Aleksandrovich – PhD student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: zhuk@belstu.by

Поступила 04.03.2016

УДК 004.853

Н. И. Гурин, Я. А. Жук

Белорусский государственный технологический университет

**МОРФОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕКСТА ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ БАЗЫ ЗНАНИЙ
ДИАЛОГОВОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ**

Статья посвящена описанию реализации алгоритма морфологического анализа текста, необходимого для автоматизации наполнения базы знаний диалоговой информационной системы. Алгоритм основан на гибридном методе морфологического анализа. Данный метод выработан путем анализа недостатков распространенных подходов к определению морфологических признаков слов на основе словарей и правил. Гибридный метод заключается в хранении в качестве правил псевдоокончаний, состоящих из произвольного числа последних символов в словах, при одинаковом изменении слов по формам и в хранении полных словоформ в случаях, когда формы слова абсолютно разные по написанию. Также описывается структура баз данных, используемых для определения морфологических признаков слов, разработанная на основе использующихся в языке способов образования форм слов. Алгоритм реализован на языке Python и осуществляет морфологический анализ в ходе построения базы знаний диалоговой информационной системы. Запросы на выборку из баз данных выполняются при помощи оператора REGEXP для сравнения анализируемого слова с псевдоокончаниями из баз данных, которые дополняются обозначением произвольного сочетания символов в качестве псевдоосновы. Дополнительным преимуществом алгоритма является кэширование результатов.

Ключевые слова: морфологический анализ, регулярные выражения, обработка естественного языка.

N. I. Gurin, Ya. A. Zhuk

Belarusian State Technological University

**TEXT MORPHOLOGICAL ANALYSIS FOR THE DIALOG
INFORMATION SYSTEM KNOWLEDGE BASE GENERATION**

The article describes the implementation of the morphological text analysis algorithm needed for automation of the dialog information system knowledgebase filling. The algorithm is based on a hybrid method of morphological analysis. This method is developed by analyzing the disadvantages of common approaches to the word morphological characteristics definition based on dictionaries and rules. The hybrid method consists in storing rules in the form of pseudoendings including an optional number of word last characters when word forms has similar pseudobasis, and in storing full word forms when word forms are absolutely different in writing. The article also describes the database structure used to define the morphological characteristics of words, based on the methods of word forms formation used in the language. The algorithm is implemented in Python and performs the morphological analysis in the dialog information system knowledgebase building. The retrieval from the databases is performed using the REGEXP operator for searching matches of analyzed words with pseudoendings from databases, supplemented with notation of any combination of characters as pseudobasis. The additional benefit of the algorithm is the caching of results.

Key words: morphological analysis, regular expressions, natural language processing.

Введение. Для построения диалоговой информационной системы, способной отвечать на поставленные вопросы, необходимо обеспечить такую систему базой знаний, содержащей понятия предметной области и связи между ними. Полезность диалога с системой во многом зависит от объема базы знаний, однако наполнение базы знаний остается трудоемким процессом, выполняемым вручную. Автоматизировать данный процесс возможно путем автоматического извлечения знаний из текстов по заданной предметной области. Одним из начальных этапов семантического анализа исходного тек-

ста является морфологический анализ слов, т. е. определение части речи слова и его формы в предложении. Данная задача возникает как при разбиении сложных предложений на простые для различения причастных и деепричастных оборотов речи от перечислений, так и при семантическом анализе простых предложений в связи с тем, что элементом перехода, стоящим между двумя смысловыми единицами, с точки зрения актуального членения предложения является глагол [1].

В целом морфологический анализ слов исходного текста – важный этап для безошибочного

наполнения базы знаний и создания на ее основе семантической сети ключевых понятий диалоговой информационной системы.

Основная часть. Одним из направлений определения морфологических признаков слов является составление словарей, содержащих различные формы слов и их морфологические признаки. Недостатками данного метода считаются большая трудоемкость составления словаря, значительный объем словаря в памяти и неспособность к обработке слов, отсутствующих в словаре. Например, словарь проекта OpenCorpora составляет 1 344 568 слов и занимает 481,4 МБ [2].

Также существует направление определения морфологических признаков слов по правилам. Как отмечают разработчики универсальных анализаторов текстов, при наличии большого числа правил возникают конфликты между ними. Решением данной проблемы могут служить сортировка правил в определенном порядке либо составление деревьев решений.

Развитием методов на основе правил являются статистические методы, в которых для различных правил дается не один точный ответ, а набор вероятностей, и методы на основе грамматик, в которых правила объединяются в цепочки или деревья. Оба данных направления являются сложными в разработке и ресурсоемкими в применении [2].

Стоит отметить наличие различных способов реализации рассмотренных методов морфологического анализа. Основными отличиями данных способов являются форма хранения словаря или набора правил и средства реализации поиска морфологических признаков по форме слова. Наиболее распространенными приемами реализации считаются применение реляционных баз данных для хранения вместе с запросами на языке SQL для поиска и использование XML-файлов для хранения вместе со специализированными программными библиотеками для поиска.

Для разрабатываемого генератора семантической сети на основе баз данных был применен гибридный подход, в котором в качестве основы выступает перечень правил в виде наборов из последних букв слов (псевдоокончаний или финалий [3]) в различных формах без привязки к определенным морфемам. Для разрешения конфликтов между правилами используется сортировка псевдоокончаний в порядке убывания их длины. Таким образом, при неправильном определении части речи или формы слова по существующим правилам можно добавить формы этого слова в набор правил целиком, как в словарь, чтобы его длина превысила длину использующихся правил. Такой

подход позволяет сократить трудоемкость составления словаря и расход памяти на его хранение, а также избежать противоречий между правилами.

Наличие большинства морфологических признаков зависит от части речи, к которой принадлежит слово. Глаголы обладают спряжением, числом, временем, родом в прошедшем времени и лицом – в настоящем и будущем. Вспомогательные части речи, наречия и обозначенные цифрами числительные являются неизменяемыми частями речи. Остальные основные части речи (существительное, прилагательное, местоимение) изменяются по падежам и числу. Поэтому для хранения правил, описывающих перечисленные три группы слов, используются три таблицы реляционных баз данных, каждая из которых хранит наборы последних букв для каждой из обозначенных групп слов. В поля таблиц заносятся наборы последних символов для различных форм слов. Составленная структура баз данных представлена на рис. 1.

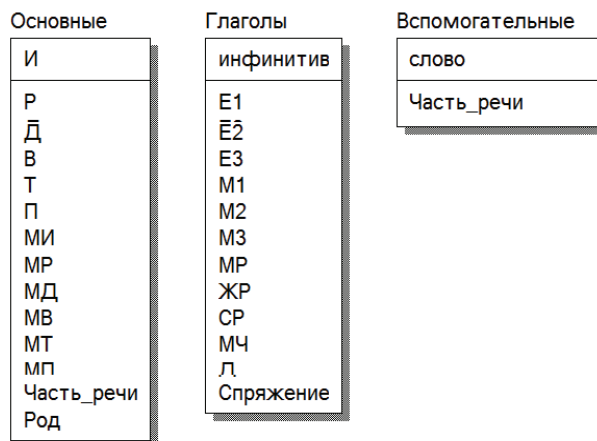


Рис. 1. Поля таблиц баз данных

Как видно из рис. 1, в таблице глаголов было создано 12 полей для псевдоокончаний форм слов (инфинитив, 2 числа по 3 лица, 3 рода и множественное число для прошедшего времени, деепричастие), в таблице несклоняемых частей речи – одно поле для единственной формы слова, в таблице основных частей речи – 12 полей (2 числа по 6 падежей). Кроме части речи, соответствующей финалиям в различных формах, в таблице хранятся другие морфологические признаки, такие как спряжение глаголов и род других основных частей речи.

Поскольку в таблице глаголов хранятся правила только для одной части речи, поле «Часть_речи» в данной таблице отсутствует в отличие от других таблиц, в которых хранятся слова различных частей речи. Стоит отметить,

что неизменяемые деепричастия вносятся отдельным полем в таблицу глаголов, а действительные и страдательные причастия записываются отдельно в таблицу основных частей речи, так как они изменяются по падежам и числу.

Для поиска морфологических признаков слова оно сравнивается при помощи регулярных выражений с псевдоокончаниями слов из таблиц баз данных. Данная операция реализуется при помощи соответствующих запросов на языке SQL, содержащих оператор сравнения строки с регулярным выражением REGEXP. Фрагмент листинга функции, выполняющей сравнение переданного в качестве аргумента слова с финалиями из базы данных глаголов с учетом возможности наличия постфикса «ся», приведен на рис. 2.

Следует отметить, что результаты запросов к трем таблицам затем сравниваются друг с другом для выявления наибольшего по длине. В то же время для неизменяемых слов выполняется дополнительный запрос на выборку точных совпадений слова с записями в базе данных для того, чтобы избежать некорректного распознавания коротких предлогов как наречий, оканчивающихся на сочетание символов, совпадающее с предлогом.

```
def compareStrWithVerbsEndings(s):
    return "" + s + " " + REGEXP
    CONCAT('.*', инфинитив, '$') OR "" + s + " "
    REGEXP CONCAT('.*', E1, '$') OR "" + s + " "
    REGEXP CONCAT('.*', E2, '$') OR "" + s + " "
    REGEXP CONCAT('.*', E3, '$') OR "" + s + " "
    REGEXP CONCAT('.*', M1, '$') OR "" + s + " "
    REGEXP CONCAT('.*', M2, '$') OR "" + s + " "
    REGEXP CONCAT('.*', M3, '$') OR "" + s + " "
    REGEXP CONCAT('.*', Д, '$') OR "" + s + " "
    REGEXP CONCAT('.*', инфинитив, 'ся', '$')
    OR "" + s + " " + REGEXP CONCAT('.*', E1, 'ся', '$')
    OR "" + s + " " + REGEXP CONCAT('.*', E2, 'ся', '$')
    OR "" + s + " " + REGEXP CONCAT('.*', E3, 'ся', '$')
    OR "" + s + " " + REGEXP CONCAT('.*', M1, 'ся', '$')
    OR "" + s + " " + REGEXP CONCAT('.*', M2, 'ся', '$')
    OR "" + s + " " + REGEXP CONCAT('.*', M3, 'ся', '$')
    OR "" + s + " " + REGEXP CONCAT('.*', Д, 'ся', '$')
    OR "" + s + " " + REGEXP
```

Рис. 2. Фрагмент листинга функции поиска глаголов

Кроме того, с целью оптимизации затрат вычислительных ресурсов на выполнение поиска результаты для каждого слова сохраняются в отдельном списке (кеше). Блок-схема программного модуля, реализующего функции определения части речи, к которой принадлежит слово, представлена на рис. 3.

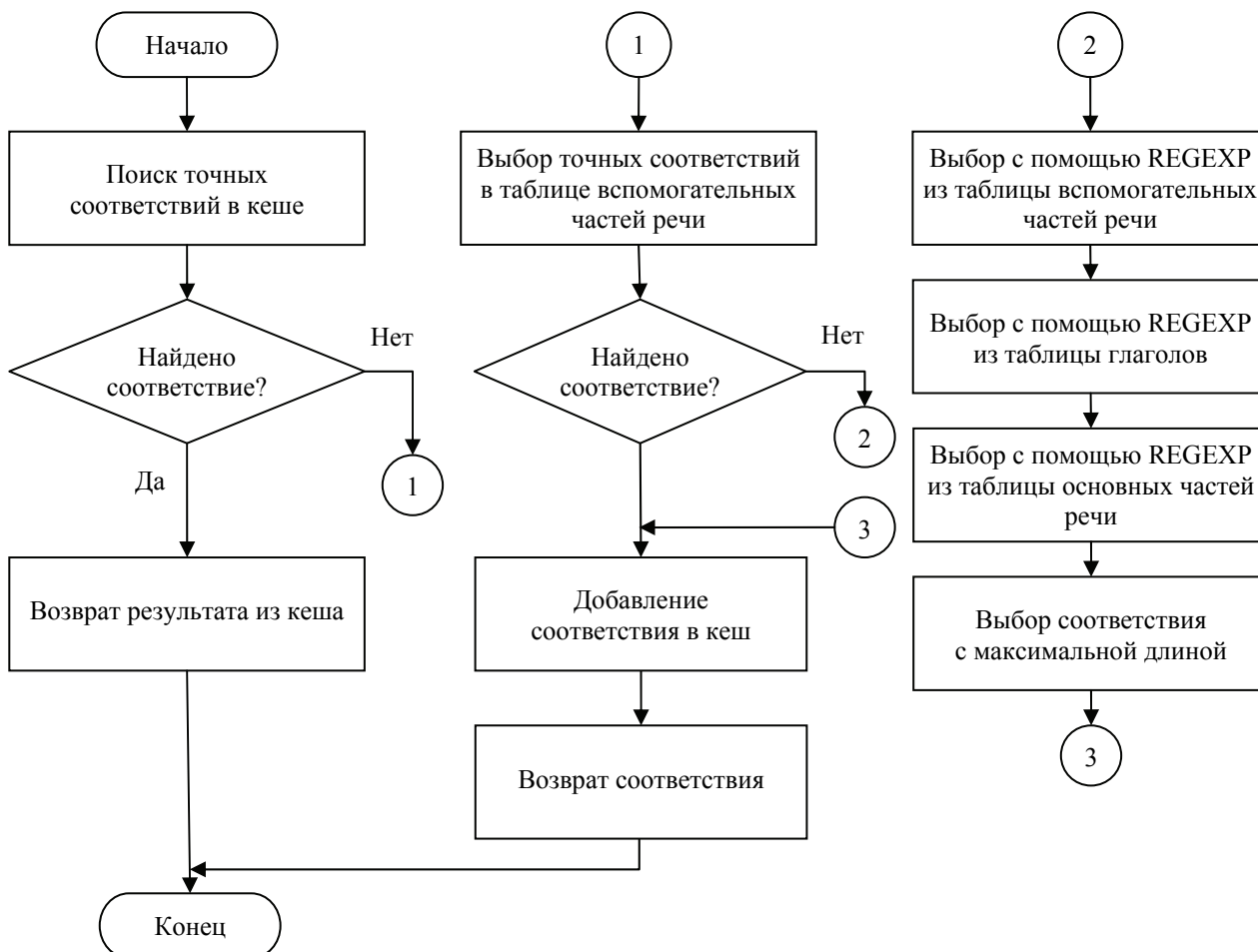


Рис. 3. Блок-схема алгоритма определения части речи слова при помощи регулярных выражений

В ходе апробации реализованной на языке Python функции морфологического анализа текста было обнаружено улучшение качества определения части речи слов технического текста по сравнению с предыдущей версией анализатора [4]: ряд слов в именительном и родительном падежах множественного числа были распознаны как существительные, хотя ранее по ошибке распознавались как наречия.

Заключение. Задача определения части речи является наиболее значимой среди задач морфологического анализа на этапе анализа текста для на-

полнения базы знаний. На этапах записи извлеченных знаний в семантическую сеть и синтеза предложений на основе извлеченных знаний возникают и другие задачи морфологического анализа, такие как определение формы слова, а также приведение слова в заданную форму. Разработанная функция морфологического анализа текста используется в составе генератора семантической сети для распознавания начала причастных и деепричастных оборотов, а также для автоматизации создания шаблонов предложений, выражающих различные типы семантических связей.

Литература

1. Лингвистический энциклопедический словарь / гл. ред. В. Н. Ярцева. М.: Сов. энциклопедия, 1990. 685 с.
2. Сегментация текста в проекте «Открытый корпус» / В. В. Бочаров [и др.] // Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии: материалы Междунар. конф., Бекасово, 30 мая – 3 июня 2012 г. В 2 т. Т. 1: Основная программа конференции / РГГУ. М., 2012. С. 51–60.
3. Большаков И. А., Большакова Е. И. Автоматический морфоклассификатор русских именных групп // Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии: материалы Междунар. конф., Бекасово, 30 мая – 3 июня 2012 г. В 2 т. Т. 1: Основная программа конференции / РГГУ. М., 2012. С. 81–92.
4. Гурин Н. И., Жук Я. А. Генератор семантической сети информационной системы в таблицу реляционной базы данных // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 181–185.

References

1. *Lingvisticheskiy entsiklopedicheskiy slovar'* [Linguistic encyclopedic dictionary]. Moscow, Sovetskaya entsiklopediya Publ., 1990. 685 p.
2. Bocharov V. V., Alekseeva S. V., Granovskiy D. V., Ostapuk N. A., Stepanova M. E., Surikov A. V. [Text segmentation in “OpenCorpora”]. *Materialy mezhdunarodnoy konferentsii (Komp'yuternaya lingvistika i intellektual'nyye tekhnologii)* [Materials of the International Conference (Computer linguistics and artificial intelligence)]. Bekasovo, 2012, pp. 51–60 (In Russian).
3. Bol'shakov I. A., Bol'shakova E. I. [Automated morphoclassifier of russian nominal groups]. *Materialy mezhdunarodnoy konferentsii (Komp'yuternaya lingvistika i intellektual'nyye tekhnologii)* [Materials of the International Conference (Computer linguistics and artificial intelligence)]. Bekasovo, 2012, pp. 81–92 (In Russian).
4. Gurin N. I., Zhuk Ya. A. The information system semantic network generator to a relational database table generator. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 181–185 (In Russian).

Информация об авторах

Гурин Николай Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: ngourine@mail.ru

Жук Ярослав Александрович – аспирант. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: zhuk@belstu.by

Information about the authors

Gurin Nikolay Ivanovich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: ngourine@mail.ru

Zhuk Yaroslav Aleksandrovich – PhD student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: zhuk@belstu.by

Поступила 03.03.2016

УДК 003.26+347.78

Н. П. Шутько

Белорусский государственный технологический университет

**АЛГОРИТМЫ РЕАЛИЗАЦИИ МЕТОДОВ ТЕКСТОВОЙ СТЕГАНОГРАФИИ
НА ОСНОВЕ МОДИФИКАЦИИ ПРОСТРАНСТВЕННО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ
И ЦВЕТОВЫХ ПАРАМЕТРОВ ТЕКСТА**

Рассмотрены алгоритмические особенности реализации методов текстовой стеганографии для скрытой передачи данных и охраны прав интеллектуальной собственности. Методы основаны на модификации пространственно-геометрических (апрош, кернинг) и цветовых параметров символов текста. Скрытие данных производится не только в обычных, но и в специальных (мягкий перенос, разрыв строки и др.) символах и пробелах. Особенностью метода на основе модификации цвета является то, что процессы осаждения/извлечения информации осуществляются при сравнительном изменении/анализе цветовых параметров пар соседних символов, один из которых является базовым. Информация осаждается в соседний с базовым символ текста. Формальное описание преобразований осуществляется на основе математической модели двухключевой стеганографической системы: один ключ определяет метод осаждения, другие – иные преобразования осаждаемой информации и выбор элементов текста для их модификации. Методы и алгоритмы на основе модификации кернинга и апроша предусматривают изменение значения соответственно кернинга любых заданных дополнительным ключом кернинговых пар и апрошей в документе-контейнере. Методы характеризуются более высокой эффективностью в сравнении с другими методами текстовой стеганографии.

Ключевые слова: текстовая стеганография, алгоритм, математическая модель, параметры шрифта, авторское право.

N. P. Shut'ko

Belarusian State Technological University

**THE ALGORITHMS OF REALIZATION OF TEXT STEGANOGRAPHY
METHODS BASED ON THE MODIFICATION OF THE GEOMETRIC
AND COLOR TEXT PARAMETERS**

We consider the algorithmic features of implementation the text steganography methods to secure communication and protection of intellectual property rights. The methods are based on the modification of the space-geometrical (aprosh, kerning) and color settings of the text symbols. Hiding the data is done not only in the usual but also in special (hyphens, line break, etc.) characters and spaces. The peculiarity of the method on the basis of the color modification is that the precipitation/extraction information processes are carried out in a comparative change/analysis of the color parameters of pairs of adjacent characters, one of which is the basic. Information is deposited into the neighboring to the basic text symbol. A formal description of transformations is made on the basis of the mathematical model of two-key steganography system: one key determines the precipitation method, others – another transformation of the deposited information and a selection of text elements to modify them. Methods and algorithms based on the modification of kerning and aprosh provide changing the value of accordingly kerning of any given additional key kerning pairs and aprosh in the document container. The methods are characterized by higher efficiency in comparison with other methods of text steganography.

Key words: text steganography, mathematical model, algorithm, font parameters, copyright.

Введение. Развитие информационных технологий за последние десять-полтора лет привело к тому, что значительная (и важнейшая) часть информации, относящейся к различным сторонам деятельности предприятий или организаций, теперь находится в электронном виде (в системах хранения данных). Наиболее характерным примером для академической среды являются репозитории электронных образовательных ресурсов. Поэтому особенную остроту приобретает проблема надежной защиты этих

ресурсов, а также иных текстовых документов, программных кодов, баз данных от несанкционированного использования. Существуют различные способы для реализации такой защиты. К ним можно отнести, в частности, методы текстовой стеганографии, которые в последнее время становятся популярными. Информация, которая позволяет защитить права собственности на документ, скрывается (осаждается), наподобие цифровых водяных знаков, в документе (контейнере).

Скрывать такую информацию можно, используя различные элементы текста путем их незаметной модификации: например, междустрочного интервала, или интерлиньяжа (Line-Shift Coding), пробельного расстояния между словами (Word-Shift Coding). Особенности упомянутых методов проанализированы, например, в [1]. Их эффективность низка из-за сравнительно небольшой относительной части упомянутых элементов текста к общему числу его элементов.

Мы разработали ряд стеганографических методов, в основе которых лежит использование других пространственно-геометрических параметров элементов текста [2, 3]. Как известно, указанные параметры напрямую определяются шрифтом, на основе которого создан документ. Таких параметров достаточно много, что вызвано неоднородностью размеров шрифтовых знаков, сложившейся в результате его исторического развития. К числу основных относятся гарнитура, кегль, начертание и размеры очка (расстояние между верхней частью букв «Т» или «f» и нижней частью букв «р» или «g»). Кегль – это основа, все остальные пропорции шрифта напрямую зависят от него. Важнейший параметр шрифта – ширина символов. Здесь неоднородность максимальна (сравним, например, ширину символов «Щ» и «l»). Кроме ширины символов, строка текста формируется также, как было отмечено в характеристике метода Word-Shift Coding, пробельным материалом. Однако у пробельного материала есть родственные элементы и в пространстве литер, на так называемой кегельной площадке. Это апроши – пространство, намеренно оставленное с левой и правой сторон очка (отпечатываемого, видимого контура буквы), чтобы соседние буквы не налезали друг на друга, чтобы между ними всегда было расстояние.

И, наконец, последний пространственно-геометрический параметр – кернинг, свойственный так называемым кернинговым парам. Примерами кернинговых пар могут быть: ГА, ТА, АТА, БТ и т. п. (в текстах на основе кириллицы); АУ, Аv, Т; ff (на основе латиницы); ОА, ΔО, λж (на основе греческого алфавита).

Компьютерная графика «снабдила» видимые символы текста еще одним существенным параметром – цветом, который также может быть использован для осаждения тайной информации в текст по аналогии с известным методом графической стеганографии – LSB (Least Significant Bit – наименее значащий бит).

Далее рассмотрим алгоритмические особенности реализации методов, в которых осаждение информации производится путем модификации цвета символов, апроша и кернинга.

Элементы и описание стеганографической системы. Отметим несколько базовых понятий. Документ, который мы хотим защитить, называется *контейнером*, или файлом-контейнером *С*. Документ (текст), с помощью которого осуществляется защита путем его размещения (осаждения) в контейнере, или же который размещается для передачи, носит название *стегосообщения М*. Защищенный документ (контейнер с осажденным сообщением) называется *стегоконтейнером S*.

В математической модели стеганографической системы пространство ключей (наподобие криптосистемы) образуют базовые методы осаждения/извлечения тайной информации (модификация цвета, апроша, кернинга или иные – основной ключ) и дополнительные преобразования, определяемые дополнительными ключами [4]. В соответствии с этим стеганографическую систему мы классифицируем как «двуключевую».

Формально модель задается следующим выражением:

$$\Sigma_2 = (M, C, K, K^A, S, F, F^{-1}). \quad (1)$$

Параметрами в соответствии с приведенным соотношением являются: множество стегосообщений (*M*), множество контейнеров (*C*), множество ключей (*K*) и дополнительных ключей (*K^A*), множество стегоконтейнеров (*S*), прямое (*F*) и обратное преобразования (*F⁻¹*). Прямое преобразование соответствует осаждению секретного сообщения в контейнер, обратное, в свою очередь, – извлечению.

Алгоритмы прямого стеганографического преобразования. Цвет пикселей, формирующих символы текста, пространственно-геометрические параметры текста можно изменить так, что это остается незаметным для других лиц в силу специфики человеческого зрения. Это, так сказать, психофизиологическая особенность методов.

Мы исходим из того, что между алгоритмами прямого преобразования (осаждение тайного сообщения в контейнер) и обратного преобразования (извлечение сообщения из контейнера) существует однозначное соответствие в виде функций $F \in F$ и $F^{-1} \in F^{-1}$. С учетом этого дальнейшее рассмотрение ограничим алгоритмами прямого преобразования.

Модификация цветовых параметров. В данном случае анализируемый метод определяется ключом *K*, $K \in K$. Формально рассматриваем текстовый документ-контейнер как графический объект. В этом и других методах в качестве базового элемента контейнера, свойства которого модифицируются при осаждении

информации, выступает символ текста, включая пробел.

Используется цветовая модель **RGB**, в которой каждый цветовой канал задается 8-разрядным двоичным вектором либо соответствующим десятичным числом:

$$R, G, B \in \{0, 1\} \text{ либо } R, G, B \in \{0, 1, \dots, 255\}.$$

Во втором случае часто говорят об интенсивности трех составляющих цвета.

Если текст-контейнер состоит из Z символов, то формально каждый из них может быть представлен как

$$z_t = \{r_t, g_t, b_t\} \in RGB, 1 \leq t \leq Z,$$

где t – порядковый номер символа в текстовом документе-контейнере.

Оригинальность метода состоит в том, что процессы осаждения/извлечения информации осуществляются при сравнительном изменении/анализе цветовых параметров пар соседних символов:

$$\{r_t, g_t, b_t\} \text{ и } \{r_{t+1}, g_{t+1}, b_{t+1}\}.$$

При этом цветовые координаты $\{r_t, g_t, b_t\}$ являются базой (центроидой) для осаждения/извлечения определенного знака («0» или «1») сообщения M . Изменение параметра соседнего символа оценивается по отношению к этому базовому.

Таким образом, если объем встраиваемого сообщения M_i равен n (пример: $M_i = \langle \text{Надя} \rangle$, $n = 4$) символов с пробелами исходного алфавита, анализ следует производить при преобразовании M_i в двоичную форму (поскольку цветовую модель мы рассматриваем на основе бинарных чисел): используем кодировку ASCII, в которой один символ представлен 8 битами ($Q = 8$), т. е. общая длина осаждаемого сообщения в бинарном виде N' составляет: $N' = Q \times n$ бит. Кроме того, необходимо иметь в виду количество необходимых символов N в контейнере C_j , которые потребуются для встраивания стегосообщения: легко понять, что Z должно быть не меньше $N = Q \times n \times 2$.

Выбор пар символов для осаждения информации определяется одним из дополнительных ключей: $K_1^A \in K^A$. При этом $K_1^A = \{k_{11}^A, k_{10}^A\}$ и ключи $k_{11}^A = \{r_1, g_1, b_1\}$, $k_{10}^A = \{r_0, g_0, b_0\}$ используются соответственно при осаждении бинарных символов «1» и «0» (в z_{t+1} -й символ текста-контейнера):

$$z_{t+1} = z_t + k_{11}^A = \{r_t + r_1, g_t + g_1, b_t + b_1\}, \quad (2)$$

$$z_{t+1} = z_t + k_{10}^A = \{r_t + r_0, g_t + g_0, b_t + b_0\} \quad (3)$$

и $t = 1, \dots, Z$, $Z \geq N$ – необходимое условие для успешного встраивания секретного сообщения в документ-контейнер, $z_t = \{r_t, g_t, b_t\} \in \{R, G, B\}$.

В процессе осаждения берутся в соответствии с K_1^A два рядом стоящих символа текстового документа-контейнера: первый – базовый, второй – тот, в котором будет скрыт текст. Цвет символа, в котором будет производиться осаждение, формируется исходя из цвета символа-образца и заданного в настройках текстового процессора (через специальное программное приложение) смещения. По умолчанию это смещение добавляется к основному цвету. Если при этом значение выходит за допустимый диапазон – отрицается. Например, если цвет образца задан как $\{0, 200, 100\}$, а смещение задано как $\{100, 60, 50\}$, то результирующей будет цветовая координата $\{100, 140, 150\}$. Чтобы избежать ситуации, когда значение может выйти за оба диапазона, в полях для отклонения не рекомендуется задавать значения больше 128. В настройках указанного программного средства будет задаваться отклонение от основного цвета символа по трем цветовым каналам в соответствии с (2) и (3).

Например, возьмем в качестве контейнера C_j словосочетание «Текстовая стеганография» и разместим в нем секретное сообщение «Н» (M_i), используя описанный выше метод (рис. 1). Символы, выделенные полужирным начертанием, являются базовыми (центроидами), в подчеркнутые (входящие в пару) символы встраивается секретная информация: каждый разряд («0» или «1») встраивается в каждый подчеркнутый символ текста документа-контейнера. При этом для встраивания «1» используется ключ k_{11}^A , для «0», соответственно, – k_{10}^A .

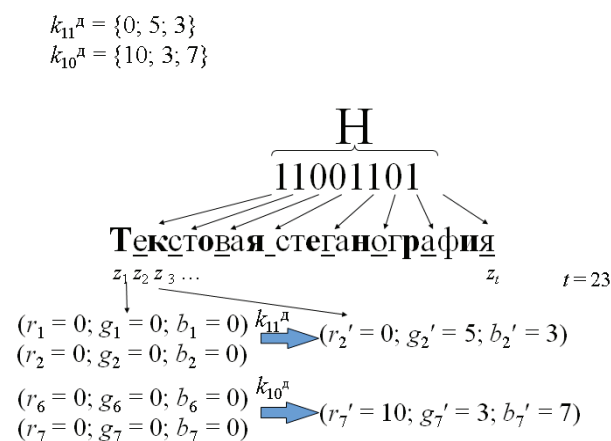


Рис. 1. Пояснение к методу модификации цветовых параметров

Алгоритм реализации метода модификации цвета символов представлен на рис. 2. Из алгоритма видно, что вначале идут параллельно три процесса. Это выбор текстового документа-контейнера, выбор секретного сообщения и выбор ключа.

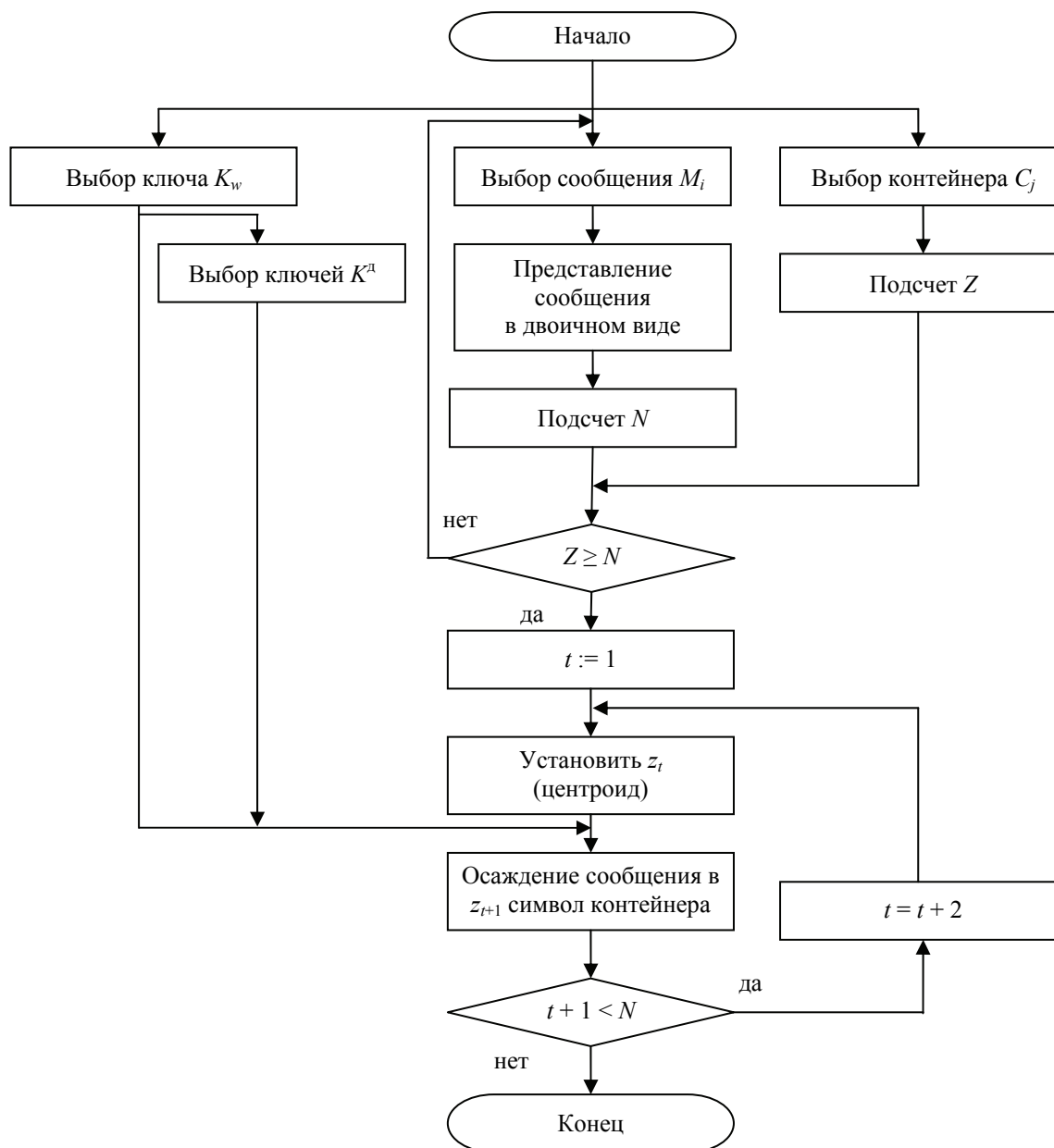


Рис. 2. Алгоритм метода изменения цвета символа

После того, как выбрано стегосообщение, оно переводится в двоичный вид. Далее производится вычисление N .

Например, необходимо встроить стегосообщение «Надя» (M_i) в текстовый документ-контейнер. Для этого:

- подсчитывается количество символов n в сообщении (если есть, то с пробелами); в нашем случае $n = 4$;

- M_i преобразуется в двоичный вид (используем кодировку ASCII):

1100110111100001110010011111111;

один символ в выбранной кодировке представлен 8 знаками ($Q = 8$);

- подсчитывается $N = Q \times n \times 2$; коэффициент 2 учитывает тот факт, что используется не один символ для осаждения информации, а два;

в нашем случае $N = 64$, т. е. для встраивания секретного сообщения необходимо, чтобы текстовый документ-контейнер содержал как минимум 64 символа;

- в текстовом документе, который необходимо защитить (C_j), подсчитывается общее количество символов с пробелами Z и проверяется необходимое условие ($Z \geq N$). Далее устанавливается символ-образец.

Модификация апроша и кернинга. Сущность разработанных методов заключается в том, что незначительное изменение величины апроша и кернинга (в соответствии с ключом из множества K) относительно базового значения (доли пункта) не вызывает визуального восприятия уплотнения или разрежения групп символов.

Алгоритмы реализации рассматриваемых методов в большинстве своем схожи с методом изменения цветных параметров. Однако имеются в каждом случае свои особенности.

Так, метод изменения кернинга можно реализовать двумя способами.

1. Осаждение информации производится за счет изменения значения кернинга любого символа в документе-контейнере.

2. Первоначально проводится анализ документа-контейнера на наличие в нем кернинговых пар. Существует таблица кернинговых пар для каждого семейства шрифтов. В ней приводятся те самые особые пары символов. Предпо-

лагается осаждать информацию за счет изменения значения кернинга именно между такими парами символов.

Поэтому разработанный алгоритм реализован по двум схемам. На рис. 3 приведена схема алгоритма для второго варианта реализации метода. Необходимо отметить, что в методах изменения апроша и кернинга производится подсчет только N' ($N' = Q \times n$) ввиду того, что осаждать информацию, используя дополнительный ключ K^2 , можно в каждый символ документа-контейнера:

$$z_t = z_t + k_1^2. \quad (4)$$

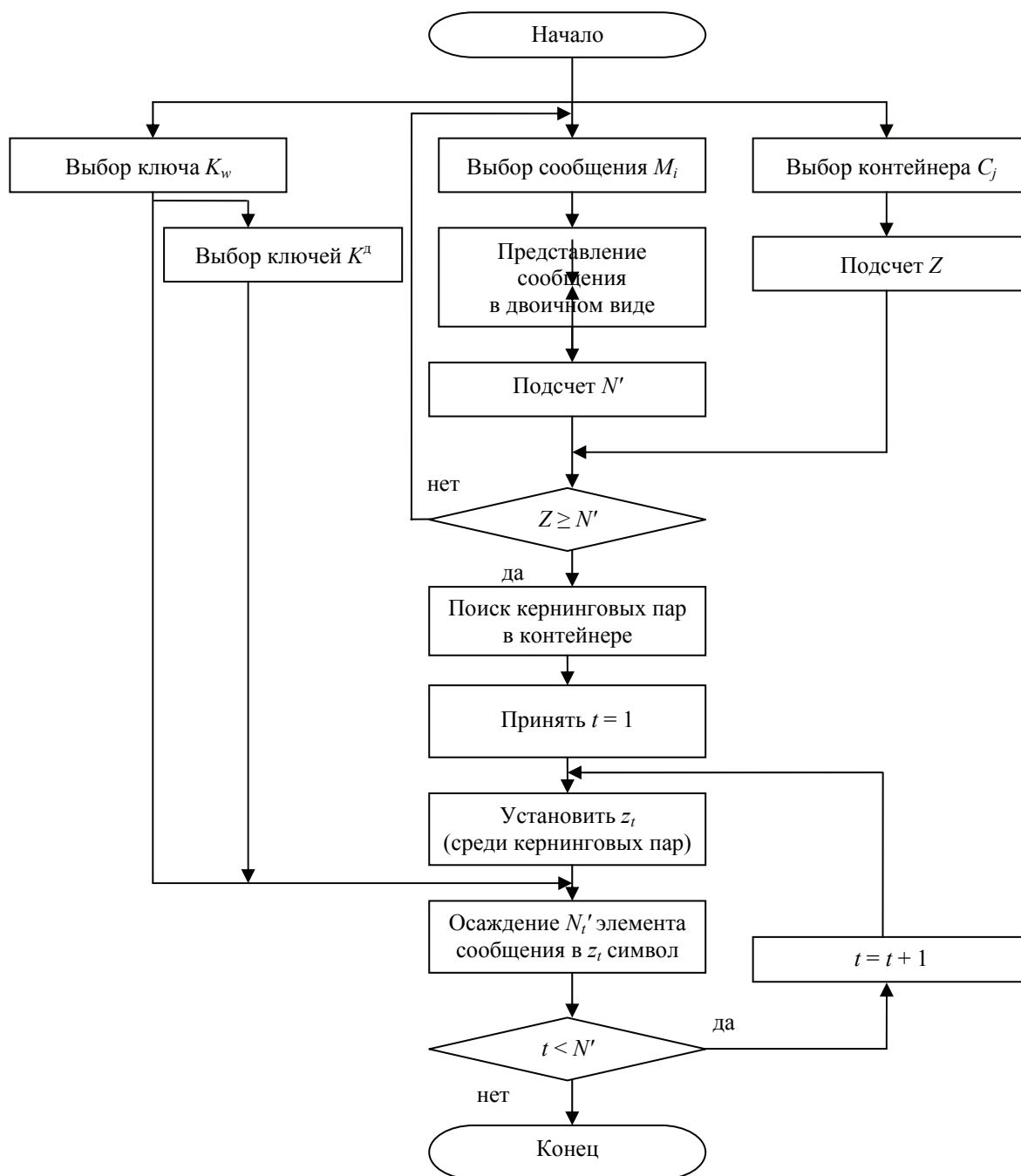


Рис. 3. Алгоритм метода изменения кернинга

Заключение. Разработанные и проанализированные на примерах алгоритмы реализации стеганографических методов на основе изменения пространственно-временных и цветовых параметров символов текста являются по уровню сложности сопоставимыми с алгоритмами методов модификации междустрочного интервала (Line-Shift Coding) и пробельного расстояния между словами (Word-Shift Coding), если принять, что в последних может

применяться псевдослучайный выбор модифицируемых элементов.

Вместе с тем предлагаемые методы характеризуются большей эффективностью, поскольку число символов и их кернинговых пар в текстах всегда значительно превышает число строк или число слов. Необходимо также отметить, что стегознаками в методах изменения цвета символов, апроша и кернинга являются все символы документа, в том числе специальные знаки и символы.

Литература

1. 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 International Conference, Zakopane, Poland, June 18–21, 2013. Zakopane, 2013. P. 147.*
2. Шутько Н. П. Защита авторских прав на электронные текстовые документы методами стеганографии // *Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 131–134.*
3. Shutko N. Text steganography method based on the change of font attributes // *Printing future days: 6-th International Scientific Conference on Printing and Media Technology, Chemnitz, Germany, October 5–7, 2015. Chemnitz, 2015. P. 91.*
4. Шутько Н. П., Романенко Д. М., Урбанович П. П. Математическая модель системы текстовой стеганографии на основе модификации пространственных и цветовых параметров символов текста // *Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 152–156.*

References

1. 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 International Conference. Zakopane, 2013, p. 147.*
2. Shut'ko N. P. Copyright protection on the electronic text documents by methods of steganography. *Trudy BGTU [Proceedings of BSTU], 2013, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 131–134 (In Russian).*
3. Shutko N. Text steganography method based on the change of font attributes. *Printing future days: 6-th International Scientific Conference on Printing and Media Technology. Chemnitz, 2015, p. 91.*
4. Shut'ko N. P., Romanenko D. M., Urbanovich P. P. Mathematical model of the text steganography on the base of modifying the spatial and color settings of text characters. *Trudy BGTU [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 152–156 (In Russian).*

Информация об авторе

Шутько Надежда Павловна – аспирант. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: NPCh@belstu.by

Information about the author

Shut'ko Nadezhda Pavlovna – PhD student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: NPCh@belstu.by

Поступила 07.03.2016

УДК 003.26

Е. А. Блинова

Белорусский государственный технологический университет

**СТЕГАНОГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОД НА ОСНОВЕ ИЗМЕНЕНИЯ
МЕЖДУСТРОЧНОГО РАССТОЯНИЯ НЕОТОБРАЖАЕМЫХ СИМВОЛОВ СТРОК
ЭЛЕКТРОННОГО ТЕКСТОВОГО ДОКУМЕНТА**

Описывается модификация известного метода текстовой стеганографии, основанного на изменении междустрочного расстояния электронного документа (line-shift coding). С его помощью предлагается скрывать тайное сообщение в изменении высоты междустрочных интервалов. Сущность модификации метода состоит в том, чтобы использовать в качестве контейнера электронный документ и изменять междустрочное расстояние не всей строки или абзаца, а только неотображаемых символов (пробелов, знаков абзаца, табуляций и т. д.). Анализ абзаца средствами редактора электронных документов не показывает наличия смещения строк. Изменение начертания и/или размера шрифта не выявляет присутствия скрытого сообщения. Приводятся примеры отображения текстов с измененным междустрочным расстоянием для неотображаемых символов, анализируется скрытность встраиваемого сообщения. Метод может быть применен в различных версиях редакторов электронных документов Microsoft Word и Adobe InDesign. Оценка пропускной способности метода основывается на вероятностных характеристиках текстовых контейнеров для русского и английского языка. Существует возможность увеличения скрытности для внесения стеганографических меток. Предлагаются варианты использования стеганографического метода в электронных документах для внесения цифровых водяных знаков с целью защиты от несанкционированного копирования и распространения.

Ключевые слова: стеганография, электронный документ, изменение междустрочного расстояния.

E. A. Blinova

Belarusian State Technological University

**STEGANOGRAPHIC METHOD BASED ON THE LINE-SHIFT CODING METHOD
ON NON-DISPLAYED SYMBOLS OF THE ELECTRONIC TEXT DOCUMENT**

The modification of a known method of text steganography based on the change line spacing of an electronic document (line-shift coding), which proposes to hide a secret message into a change of the height of the interline spacing is given. The modification of the method is to use an electronic document as a container and change the interline spacing not of the entire line or paragraph, but only of non-displayed characters (spaces, paragraph marks, tabs, etc.) An analysis by regular means does not show the presence of the line-shift coding. Changing the font size does not reveal the presence of a hidden message. Some examples of texts with modified interline spacing for non-displayed symbols were given, the secrecy of the embedded message is analyzed. The method can be applied in various versions of Microsoft Word and Adobe InDesign. The estimation capacity of the method is based on the probability characteristics of text containers for Russian and English. Some variations to increase secrecy for steganographic labels are given. The method can be used in electronic documents for embedding the digital watermarks to protect unauthorized copying and distribution.

Key words: steganography, electronic document, line-shift coding.

Введение. Стеганография – наука о способах передачи скрытого сообщения (стегосообщения) в открытой среде или о хранении скрытого сообщения в открыто хранящемся объекте, при котором не возникает подозрений о наличии скрытого сообщения.

Секретное сообщение при помощи стеганографического метода встраивается в не привлекающий внимания объект, который направляется адресату или размещается в общедоступной области [1]. Получатель сообщения, зная стеганографический ключ, расшифровывает

сообщение. Следует отметить, что стеганографический ключ не шифрует данные, а скрывает место и порядок их встраивания. В литературе часто предполагается, что скрытое сообщение может быть предварительно зашифровано криптографическими методами для дополнительной защиты данных.

Для скрытия информации используются различные виды контейнеров (или файлов-контейнеров – в электронной стеганографии): текстовые документы, файлы HTML, изображения, звуковые и видеофайлы. Для

файлов-контейнеров разработано большое количество разнообразных методов, как общих, так и основанных на специфических свойствах контейнера [1, 2].

Основными направлениями применения стеганографических методов являются скрытая передача данных по открытому каналу, скрытое хранение данных в открытых данных, внесение одинаковых стеганографических меток во все копии документа (Watermaking), внесение различных стеганографических меток в каждую копию электронного документа (Digital Fingerprint).

Математическая модель стеганографической системы может быть представлена в виде соотношения:

$$S = Emb(C, M, K), \quad (1)$$

$$M = Ext(S, K), \quad (2)$$

где S , M – множество скрытых сообщений; $Emb()$ и $Ext()$ – функции встраивания скрытого сообщения в файл-контейнер и извлечения из файла-контейнера соответственно; C – множество всех контейнеров; K – множество стеганографических ключей.

В связи с широким распространением электронных документов формата Microsoft Office часто используются в качестве файлов-контейнеров. Для них применяются методы, которые используют наравне с классическими методами текстовой стеганографии и методы, свойственные контейнеру, такие как особое форматирование и смещение текста, размещение диакритических знаков, наличие истории редактирования и прочей служебной информации, что позволяет добиться увеличения скрытности и пропускной способности. Среди используемых классических методов текстовой стеганографии – метод изменения междустрочного расстояния, или line-shift coding, в применении к электронным текстовым документам. Методы произвольного интервала текстовой стеганографии основаны на манипулировании свободным местом в тексте, таких как высота междустрочного интервала, наличие дополнительных пробелов и различные виды смещений [1, 2].

Основная часть. Метод изменения междустрочного расстояния, или line-shift coding, успешно применялся с целью маркирования технической документации для предотвращения недобросовестного использования со стороны допущенных к ней специалистов [3, 4]. В его стандартной реализации предлагается скрывать стеганографическое сообщение в изменении высоты междустрочных интервалов. Для каждой копии документа выбирался свой набор

междустрочных интервалов, что позволяло выявить источник несанкционированных копий. Пример текстового документа с различными междустрочными интервалами приведен на рис. 1 (строки с измененным междустрочным интервалом отмечены метками).

An information-theoretic model for steganography v adversary is proposed. The adversary's task of distir an innocent cover message C and a modified messag hidden information is interpreted as a hypothesis test. The security of a steganographic system is quantifie relative entropy (or discrimination) between the dist which yields bounds on the detection capability of a shown that secure steganographic schemes exist in ti the covertext distribution satisfies certain conditions. A universal stegosystem is presented in this model ti knowledge of the covertext distribution, except that independently repeated experiments.]

Рис. 1. Фрагмент документа с различными междустрочными интервалами

Однако такой метод имеет несколько существенных недостатков: он обладает малой пропускной способностью и может быть выявлен как для электронного документа путем изменения параметров размера и начертания шрифта (рис. 2), так и для его напечатанной копии, которая может быть обработана как изображение (отсканирована и проанализирована на различные высоты междустрочных интервалов).

In this paper, a new steganographic method is proposed is disguised to be the product of a collaborative docume the stegodocument is made to appear to be the work of r facilitate communication of the authors during the colla authoring process, the word processor records the exact and embeds the ways of revision as change tracking info document. From such change tracking information, we c changes made by a prior author, and can recover a prior

Рис. 2. Документ с различными междустрочными интервалами после изменения размера шрифта

Предлагается следующая модификация стеганографического метода изменения междустрочного расстояния электронного документа – производить смещение не всей строки, а только неотображаемых символов (пробелов, табуляций, знаков переноса строки, неразрывных пробелов, абзацев и т. д.).

В качестве редактора электронных текстовых документов использовался Microsoft Word 2010, однако изменение высоты строки как для полной строки, так и для отдельных символов существует и в других редакторах. В Microsoft Word 2010 такое смещение выполняется при помощи команд *Шрифт/Интервал/Смещение*.

На рис. 3 изображен текст со смещением некоторых символов – пробелов и знаков абзаца.

In this paper, a new steganographic embedding is disguised to be the pro authoring effort. That is, the stego work of multiple authors. To facilitate communication of the a document authoring process, the wor modifications by an author and embe

Рис. 3. Текст со смещенными неотображаемыми символами

Визуально незаметное смещение может производиться в диапазоне ± 2 пункта, что позволяет встроить 5 бит скрытого сообщения на один неотображаемый символ. Однако находящиеся последовательно смещения на +2 пункта и -2 пункта могут быть заметны.

Поэтому предлагается вносить скрываемую информацию не в каждый неотображаемый символ, а через один (рис. 4). Это дает 5 бит скрытого сообщения на два неотображаемых символа. Можно ограничиться смещением в ± 1 пункт, что дает 6 бит скрытого сообщения на два неотображаемых символа.

Уровень развития современных технологий позволяет компаниям создавать сложные корпоративные инфраструктуры, объединяющие в себе множество подсистем. Зачастую архитектура сети настолько сложна, что обеспечить ее полную защиту становится непосильной задачей даже для крупных корпораций, выделяющих солидный бюджет на защиту своих ресурсов. Проведение анализа защищенности позволяет заблаговременно выявить наиболее уязвимые компоненты системы и устранить недостатки в обеспечении защиты.

Тестирование на проникновение представляет собой один

Рис. 4. Текст с последовательно смещенными на две позиции неотображаемыми символами

Отметим, что изменение начертания и размера шрифта не влияет на отображение электронного текста (рис. 5).

Можно предложить некоторые возможные модификации метода. Изменения смещения могут производиться по заранее согласованной маске, например, только по четным абзацам, только по каждой третьей строке, исключая первый и последний абзацы и т. д. Разумеется, пропускная способность будет уменьшена, но для небольших по объему скрытых меток это безразлично.

Уровень развития современных технологий позволяет создавать сложные корпоративные инфраструктуры, объединяющие подсистемы. Зачастую архитектура сети настолько сложна, что полную защиту становится непосильной задачей даже для крупных корпораций, выделяющих солидный бюджет на защиту своих ресурсов. Проведение анализа защищенности позволяет заблаговременно выявить наиболее уязвимые компоненты системы и устранить недостатки в обеспечении защиты.

Тестирование на проникновение представляет собой один из методов проведения анализа защищенности информационных систем. В рамках тестирования проводится анализ уязвимостей системы.

Рис. 5. Документ с измененными междустрочными интервалами неотображаемых символов после изменения размера шрифта

Также отметим, что стандартными средствами редактора различные высоты смещения символов текста не определяются в отличие от других свойств формата (размера, начертания и пр.).

Оценка пропускной способности данного стеганографического метода может быть основана на вероятностных характеристиках появления в текстах неотображаемых символов (пробелов, табуляций, знаков абзаца и пр.). На частоту встречаемости неотображаемых символов были проанализированы 100 русско- и англоязычных научных и художественных текстов. Для русского языка частота появления пробела в текстах составляет 0,163, для английского языка – 0,179. Частота встречаемости для других неотображаемых символов зависит от размера и особенностей файла-контейнера. Таким образом, пропускная способность предлагаемого метода намного выше пропускной способности классических методов текстовой стеганографии, оценка которых дана в [1].

При переносе текста между различными редакторами электронных текстовых документов смещение неотображаемых символов переносится только в некоторых редакторах электронных документов. Было протестировано внедрение скрытой информации в некоторые, наиболее часто применяющиеся, редакторы электронных документов: Microsoft Word (версии от 2000 до 2010), Adobe InDesign версии CS5 и ранее, Corel версии X6 и ранее. Установлено, что при переносе в Microsoft Word и Adobe InDesign наличие скрытой информации остается в тексте-контейнере, при вставке в Corel смещение не переносится, таким образом, скрытое сообщение теряется (рис. 6).

При переносе в Adobe Acrobat изменение междустрочного интервала неотображаемых символов, к сожалению, невозможно из-за особенностей экспорта в формат .pdf.

An information-theoretic model for steganography is proposed. The adversary's task of distinguishing message C and a modified message S can be formulated as a hypothesis testing problem. ¶

The security of a steganographic system is related to the entropy (or discrimination) between the distributions. Bounds on the detection capability of any steganographic scheme exist in this model that satisfies certain conditions. ¶

Рис. 6. Документ с различными междустрочными интервалами при вставке в Adobe InDesign

Заключение. Рассмотренная модификация стеганографического метода изменения междустрочного интервала неотображаемых символов может быть применена для внесения цифрового водяного знака в электронные документы с целью защиты авторского права на интеллектуальную собственность и подтверждения целостности документа. Также метод может быть использован для размещения различных скрытых стеганографических меток в каждую копию электронного документа, например, в файлы верстки электронных книг и журналов для выяснения канала несанкционированного копирования и распространения.

Литература

1. Грибунин В. Г. Цифровая стеганография. М.: Солон-Пресс, 2002. 272 с.
2. Shutko N., Blinova E. The use of aprosh and kerning in text steganography // *New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation: 9-th Conf., Zakopane, Poland, June 23–26, 2015.* Zakopane, 2015. P. 77.
3. Electronic marking and identification techniques to discourage document copying / J. Brassil [et al.] // *IEEE Journal on Selected Areas in Communications.* 1995. Vol. 13, no. 8. P. 1495–1504.
4. Document Marking and Identification using Both Line and Word Shifting / S. H. Low [et al.]. Boston: Infocom, 1995. 8 p.

References

1. Gribunin V. G. *Tsifrovaya steganografiya* [Digital Steganography]. Moscow, Solon-Press Publ., 2002. 272 p.
2. Shutko N., Blinova E. The use of aprosh and kerning in text steganography. *New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation: 9-th Conf. Zakopane, 2015*, p. 77.
3. Brassil J., Low S. H., Maxemchuk N. F., O’Gorman L. Electronic marking and identification techniques to discourage document copying. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, 1995, vol. 13, no. 8, pp. 1495–1504.
4. Low S. H., Maxemchuk N. F., Brassil J. T., O’Gorman L. Document Marking and Identification using Both Line and Word Shifting. Boston, Infocom, 1995. 8 p.

Информация об авторе

Блинова Евгения Александровна – аспирант. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: evgenia.blinova@belstu.by

Information about the author

Blinova Evgeniya Aleksandrovna – PhD student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: evgenia.blinova@belstu.by

Поступила 11.03.2016

УДК 519.86

Н. Н. Буснюк¹, В. А. Новиков²¹Белорусский государственный технологический университет²Белорусский государственный аграрный технический университет**МЕТОД ОПТИМАЛЬНОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ
О НАЗНАЧЕНИЯХ В СЕТЕВОМ ПЛАНИРОВАНИИ**

В связи с интенсивным развитием логистических методов оптимизации перед логистами встали новые проблемы, не описываемые классической задачей сетевого планирования. Классические математические методики не позволяют алгоритмизировать процесс модификации сетевого графа, например, из условия оптимизации логистических цепочек по критерию трудовых ресурсов. На практике особую ценность представляет формирование сетевого плана, основанного на выборе из возможных альтернативных вариантов самого оптимального. В качестве исходных данных в таких задачах задается матрица времен выполнения каждой работы каждым рабочим. Данная задача представляет собой комбинацию задачи о назначении и задачи сетевого планирования. В общем случае можно сделать предположение о возможности выполнения двух и более работ одним рабочим. Решение этой задачи на математическом уровне позволяет автоматически осуществлять контроль параллельных цепочек и выполнять минимизацию сетевого графика по критерию трудовых ресурсов. В статье предложен метод решения задачи оптимального назначения в сетевом планировании с использованием введенной дополнительно матрицы параллелизма. Применение этой матрицы дает возможность проводить оптимизацию сетевого графика с ограничением на количество работ, выполняемых одним рабочим.

Ключевые слова: задача о назначениях, сетевой график, критический путь, логистическая цепочка, дуга графа, вершина графа, матрица параллелизма, параллельная цепочка.

N. N. Busnyuk¹, V. A. Novikov²¹Belarusian State Technological University²Belarusian State Agrarian Technical University**OPTIMAL SOLUTION METHOD
OF ASSIGNMENT PROBLEM IN NETWORK PLANNING**

In connection with the intensive development of logistics optimization techniques the logistics specialists face new problems that are not described by the classical task of network planning. Classic mathematical techniques don't allow the algorithmization of the modification process of the network graph, for example, from the optimization condition of logistic chains on criterion of the manpower. In practice, the formation of a network plan based on the selection of the best possible alternatives is of special value. As the source data in such tasks the performance time matrix of each work done by each worker is set. This is a combination of task assignments and task network planning. Generally it is possible to make the assumption about the ability to run two or more works by one worker. The solution to this problem on a mathematical level allows you to automatically control parallel conversations and carry out the network chart according to the criterion of minimizing manpower. The optimal solution method of task assignments in network planning used the special matrix of parallelism is received in this article. Use of this matrix gives the possibility to optimize the network chart with the restriction on the amount of work performed by one working.

Key words: task assignments, network chart, critical path, supply chain, arc graph, a vertex of a graph, matrix parallelism, parallel chain.

Введение. Сетевое планирование является одной из основных задач работы менеджера. Эта задача сейчас особенно актуальна в связи с интенсивным развитием логистических методов оптимизации. В логистике такая задача более понятна как задача оптимизации логистических цепочек. От правильно спланированного сетевого графика рабочих процессов во многом зависит эффективность функционирования предприятия. Большую помощь в организации

сетевого планирования оказывают пакеты прикладных программ, например, MS Project [1]. В этих пакетах реализован, в частности, удобный ввод сетевого плана и удобное отображение информации, включая диаграмму Ганта.

В связи с развитием логистических методов перед логистами встали новые проблемы, не описываемые классической задачей сетевого планирования [2]. В классической задаче задаются фиксированные времена выполнения

работ и могут задаваться минимальное и максимальное возможные продолжительности работ. На основе этих данных строятся оптимистический и пессимистический сетевые планы работ. При этом классические математические методики не позволяют алгоритмизировать процесс модификации сетевого графа, например, из условия оптимизации логистических цепочек по критерию трудовых ресурсов.

Основная часть. На практике особую ценность представляет формирование сетевого плана, основанного на выборе из возможных альтернативных вариантов самого оптимального. В качестве исходных данных в таких задачах задается матрица времен выполнения каждой работы каждым рабочим. Данная задача представляет собой комбинацию задачи о назначении и задачи сетевого планирования. В общем случае можно сделать предположение о возможности выполнения двух и более работ одним рабочим. Решение этой задачи на математическом уровне позволяет автоматически осуществлять контроль параллельных цепочек и выполнять минимизацию сетевого графика по критерию трудовых ресурсов. Последняя операция в настоящее время реализуется вручную на основе визуального анализа диаграммы Ганта.

Сформулируем задачу в общем виде. Допустим, что сетевой график содержит n работ, и задана соответствующая квадратная матрица назначений A . Для нахождения оптимального назначения в сетевом графике воспользуемся матрицей X идентичной размерности с A . Значение $x_{ij} = 1$, если i -й рабочий выполняет j -ю работу. В противном случае $x_{ij} = 0$.

Целевой функцией данной задачи является критический путь сетевого графика. Оптимизация осуществляется по всем полным путям сетевого графа d_i . Величина $K = \max(d_i)$ и будет являться критическим путем.

В классической задаче о назначениях одна работа может выполняться только одним рабочим:

$$\sum_i x_{ij} = 1. \quad (1)$$

В соответствии с (1) длительность работы c_i всегда определяется равенством:

$$c_j = \sum_i a_{ij} x_{ij}. \quad (2)$$

Для построения оптимального плана необходимо решить задачу на поиск минимума для K с ограничениями (1) и (3):

$$\sum_j x_{ij} = 1. \quad (3)$$

Эта задача легко решается средствами Excel.

Ограничение (3) является самым простым вариантом задачи и допускает выполнение рабочим только одной работы.

Классическая задача о назначениях не допускает одному рабочему выполнять несколько работ. В то же время сетевой график это позволяет. Более того, может оказаться, что при меньшем числе задействованных рабочих искомый критический путь окажется меньше.

В такой задаче необходимо учесть возможности выполнения нескольких работ одним рабочим. Для этого введем ключевую в предлагаемом методе матрицу M параллелизма. Каждая i -я строка этой матрицы представляет анализируемую работу, а каждый j -й столбец – связанную с i работу. Если i -я работа не может выполняться одновременно с j -й работой, то $m_{ij} = 0$. В противном случае $m_{ij} = 1$. Диагональ m_{ii} всегда равна 1. Построение матрицы параллелизма M возможно по сформированным временам позднего и раннего начала и завершения работ, что будет рассмотрено ниже.

На основе матрицы M сформируем матрицу N такой же размерности:

$$n_{ki} = \sum_j m_{kj} x_{ij}. \quad (4)$$

Решение задачи с учетом N отличается только в замене условия (3) на условие

$$n_{ki} \leq 1. \quad (5)$$

Модифицированная задача также несложно решается средствами Excel. Полученный оптимальный план минимизирует только длину критического пути. В то же время при использовании матрицы параллелизма необходима дополнительная оптимизация по путям, не являющимся критическими. Эту дополнительную оптимизацию можно выполнить, обеспечивая минимум по $\sum_j c_j$ с дополнительным ограничением $K \leq K_{\text{опт}}$, где $K_{\text{опт}}$ – значение, полученное при оптимизации критического пути.

Для решения задачи в полном объеме необходимо реализовать алгоритм вычисления критического пути с одновременным нахождением раннего и позднего начала и окончания работы. На основе полученных по алгоритму: РК – раннего окончания, ПК – позднего окончания, РН – раннего начала и ПН – позднего начала, – матрица M параллелизма может быть рассчитана автоматически по следующему алгоритму (в алгоритме дополнительно введены векторы КПН и КРК той же размерности, что и M):

1. КПН = 0, КРК = 0, $m_{ij} = 1, \forall i, j$.
2. Фиксируем работу $i = 1$.
3. Если $ПК_i \leq РН_j$, то $m_{ij} = 0, \forall j \neq i$.

4. Если $PH_i \geq PK_j$, то $m_{ij} = 0$, $\forall j \neq i$.

5. Если $KPH_j \neq 1$, $KPK_i \neq 1$ и $RK_j \leq PH_i$, то $m_{ij} = 0$, $\forall j \neq i$, $KPH_i = 1$, $KPK_j = 1$.

6. Если $KPH_i \neq 1$, $KPK_j \neq 1$ и $RK_i \leq PH_j$, то $m_{ij} = 0$, $\forall j \neq i$, $KPH_j = 1$, $KPK_i = 1$.

7. $i = i + 1$, переход к п. 3.

Предлагаемая методика использования матрицы параллелизма дает возможность оптимизации сетевого графика по числу параллельных цепочек, так как это число в матрице определяется числом единиц в каждой строке матрицы. Для уменьшения числа параллельных цепочек следует только перенести одну из ветвей графа

с единицей в матрице M на критический путь. Выбор необходимой ветви графа может быть выполнен, например, перебором всех возможных вариантов с выбором самого оптимального. Такая задача не может быть решена только средствами Excel, так как требует двойного цикла оптимизации.

Заключение. Предлагаемая методика оптимизации логистических цепочек основана на ключевой матрице параллелизма, которая позволяет полностью формализовать процесс оптимизации любой сложности, включая и модификацию графа с позиций минимизации трудовых ресурсов. В любом случае базовой задачей является изложенная подробно задача оптимального назначения в сетевом графике.

Литература

1. Кудрявцев Е. М. Project 2003. Сетевое планирование и управление проектами. М.: ДМК Пресс, 2006. 236 с.
2. Новицкий Н. И. Сетевое планирование и управление производством. М.: Новое знание, 2004. 220 с.

References

1. Kudryavtsev E. M. *Project 2003. Setevoye planirovaniye i upravleniye proektami* [Project 2003. Network Planning and Project Management]. Moscow, DMK Press Publ., 2006. 236 p.
2. Novitskiy N. I. *Setevoye planirovaniye i upravleniye proizvodstvom* [Network Planning and Production Management]. Moscow, Novoye Znaniye, 2004. 220 p.

Информация об авторах

Буснюк Николай Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: busnnn@belstu.by

Новиков Василий Алексеевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры экономической информатики. Белорусский государственный аграрный технический университет (220023, г. Минск, пр-т Независимости, 99/1, Республика Беларусь). E-mail: vanovikov@tut.by

Information about the authors

Busnyuk Nikolay Nikolaevich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Information Systems and Technology. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: busnnn@belstu.by

Novikov Vasilij Alekseevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Economic Informatics. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1, Nezavisimosti Ave., 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vanovikov@tut.by

Поступила 10.03.2016

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И ОБУЧАЮЩИЕ СИСТЕМЫ

УДК 004.021

В. Л. Колесников, А. И. Бракович

Белорусский государственный технологический университет

МЕНТАЛЬНОЕ КАРТРИРОВАНИЕ И UML-ОПИСАНИЕ ВИРТУАЛЬНОГО ПРОИЗВОДСТВЕННОГО КОМПЛЕКСА

В настоящее время разработка имитационных моделей сложных систем, равно как и других программных средств, требует применения средств автоматизированного проектирования для уменьшения числа ошибок в логике приложения. В связи с модернизацией виртуального производственного комплекса по переработке волокнистых отходов было предложено описывать разрабатываемое программное средство в виде диаграмм UML.

Основной целью разрабатываемой имитационной модели является генерация базы данных для интеллектуального анализа. В базу данных при активном состоянии виртуального комплекса с заданным временным интервалом заносятся значения выходных показателей и текущих параметров. Значения параметров могут изменяться пользователем или путем решения компромиссных оптимизационных задач для обеспечения требуемых значений показателей.

Для воссоздания реальных условий работы комплекса требуется смоделировать колебания погоды, ветрового режима, курсов валют, ценовой ситуации на рынке продукции, сырья, материалов, требований возмещения ущерба за загрязнение окружающей среды. Возможности виртуального производственного комплекса по поиску оптимального технологического режима и имитации колебаний параметров позволяют рассматривать сам виртуальный производственный комплекс как активное действующее лицо в ходе его использования.

Разработанное UML-описание виртуального производственного комплекса дает возможность освоить UML-моделирование реальных производственных процессов.

Ключевые слова: ментальное картирование, имитационное моделирование, программное средство, UML-диаграммы.

V. L. Kolesnikov, A. I. Brakovich

Belarusian State Technological University

MENTAL MAPPING AND UML-DESCRIPTION OF VIRTUAL INDUSTRIAL ENTERPRISE

Currently, the development of simulation models of complex systems, as well as other software, requires the use of computer-aided design tools to reduce the number of errors in the application logic. In connection with the modernization of the virtual enterprise of fibrous waste disposal it was offered to describe developed software tool in the form of UML diagrams.

The main purpose of the developed simulation model is to generate databases for predictive analysis. The database with the active state of the virtual enterprise with a predetermined time interval of recorded output values and current parameters. Parameter's values can be changed by the user or by solving compromise optimization problems to provide the required performance values.

To re-create the real conditions of the enterprise it is required to simulate the fluctuations of weather, wind conditions, exchange rates, the price situation on the products market, raw materials, claims for damages for polluting the environment. Features of virtual production enterprise for finding the optimal process parameters and simulation mode oscillations allow us to consider it as an active actor in the course of its use.

Developed UML-description of the virtual industrial enterprise allows to learn the UML real simulation of production processes.

Key words: mental mapping, simulation, software tool, UML-diagrams.

Введение. Построение имитационной системной модели производственного комплекса заключается в описании его структуры и про-

цессов функционирования. В описании имитационной модели выделены две составляющие: статическое описание системы, которое

является описанием ее структуры, и динамическое описание взаимодействий ее элементов [1].

Идея метода с точки зрения его программной реализации состоит в том, что элементам системы ставятся в соответствие некоторые программные компоненты, а состояния этих элементов описываются с помощью переменных состояний. Элементы, по определению, взаимодействуют (или обмениваются информацией), поэтому реализован моделирующий алгоритм функционирования отдельных элементов. Кроме того, элементы существуют во времени, поэтому разработан алгоритм изменения переменных состояний. Динамика в имитационных моделях реализована с помощью механизма продвижения модельного времени.

В основу системной математической модели производственного комплекса утилизации волокнистых отходов положен мультипликативный принцип расчета многокомпонентных материальных балансов технологической системы через любые заданные промежутки времени, например, через отрезок времени, равный времени выработки одной тонны продукции. На рис. 1 в качестве примера показан трехэлементный фрагмент информационно-поточкового мультиграфа.

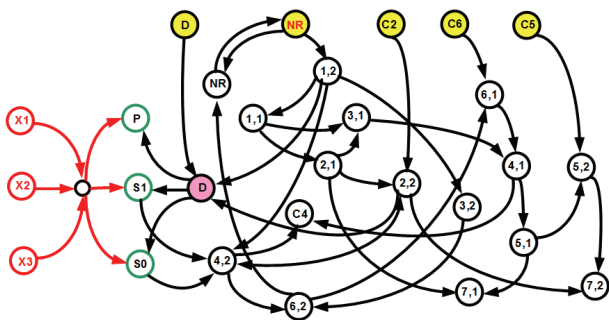


Рис. 1. Информационно-поточковый мультиграф трехэлементной системы

Связь состава потоков с режимными параметрами осуществляет комплекс полиномиальных моделей, описывающих зависимость степени удержания каждого компонента потока в структуре листового материала при формовании от управляющих воздействий. Зависимость свойств готовой продукции от состава материальных потоков описывает второй комплекс полиномиальных моделей.

Таким образом, в одной системной математической модели объединены расходные и режимные управляющие параметры с качеством готовой продукции, экономикой и экологией в условиях псевродинамики.

Основная часть. В [2] описывается разработанное авторами интерактивное программное

средство, имитирующее все основные условия функционирования реального предприятия, структура которого показана на рис. 2.

Устройство и работу этого комплекса обычным таблично-текстовым способом описать практически невозможно. Схема комплекса включает 18 стадий (технологических операторов), 45 материальных потоков, каждый из которых состоит из 8 компонентов, связи между элементами комплекса (дуги информационно-поточкового мультиграфа) описаны 476 математическими выражениями. Условия и результаты работы производственного комплекса определяют значения 57 переменных.

В линейной записи информации о том, что представляет собой производственный комплекс, обычно используются текст с заголовками, списками, таблицами и схемами. Записанное трудно запомнить и еще труднее восстановить в памяти. Время при такой записи расходуется очень неэффективно.

Вместо линейной записи целесообразно использовать радиальную. Это значит, что главная тема, на которой будет сфокусировано наше внимание, располагается в центре листа. Иными словами, действительно в фокусе внимания.

Ключевые слова помещаются на ветвях, расходящихся от центральной темы. Связи (ветки) должны быть скорее ассоциативными, чем иерархическими. Ассоциации, которые, как известно, очень способствуют запоминанию, могут подкрепляться символическими рисунками.

На рис. 3 представлена ментальная карта, дающая представление о размерности проблемы, связанной с организацией использования виртуального производственного комплекса в учебном процессе. Следует обратить внимание на то, что каналы связи имеют двустороннюю направленность, поэтому спонтанное или осмысленное изменение информации, происходящее в любом разделе карты, нуждается в осмыслении и принятии оперативных управленческих решений для поддержания работы комплекса в оптимальном режиме.

В настоящее время разработка имитационных моделей сложных систем, равно как и других программных средств, требует применения средств автоматизированного проектирования для уменьшения числа ошибок в логике приложения. В связи с модернизацией виртуального производственного комплекса по переработке волокнистых отходов было предложено описывать разрабатываемое программное средство в виде диаграмм UML.

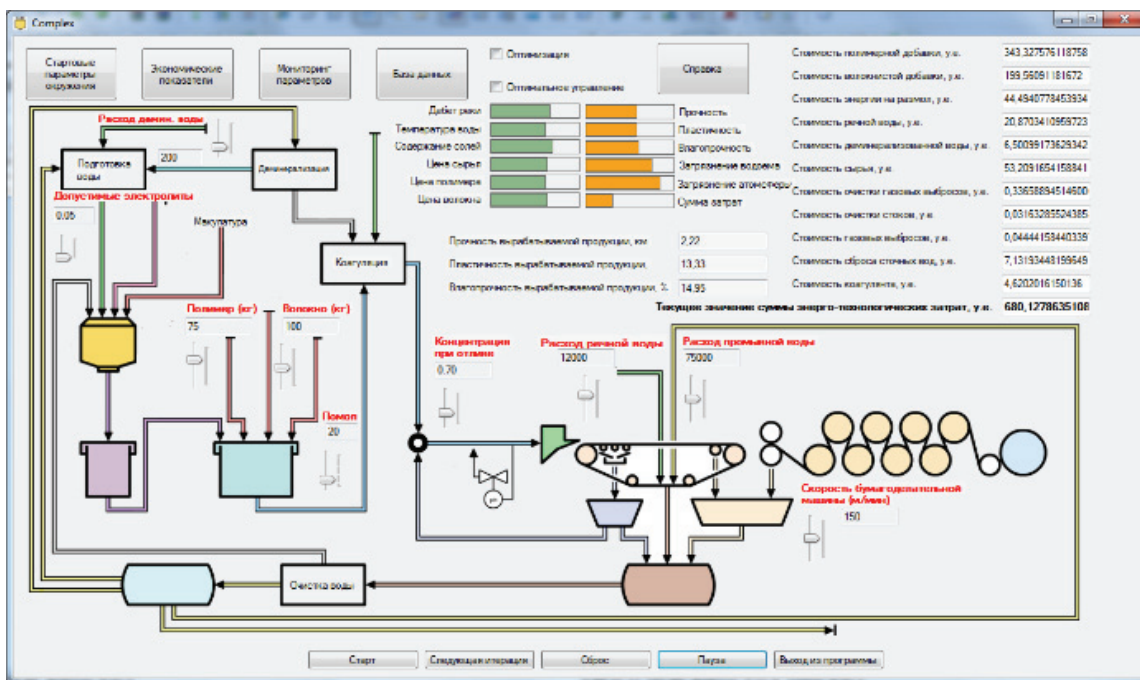


Рис. 2. Интерфейс разработанного программного средства



Рис. 3. Ментальная карта структуры и функционирования виртуального производственного комплекса

Основной целью разрабатываемой имитационной модели является генерация базы данных для интеллектуального анализа. В базу данных при активном состоянии виртуального комплекса с заданным временным интервалом заносятся значения выходных показателей и текущих параметров. Значения параметров могут изменяться пользователем или путем решения компромиссных оптимизационных задач для обеспечения требуемых значений показателей.

Стоит отметить, что для воссоздания реальных условий работы комплекса требуется смоделировать колебания погоды, ветрового режима, курсов валют, ценовой ситуации на рынке продукции, сырья, материалов, требований

возмещения ущерба за загрязнение окружающей среды. Возможности виртуального производственного комплекса по поиску оптимального технологического режима и имитации колебаний параметров позволяют рассматривать сам виртуальный производственный комплекс как активное действующее лицо в ходе его использования.

Учитывая вышесказанное, были созданы диаграммы вариантов использования, представленные на рис. 4 и 5.

Для реализации описанных возможностей виртуального производственного комплекса было решено создать ряд классов, описанных диаграммой классов, показанной на рис. 6.



Рис. 4. Вариант диаграммы использования виртуального производственного комплекса для создания базы данных



Рис. 5. Вариант диаграммы использования виртуального производственного комплекса для нахождения оптимальных технологических режимов методом случайного поиска

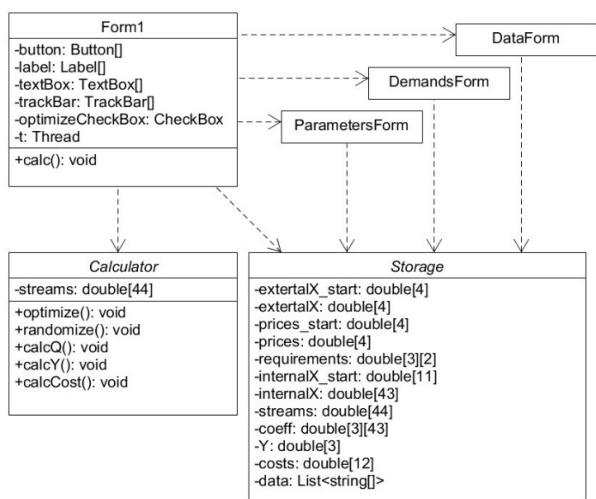


Рис. 6. Диаграмма классов виртуального производственного комплекса

Класс главной формы Form1 содержит элементы управления (кнопки Button, надписи Label, текстовые поля TextBox, регуляторы TrackBar) для вызова вспомогательных форм, ввода значений параметров и наблюдения за изменением параметров и показателей. Для симуляции работы виртуального производственного комплекса в классе главной формы содержится поток Thread.

Для структурирования программного кода было создано два вспомогательных абстрактных класса. Первый из них (Storage) является хранилищем значений входных, внутренних и выходных переменных. При вводе пользова-

телем данных на вспомогательных формах ввода параметров окружения (ParametersForm) и требований к показателям (DemandsForm) производится занесение введенных данных в массивы externalX_start, prices_start и requirements класса Storage. Также при изменении значений технологических параметров на главной форме выполняется внесение их значений в массив internalX_start класса Storage. Получаемые в ходе симуляции данные сохраняются в списке массивов строк data для последующего отображения на вспомогательной форме DataForm при помощи элемента управления DataGridView и сохранения в формате CSV.

Второй вспомогательный класс Calculator содержит функции для выполнения случайного локального поиска optimize, внесения случайной погрешности в значения параметров randomize, расчета внутренних потоков комплекса calcQ, значений показателей calcY и суммы затрат calcCost. Данные функции вызываются при запуске симуляции в функции calc главной формы, которая запускается в отдельном потоке. Функция optimize вызывается только в том случае, если на главной форме отмечен флажок optimizeCheckBox. Функция randomize вносит отклонения в значения параметров относительно начальных значений externalX_start, prices_start и internalX_start и записывает полученные значения в массивы external, prices и internalX соответственно. Важно отметить, что массив технологических потоков streams дублируется в классе Calculator, так как согласно технологическому процессу, значения технологических потоков на текущем шаге влияют на значения технологических потоков на следующем шаге.

Приведенный порядок выполнения функций описан диаграммой последовательности, представленной на рис. 7.

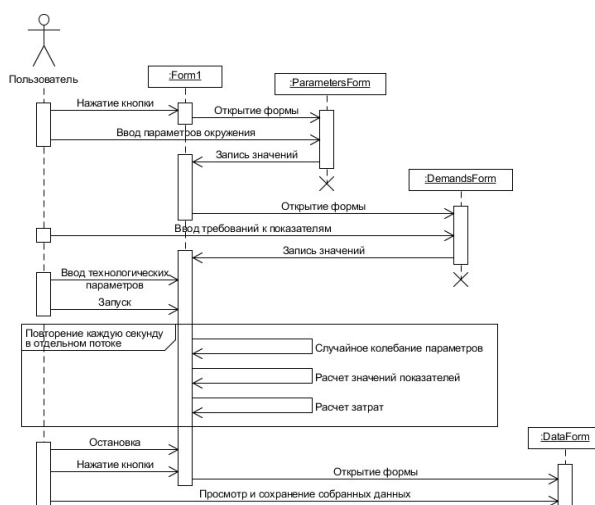


Рис. 7. Диаграмма последовательности выполнения действий в виртуальном производственном комплексе

Заключение. Применение массивов для хранения данных позволяет использовать такой эффективный прием программирования, как расчет значений полиномов при помощи циклов, которые содержат прибавление к значению полинома произведения значения пара-

метра или псевдофактора на соответствующий коэффициент, а разработанное UML-описание виртуального производственного комплекса дает возможность освоить UML-моделирование реальных производственных процессов.

Литература

1. Колесников В. Л., Урбанович П. П., Жарский И. М. Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем. Минск: БГТУ, 2004. 532 с.
2. Kolesnikov V., Urbanovich P., Brakovich A. Modeling and software implementation of fibrous waste disposal processes // *New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation – NEET' 2015: proc. of the 9-th Intern. conf. Lublin, 2015.* P. 37.

References

1. Kolesnikov V. L., Urbanovich P. P., Zharskiy I. M. *Komp'yuternoye modelirovaniye i optimizatsiya khimiko-tekhnologicheskikh sistem* [Computer simulation and optimization of chemical processes]. Minsk, BGTU Publ., 2004. 532 p.
2. Kolesnikov V., Urbanovich P., Brakovich A. Modeling and software implementation of fibrous waste disposal processes. *New Electrical and Electronic Technologies and their Industrial Implementation – NEET' 2015: proc. of the 9-th Intern. conf. Lublin, 2015,* p. 37.

Информация об авторах

Колесников Виталий Леонидович – доктор технических наук, профессор, профессор кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: vitalykolesnikov@mail.ru

Бракович Андрей Игоревич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: brakovich@yandex.ru

Information about the authors

Kolesnikov Vitaliy Leonidovich – DSc (Engineering), Professor, Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vitalykolesnikov@mail.ru

Brakovich Andrey Igorevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: brakovich@yandex.ru.

Поступила 07.03.2016

УДК 004.853

Н. И. Гурин, Т. А. Крылова

Белорусский государственный технологический университет

**ИНТЕРНЕТ-ПРИЛОЖЕНИЕ НА ПЛАТФОРМЕ NODE
ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ БИРЖИ ПЕРЕВОЗОК**

Статья посвящена анализу и апробации преимуществ платформы Node, базирующейся на событийно-ориентированной модели взаимодействия приложения с сервером с выводом языка JavaScript за пределы браузера. На базе платформы Node разработано он-лайн интернет-приложение для электронной биржи перевозок. Показано, что для приложений, в которых необходимо одновременно обрабатывать тысячи запросов сервера, скорость обработки при использовании событийно-ориентированной технологии платформы Node.js с одним потоком примерно в 2 раза выше, чем в многопоточной модели, на основе которой работает сервер Apache Web Server. Разработанное интернет-приложение продемонстрировало высокую эффективность работы в условиях проведения реальных торгов в сети с использованием мобильных устройств при заключении сделок на электронной бирже перевозок.

Ключевые слова: интернет-приложение, платформа Node, язык JavaScript, электронная биржа.

N. I. Gurin, T. A. Krylova

Belarusian State Technological University

**INTERNET APPLICATION ON PLATFORM NODE
FOR ELECTRONIC EXCHANGE OF TRAFFIC**

The article is devoted to the analysis and testing of benefits of platform Node based on the event-oriented model of interaction with the server application with the output of JavaScript outside of the browser. On-line Internet application for electronic exchange of traffic was developed on the platform based Node. It is shown that for applications that need to handle thousands of requests of the server processing speed when using the event-oriented technology platform for Node.js with one thread about two times higher than in a multithreaded model on which the server runs Apache Web Server. The developed Internet application showed a high efficiency of operation conditions of the real trading online using mobile devices when entering into transactions on an electronic exchange traffic.

Key words: online application, platform Node, JavaScript, electronic exchange.

Введение. Доступность устройств и средств связи открывает большие возможности для бизнеса, в частности, для организации электронной биржи, в которой все заявки на торги поступают по электронным системам связи и тут же находят отображение в торговой системе в автоматическом режиме. При этом для электронной биржи критичным является момент завершения торгов, когда необходимо одновременно обрабатывать сотни и тысячи запросов. В обычно используемой серверами многопоточной модели, на основе которой работает, например, популярный сервер Apache Web Server, это может привести к перегрузке памяти сервера и его остановке.

В данной работе используется событийно-ориентированная модель, которая имеет только один поток и построена на зацикливании очереди событий, что значительно меньше нагружает память сервера. Для разработки интернет-приложения он-лайн биржи перевозок выбрана платформа Node.js, основанная на событийно-ориентированной технологии обработки запросов сервера.

Основная часть. Node.js или Node является программной платформой для разработки веб-приложений, серверов приложений, произвольных сетевых серверов и клиентов [1–3]. Платформа позволяет обеспечить высокую масштабируемость проектов за счет сочетания асинхронного ввода/вывода, использования JavaScript на стороне сервера и событийно-ориентированной архитектуры. При возникновении некоторого события оно помещается в конец очереди. Поток исполнения, обрабатывающий этот цикл, выполняет код, связанный со следующим событием, и, в свою очередь, помещает его в конец. Это происходит до тех пор, пока очередь не опустеет. Библиотека ввода/вывода обладает достаточной общностью для реализации любого протокола на базе TCP или UDP: DNS, HTTP, IRC, FTP и др. и поддерживает разработку серверов и клиентов произвольного протокола.

В основе Node лежит автономная виртуальная машина JavaScript с расширениями, делающими ее пригодной для программирования общего назначения с упором на разработку

серверов приложений. В основе реализации приложения лежит цикл обработки событий неблокирующего ввода/вывода и библиотеки файлового и сетевого ввода/вывода. Платформа Node выводит язык JavaScript за пределы браузера и использует его в серверных приложениях, что в сочетании с асинхронным вводом/выводом делает ее эффективной платформой для разработки приложений. Возможности платформы предоставляют механизм работы с сокетами TCP и UDP, поиск в системе DNS, средства доступа к файловой системе, средства для создания серверов и клиентов протоколов HTTP и HTTPS, построенные на основе библиотеки TCP-сокетов.

Node.js позволяет использовать сокеты. Концепция веб-сокетов (WebSockets) дает переосмысление привычного взаимодействия в веб-мире. Браузер и сервер превращаются в равноправных участников взаимодействия (в противовес прежней клиент-серверной модели) и, соответственно, могут принимать и посылать сообщения при возникновении необходимости. Веб-сокеты же позволяют приложению сервера всегда иметь информацию обо всех подключениях и взаимодействовать с любым количеством открытых соединений.

В целом платформа Node.js ориентирована на создание высокопроизводительных, хорошо масштабируемых клиентских и серверных приложений реального времени, обрабатывающих большие объемы данных и выполняемых на распределенных устройствах. Данные характеристики были использованы для разработки приложения «Он-лайн биржа перевозок», рассчитанного на поддержание взаимодействия большого количества одновременно работающих конечных пользователей.

Алгоритм работы электронной биржи перевозок заключается в том, что фирма-организатор размещает заявку на перевозку товара из одного пункта в другой, указывая максимальную цену, которую она готова заплатить исполнителю, и время окончания торгов. Пользователь сайта, в случае если его устраивает данная цена, делает свое предложение, заявляя о готовности выполнить перевозку. Эта ставка сразу же появляется и у других участников, уведомляя их о ходе ведения торгов. При завершении торгов автоматически подводятся итоги – выигрывает пользователь, запросивший минимальную цену. При этом пик одновременных запросов достигается за секунды до завершения торгов, т. е. именно в этот период пользователи активно делают ставки, и обмен данными в режиме реального времени является чрезмерно актуальным.

Для разработки приложения выбрана база данных SQLite, представляющая собой компактную встраиваемую кроссплатформенную реляционную базу данных. Для рассылки сообщений каждому, кто соединен с сервером, используется метод emit объекта платформы Socket.io.

Когда пользователь делает ставку, она отсылается на сервер, где и проставляется время обработки, а затем данное сообщение распространяется среди других участников, имеющих сокетное соединение с сервером (фрагмент программы приведен в листинге на рис. 1).

```
socket.on('sendRate', function (data) {
  db.each("SELECT * FROM transfer WHERE id = " + data.transferId, function(err, row) {
    var allow = true;
    if(parseInt(row.status) == 1) {
      if(parseInt(data.price) <= parseInt(row.start_rate)) {
        var time = getDate();
        if (allow) {
          if(row.rate_id) {
            db.each("SELECT min(price) as price, user_id FROM rate WHERE transfer_id = " + data.transferId + " group by transfer_id order by date desc", function(err, min) {
              if(min.price > data.price) {
                var stmt = db.prepare("INSERT INTO rate(transfer_id, date, price, user_id) VALUES (?, ?, ?, ?)");
                stmt.run(data.transferId, time, data.price, data.userId);
                stmt.finalize();
              }
            });
            io.sockets.sockets.emit('sendRate', {
              company : data.company,
              price : data.price,
              time: time,
              transferId : data.transferId});
          } else {io.sockets.socket(socket.id).emit('error', {
            text : 'Ставка не может превышать ' + row.start_rate + ' рублей.', });}
          } else {io.sockets.socket(socket.id).emit('error', {
            text : 'Перевозка закрыта, ставки не принимаются.';});}
        }
      }
    }
  });
});
```

Рис. 1. Фрагмент программы на прием и обработку ставок

Пользователь сайта, в случае, если его устраивает цена, делает ставку, заявляя о готовности выполнить перевозку. Информация о сумме ставки и id пользователя отправляется на сервер, проходит регистрацию в системе и рассылается другим участникам торгов, которые в свою очередь аналогичным образом могут участвовать в торгах (рис. 2).

Следует обратить внимание на то, что, согласно логике работы биржи, выигрывает минимальная ставка. При наличии ставок на идентичную сумму приоритет получит ставка, сделанная первой, поэтому время ставки является одним из ключевых моментов.

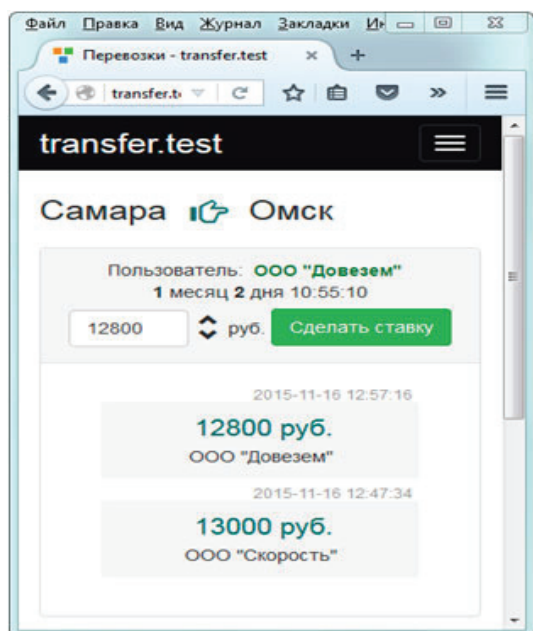


Рис. 2. Интерфейс приложения биржи перевозок

Для объективной оценки производительности многопоточной и событийно-ориентированной моделей произведено нагрузочное тестиро-

вание серверов Apache и Node с применением утилиты ApacheBench. Разработанное приложение для электронной биржи перевозок протестировано на 1000 запросах при одновременной обработке 100 запросов в случае заключения контракта на перевозку. Нагрузочное тестирование для приложения показало, что производительность сервера Node примерно в 2 раза выше, чем при использовании многопоточной модели.

Заключение. Платформа Node позволяет создавать высокопроизводительные клиентские и серверные приложения реального времени, обрабатывающие большие объемы данных и выполняемые на распределенных устройствах. Разработанное на основе Node интернет-приложение для электронной он-лайн биржи перевозок показало в работе высокую эффективность по сравнению с традиционно используемыми многопоточными моделями, что делает ее наиболее перспективной платформой для разработки приложений, рассчитанных на поддержание взаимодействия большого количества одновременно работающих конечных пользователей.

Литература

1. Кателон М., Хартер М., Головайчук Т. Node.js в действии. СПб.: Питер, 2014. 548 с.
2. Young A. R. Node.js in Practice. NY: Manning publications, 2014. 424 p.
3. Herron D. Node Web Development. UK: Packt Publishing, 2013. 225 p.

References

1. Katelon M., Kharter M., Golovaychuk T. *Node.js v deystvii* [Node.js in action]. St. Petersburg, Piter Publ., 2014. 548 p.
2. Young A. R. Node.js in Practice. NY, Manning publications, 2014. 424 p.
3. Herron D. Node Web Development. UK, Packt Publishing, 2013. 225 p.

Информация об авторах

Гурин Николай Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: ngourine@mail.ru

Крылова Татьяна Андреевна – магистрант. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: tttanyatt@mail.by

Information about the authors

Gurin Nikolay Ivanovich – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: ngourine@mail.ru

Krylova Tat'yana Andreevna – Master's degree student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tttanyatt@mail.by

Поступила 07.03.2016

УДК 512.8:681.55

О. В. Герман¹, А. А. Дунаев²¹Белорусский государственный технологический университет²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники**ЗАДАЧА ИЗОМОРФИЗМА ГРАФОВ
В СИСТЕМЕ НЕЧЕТКОГО РАСПОЗНАВАНИЯ**

В работе представлен оригинальный подход к решению задачи определения изоморфизма подграфа графу. Известны квазиполиномиальные алгоритмы установления изоморфизма, однако их нет в случае проверки наличия изоморфизма между подграфом и частью графа. Оригинальность предлагаемого в статье подхода базируется на использовании в качестве инвариантной характеристики графа его максимальных независимых множеств, в частности, определяемых в ходе выполнения процедуры раскраски. Задача заключается в укладке вершин подграфа в построенную систему независимых множеств с предустановленных условий. Очевидно, положительный ответ о возможности укладки предоставляет необходимое, но недостаточное условие изоморфизма. Теоретически можно отыскивать все возможные варианты укладки, однако возможны ситуации, когда число таких вариантов огромное. Поэтому в статье определяется эвристический подход, который строит различные системы независимых множеств, как для исходного графа, так и для его дополнения и транзитивных замыканий. В подавляющем большинстве случаев достаточно использовать дополнительный граф и транзитивное замыкание, получаемое на основе произведения матрицы смежности на нее саму. Практическая апробация подхода свидетельствует о его достаточно высокой эффективности (определение истинного изоморфизма в 80–90% случаев). Подход допускает применение в случае задачи нечеткого изоморфизма. Это значительно расширяет рамки практического использования. Также указывается общий подход к распознаванию образов, искаженных при геометрических преобразованиях типа смещения и поворота.

Ключевые слова: граф, изоморфизм, распознавание образов, нечеткий граф, максимальное независимое множество.

O. V. German¹, A. A. Dunaev²¹Belarusian State Technological University²Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics**GRAPH ISOMORPHISM PROBLEM IN THE FUZZY RECOGNITION SYSTEM**

An original approach to graph isomorphism problem is defined. There are known quasi-polynomial computational time algorithms to establish isomorphism (if exists) between two graphs, however these algorithms are not applicable in the case of isomorphism between a graph and some part of the other graph in general. A specificity of the suggested approach is based on the usage of such invariant graph feature as its maximum independent sets of vertices (clusters) defined as a result of a coloring procedure. The problem comes to allocating the nodes of a subgraph into the given independent sets with regards to predefined restrictions. Obviously, the positive answer to that question represents a necessary but not sufficient condition for isomorphism. Theoretically, one could find all possible variants of the vertex distributions into the clusters, however in some cases the total amount of combinations becomes too great. Hence, the article suggests a heuristic-based approach realized through generating a restricted set of independent sets of vertices for original graph, its complementary graph and a transitional closure(s). In the majority of cases it is sufficient to use a complementary graph and its transitional closure found as a result of multiplication of the contiguity graph matrix by itself. A practical approbation testifies to relatively high efficiency of such an approach (the true isomorphism was revealed in 80–90% of the total amount of graphs). The approach allows to treat fuzzy graph isomorphism problem as well. This significantly expands the boundaries of practical utilization of the proposed approach. Also, the paper considers some issues related to pattern recognition with the distortions caused by geometrical transformations, e.g. by shifting or rotation.

Key words: graph, isomorphism, pattern recognition, fuzzy graph, maximum-size independent set.

Введение. Очевидный практический интерес представляет задача распознавания нечетких, фрагментарных и искаженных объектов (например, лиц на размытых фотографиях, или

идентификация по фрагментам изображений). Для решения этой задачи применяют различные подходы, например, статистические методы на основе использования теоремы Байеса,

нейросетевые модели, технику вейвлет-преобразований, логико-алгебраические методы и т. д. Особое место занимает подход на основе решения задачи об изоморфизме (под)графа графу. Его достоинство усматривается в том, что свойство изоморфизма «инвариантно» относительно растяжений, сжатий, поворотов, смещений графов, а также сохраняет математически неизменную формулировку при распознавании изоморфизма подграфа графу. Кроме того, «не далеко» уходит от основной формулировки задача о нечетком изоморфизме. Основная трудность состоит в том, что задача изоморфизма подграфа графу в общем случае весьма сложна с вычислительной точки зрения, хотя ее NP-полнота не доказана. Согласно результату Ладнера, если $P \neq NP$, то задача об изоморфизме, по видимому, не является ни P-полной, ни NP-полной. Вместе с тем известны два метода, которые, как полагают, являются наилучшими с точки зрения вычислительной сложности. Это метод Люка [1] и метод Бабайя [2, 3]. Последний позиционируется как метод с квазиполиномиальной вычислительной сложностью. При этом заметим, что оба указанных метода предназначены для решения задачи об изоморфизме двух графов, а не об изоморфизме подграфа некоторой части другого графа. Тем более, они не применимы для решения задачи о нечетком изоморфизме. Таким образом, задача, указанная в заголовке этой статьи, все еще достаточно актуальна и требует существенных усилий.

В настоящей статье предлагается подход к решению задачи об изоморфизме (под)графа графу на основе использования множества конструктивно определяемых инвариантных характеристик графа. Сам подход эвристический, т. е. обеспечивает лишь необходимую (но недостаточную в общем случае) часть условий, гарантирующих изоморфизм. Вместе с тем наши условия легко определимы и формализуемы системой логических уравнений. Главное в том, что они допускают сравнительно простое обобщение на «нечеткий вариант задачи об изоморфизме». Сообщается о результатах предварительной апробации, из которых можно полагать общую эффективность предложенного подхода.

Основная часть. Пусть граф-оригинал есть G . Любое изображение, например, буква или подпись может быть заменена графом, узлы которого соответствуют характерным элементам изображения. Так, в случае буквы таковыми являются конечные точки, точки пересечения с линиями сетки, на которую накладывается изображение. В частности, для лица характерными точками являются концевые точки бровей, ноздри, мочки ушей, ямка подбородка и др. Пусть H – подграф, соответствующий части образа.

Спрашивается, изоморфен ли H некоторому подграфу или всему графу G .

Одним из способов задания графа является его матрица смежности M . Это симметричная 0,1-матрица. Можно определить на этой матрице различные максимальные независимые множества (вершин). Каждое такое множество (будем называть их также кластерами) можно раскрасить в один цвет, так что любые две вершины графа либо попадут в одно независимое множество, либо нет (определенно нет, если вершины связаны ребром). Таким образом возникает следующая идея: для данного разбиения вершин графа G на независимые кластеры попытаться «уложить» вершины графа H «по аналогии». Для этого нужно обеспечить выполнение следующих правил:

R1) каждая вершина графа H должна войти в состав одного из кластеров графа G ;

R2) вершины графа H , соединенные ребром, должны входить в разные кластеры;

R3) в формируемый кластер для H может попасть не более числа вершин, равных размеру этого кластера, определенного из G .

Дальнейшее изложение проще провести на примере. Пусть матрица M_G смежности графа G имеет следующий вид:

	1	2	3	4
1	0	1	1	1
2	1	0	0	1
3	1	0	0	1
4	1	1	1	0

Пусть матрица M_H смежности графа H имеет такой вид:

	1	2	3	4
1	0	1	0	1
2	1	0	1	1
3	0	1	0	1
4	1	1	1	0

Определим, являются ли эти графы изоморфными. Вершины M_G можно разбить на следующие кластеры: $\{1\}$, $\{2, 3\}$, $\{4\}$. Соответственно, присвоим этим кластерам цвета: «к», «ж», «с». Теперь сформулируем математическую задачу о возможности «уложить» вершины второго графа по аналогии с учетом правил R1–R3. Введем двоичные переменные: $x_{i,j} = 1$, если вершина i попадает в кластер j ; $x_{i,j} = 0$ в противном случае.

Теперь можно записать систему логических условий для второй матрицы M_H . Очевидно, что каждая вершина второго графа H может соответствовать только тем вершинам графа G , которые имеют степень не ниже степени этой вершины в H . Таким образом, например, вершина 4

графа H может соответствовать любой из вершин 1, 4 графа G . С учетом этого вершины 1 и 3 графа H соответствуют кластеру «ж» графа G . Для остальных составляем систему:

$$\begin{aligned}x_{2,к} + x_{4,к} &= 1, \\x_{2,с} + x_{4,с} &= 1, \\x_{2,к} + x_{2,с} &= 1, \\x_{4,к} + x_{4,с} &= 1.\end{aligned}\quad (1)$$

Эта система дает несколько допустимых решений. Каждое решение легко проверить на предмет, определяет ли оно изоморфизм обоих графов. В самом деле достаточно построить матрицы смежности с учетом полученного в решении соответствия вершин графов G и H . Если полученные матрицы полностью совпадают, то изоморфизм установлен. Так, в нашем случае возьмем, например, решение: $x_{2,к} = 1$, $x_{4,с} = 1$, $x_{1,ж} = 1$, $x_{3,ж} = 1$. Легко убедиться, что оно действительно задает изоморфизм. И, напротив, если ни одно из допустимых решений не устанавливает требуемого для изоморфизма соответствия, то графы не изоморфны. Количество выполняющих интерпретаций для составляемых по указанным правилам систем может быть огромным. Поэтому используем эвристический подход для сужения пространства поиска. Суть его состоит в том, что составляем системы, подобные (1), также для дополнительных графов и транзитивных замыканий. Если получаемые при этом системы выполнимы, то делаем предположительный вывод о существовании изоморфизма между графами (условия выполнимости систем необходимы для изоморфизма, но, очевидно, недостаточны). Для проверки практической эффективности проводится практическая обкатка метода для случайно генерируемых графов, результаты которой сообщаются в заключительной части.

Обратимся теперь к нечетким графам. Базиремся на алгоритме отыскания максимального нечеткого независимого множества, описанного в [4]. Дадим определения.

Ребро графа будем считать нечетким, если определенно неизвестно, входит оно в граф или нет. Ребро считаем четким, если определенно известно, что оно входит в граф. Граф с нечеткими ребрами кодируем матрицей смежности A с элементами $a_{i,j}$, такими, что

$$a_{i,j} = 1, \text{ если ребро } (i,j) \text{ четкое;}$$

$$a_{i,j} = 0,5, \text{ если ребро } (i,j) \text{ нечеткое.}$$

Определение.

А. (Нечетким) независимым множеством нечеткого графа назовем любое множество его

вершин, никакие две из которых не связаны четким ребром (таким образом, допускается связь нечеткими ребрами).

Б. Ядром нечеткого независимого множества Ψ считаем подмножество его вершин $\Psi_c \subseteq \Psi$, никакие две из которых не соединены нечетким ребром.

Определение. Пусть для нечеткого графа определены два независимых множества Ψ_1, Ψ_2 . Говорим, что Ψ_1 максимально предпочтительнее (m -предпочтительнее) Ψ_2 , если размер его ядра больше размера ядра Ψ_2 .

Определение. Нечеткое независимое множество Ψ называется m -максимальным, если оно имеет ядро максимального размера, а при условии равенства размеров ядер содержит наибольшее общее число вершин.

С учетом введенного понятия m -максимального множества будем далее ассоциировать это множество с кластером. Таким образом, мы получаем задачу разбиения множества вершин графа на минимальное число максимальных независимых множеств. Каждое из этих множеств играет роль кластера, а все его вершины окрашиваем в один и тот же цвет. Теперь можно сформулировать идею подхода к задаче нечеткого изоморфизма. Как и в случае с четким изоморфизмом, находим (нечеткие) кластеры, представляющие m -максимальные множества вершин. Составляем систему типа (1) для проверки условия, что вершины второго графа можно разбить в подобные кластеры. Если такое разбиение удастся найти, то заключение об изоморфизме графов получает эмпирическое подтверждение, но требует аналогичных проверок на дополнительных графах и транзитивных замыканиях.

Заключение. Предложенные методы могут непосредственно применяться в различных интеллектуальных системах. Например, можно использовать описанный подход для идентификации подписи по ее фрагменту. В равной степени это относится и к фотографии. Однако в отношении идентификации лиц дело упирается в способ проецирования оригинала. Метод изоморфизма графов не может быть применен в этом случае непосредственно. С другой стороны, если изображение не подверглось «топологическим искажениям», но его фрагменты выцвели, или изменили окраску, то при пересечении с линиями сетки следует определять нечеткую оценку наличия пересечения. В этом случае описанный в статье подход вполне применим. При топологических искажениях следует «привязываться» не к точкам пересечения с сеткой (сетку вообще неуместно использовать), а выделять характерные точки изображения (уголки глаз, ноздри, уголки губ) и «накладывать»

это изображение на оригинал. В результате получим картинку совмещения двух многоугольников, где точность совмещения следует оценить. Однако это – уже другая парадигма.

Разработанная программа позволила получить результаты практического использования метода. В случае достаточно больших графов

(более 20 вершин) степень получения точного результата определяется в районе 90%. Для целей практического применения этого может быть во многих случаях достаточно. Для больших графов точность решения существенно падает, однако для таких графов можно использовать методы, основанные на переборе [4].

Литература

1. Luks E. M. Isomorphism of graphs of bounded valence can be found in polynomial time // *Journal of Computational Sciences*. 1982. Vol. 1, no. 25. P. 42–65.
2. Babai L. Moderately exponential bound for graph isomorphism // *Proceedings of the International FCT-Conference on foundations of computer theory*. London, 1981. P. 34–50.
3. Babai L., Erdos P., Selkow M. Random graph isomorphism // *SIAM Journal of Computing*. 1980. Vol. 3, no. 9. P. 628–635.
4. German Yu., German O. Search for the maximum-size independent set in a fuzzy graph // *Applied Informatics*. 2015. Vol. 10, no. 2. P. 132–139.

References

1. Luks E. M. Isomorphism of graphs of bounded valence can be found in polynomial time. *Journal of Computational Sciences*, 1982, vol. 1, no. 25, pp. 42–65.
2. Babai L. Moderately exponential bound for graph isomorphism. *Proceedings of the International FCT-Conference on foundations of computer theory*. London, 1981, pp. 34–50.
3. Babai L., Erdos P., Selkow M. Random graph isomorphism. *SIAM Journal of Computing*, 1980. vol. 3, no. 9, pp. 628–635.
4. German Yu., German O. Search for the maximum-size independent set in a fuzzy graph. *Applied Informatics*, 2015, vol. 10, no. 2, pp. 132–139.

Информация об авторах

Герман Олег Витольдович – кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: ovgerman@tut.by

Дунаев Александр Александрович – аспирант. Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (220600, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, Республика Беларусь). E-mail: alexander.dunaev@googlemail.com

Information about the authors

German Oleg Vitoldovicz – PhD (Engineering), Assistant Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: ovgerman@tut.by

Dunaev Alexander Alexandrowicz – PhD student. Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovki str., 220600, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alexander.dunaev@googlemail.com

Поступила 01.03.2016

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ

УДК 004.031.43–44.962

А. С. Кобайло

Белорусский государственный технологический университет

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СИНТЕЗА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ С ТРЕБУЕМЫМИ СВОЙСТВАМИ НА ПРИМЕРАХ ПРОЕКТИРОВАНИЯ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ УСТРОЙСТВ ДЛЯ ИМИТАЦИИ РАДИОСИГНАЛОВ

Рассмотрены примеры использования метода синтеза математических моделей с требуемыми свойствами при проектировании специализированных вычислительных устройств для имитации радиосигналов. Метод синтеза математических моделей с требуемыми свойствами основан на логико-комбинаторном подходе к синтезу сложных систем, базируется на аппарате характеристических логических функций и предполагает на первом этапе формирование множества векторов параметров математических моделей с заданными характеристиками (требуемыми свойствами), на втором – преобразование графа алгоритма реализации обобщенной исходной математической модели процесса или системы, подлежащей моделированию, с целью формирования графа усеченной модели того же процесса (системы), удовлетворяющей заданным свойствам.

Для иллюстрации возможностей применения данного метода выбрана обобщенная математическая модель радиосигналов по совокупности объектов (целей) и периодов обращения. Для характеристик моделируемого процесса определены классификационные признаки и соответствующие им свойства модели; для каждого из свойств сформированы характеристические логические функции. Синтезирован ряд имитаторов радиосигналов (специализированных вычислительных устройств) для автоматизированных систем испытаний радиотехнических систем. Синтезированные устройства по сравнению с использованием обобщенной математической модели обладают следующими свойствами: простота, низкие себестоимость, энергопотребление, вес, габариты, высокая надежность при обеспечении требуемых свойств моделируемых процессов и эффективных режимов испытаний радиооборудования.

Ключевые слова: синтез, характеристическая логическая функция, алгоритм, граф, булевы переменные, математическая модель, метод.

A. S. Kobaylo

Belarusian State Technological University

THE APPLICATION OF SYNTHETIC MATHEMATICAL MODELS WITH THE DESIRED PROPERTIES ON THE EXAMPLE OF SPECIALIZED COMPUTING DEVICES DESIGN TO SIMULATE RADIO SIGNALS

The examples of the use of the method of synthesis of mathematical models with the required properties for the design of specialized computing devices to simulate the radio signals are investigated. The method of synthesis of mathematical models with the required properties is based on the unit of the characteristic logic functions and assumes the first stage of forming a plurality of vectors of parameters of mathematical models with specified characteristics (desired properties), the second – the transformation of the graph algorithm implementation of the generalized original mathematical model of a process or system to be modeled, in order to create a graph of a truncated model of the same process (system) that satisfies the given properties.

To illustrate the possibilities of this method the generalized mathematical model of radio signals by a set of objects (targets) and the treatment periods is chosen. For the characteristics of the modeled process defined the classification attributes and the corresponding properties of the model; for each of the characteristic properties of the formed logic functions. A series of radio simulators (special purpose computing devices) for automated test systems radio systems is synthesized. Synthesized devices compared with using a generalized mathematical model has the following properties: simplicity, low cost, power consumption, weight, size, high reliability, while providing the desired properties of modeled processes and efficient radio test modes.

Key words: synthesis, the characteristic logic function, algorithm, graph, Boolean variables, the mathematical model, method.

Введение. Метод синтеза математических моделей с требуемыми свойствами (ММТС) предназначен для формирования на основе обобщенной (базовой) математической модели физического процесса или системы (технической, социальной, экономической и т. д.) множества усеченных моделей, обладающих некоторым набором свойств, обеспечивающих достаточную информативность для достижения цели исследований [1].

Рассмотрим возможность и эффективность использования данного метода на примере проектирования специализированных вычислительных устройств (СВУ) для моделирования радиосигналов. СВУ указанного класса применяются в качестве структурных компонентов в составе тренажеров радиооператоров, а также в составе автоматизированных вычислительных систем испытаний радиотехнических (в частности, радиолокационных) систем (РТС) для формирования внешних воздействий на исследуемую РТС с целью проверки ее на соответствие заданным эксплуатационным характеристикам и параметрам качества.

Основная часть. В качестве исходной математической модели выберем обобщенную модель радиосигналов по совокупности объектов наблюдения и периодов обращения, приведенную к виду, удобному для представления алгоритма вычислений в соответствии с данной моделью и, следовательно, алгоритма вычислительного процесса, реализуемого проектируемым СВУ, в виде его графа – графа вычислительного алгоритма (ГВА), используя специальные функции для временных преобразований параметров сигналов [2].

В соответствии с методом синтеза ММТС для формирования характеристических логических функций (ХЛФ), связывающих булевы переменные, отождествленные с физическими параметрами модели, выделим следующие основные классификационные признаки: P_1 – частотный диапазон сигналов; P_2 – область существования параметров сигналов; P_3 – тип сигналов; P_4 – информативная характеристика параметров; P_5 – метод описания траектории движения объекта; P_6 – форма импульсов. К ограниченному (количественным) классификационным признакам отнесем: $P_0(1)$ – количество объектов на одном направлении поиска; $P_0(2)$ – максимальное количество пачек импульсов на одном цикле; $P_0(3)$ – характеристика радиальной протяженности объекта.

Каждый основной признак P_i ($i = 1, \dots, 6$) определяется вектором $\vec{P}_{(i)}$ свойств с координатами: p_1^1, p_1^2 – сигналы на видео и высокой частотах соответственно; $p_2^1, p_2^2, p_2^3, p_2^4$ – временная, частотно-амплитудная, амплитудно-

временная и амплитудно-частотно-временная области соответственно; p_3^1, p_3^2 – детерминированные и случайные сигналы соответственно; p_4^1 – координаты объекта; p_4^2 – физические параметры; p_4^3 – координаты и физические параметры; p_5^1 – описание движения объекта сменой координат; p_5^2 – эффект Доплера; p_5^3 – эффект Доплера при изменяющихся координатах; p_5^4 – изменение мощности; p_5^5 – изменение мощности и координат; p_5^6 – эффект Доплера при изменяющихся координатах и мощности; p_6^1, p_6^2 – соответственно прямоугольная и непрямоугольная форма импульсов.

В качестве ограничительных признаков используются: $p_0(1)^1$ – не более одного объекта на одном направлении; $p_0(1)^2$ – до двух объектов на одном направлении; $p_0(1)^3$ – более двух объектов на одном направлении; $p_0(2)^1$ – пачка импульсов; $p_0(2)^2$ – N пачек импульсов на цикле; $p_0(3)^1, p_0(3)^2$ – точечные и протяженные объекты соответственно.

В табл. 1 приведены характеристические логические функции свойств для основных классификационных признаков, в табл. 2 – ограничения, соответствующие рассмотренным ограничительным свойствам.

Переменные в табл. 1 представляют собой булевы переменные, отождествленные с соответствующими параметрами математической модели; $F_{3P}(\cdot), F_3(\cdot)$ в табл. 2 – специальные функции.

Поставим задачу синтеза СВУ для моделирования радиосигналов от нескольких точечных объектов на видеочастоте с основными свойствами:

$$\vec{P} = (p_1^1, p_2^1, p_3^1, p_4^1, p_5^1, p_6^2) \quad (1)$$

и вектором ограничительных свойств:

$$\vec{P}_0 = (p_0(1)^2, p_0(2)^2, p_0(3)^2) \quad (2)$$

или при $J_k = 2$.

Представим протяженный объект совокупностью его отражающих точек, сигналы от каждой из которых являются одиночными импульсами, в результате получим:

$$K_p = 1. \quad (3)$$

В качестве исходной модели будем использовать базовую модель радиосигналов из [2], преобразованную с учетом (2) и (3). Сформировав согласно методике синтеза ММТС множество векторов параметров модели, удовлетворяющих свойствам (1), и выбрав один из полученных векторов, преобразуем граф реализации исходной модели согласно методике, изложенной в [1], в результате получим искомую модель радиосигналов:

$$\begin{aligned}
 Y(t - \tau_3) = & \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^{N_m} \left\{ F_3 \left[\chi_p(F_{cp}(\alpha^{(m,n)}, \right. \right. \\
 & \left. \left. \alpha_a(t_0, x(t)), T_{пов}) \cdot x(t), \chi_3(\tau_3(1)^{(m,n)}) \right] + \right. \\
 & \left. + F_3 \left[\chi_p(F_{cp}(\alpha^{(m,n)}, \alpha_a(t_0, x(t)), T_{пов}) \times \right. \right. \\
 & \left. \left. \times x(t), \chi_3(\tau_3(1)^{(m,n)}) \right] \right\}. \quad (4)
 \end{aligned}$$

Здесь $F_{cp}(\varphi_1, \varphi_2) = \begin{cases} 1, & \text{если } \varphi_1 = \varphi_2; \\ 0, & \text{если } \varphi_1 \neq \varphi_2; \end{cases}$

χ_p, χ_3 – функции временных преобразований.
 Специализированное вычислительное устройство, построенное на основе модели (4), отличается следующими показателями: широкие функциональные возможности и диапазон исследований, обеспечиваемый данным СВУ.

Таблица 1

ХЛФ основных свойств радиосигналов

Классификационный признак	Свойство	Характеристические логические функции
P_1	P_1^1	$\tau_n^B \& \omega_0^B \& \Phi^B$
	P_1^2	$\omega_0^B \& (\psi^B \vee \Phi^B \vee \Delta\omega^B) \& \tau_n^B$
P_2	P_2^1	$\tau_n^B \& (\tau_3^B \vee (\tau_3' \& \tau_3) \vee K_d^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B \vee t_n^B) \& \omega_0^B \& \Delta\omega^B \& \bar{\varphi}^B \& \& \Delta\bar{\alpha}^B \& \Delta\bar{\beta}^B \& \Delta\bar{\alpha}'^B \& \Delta\bar{\beta}'^B \& \bar{E}_0^B \& \bar{Z}_\phi^B \& \bar{K}_E^B \& \bar{U}^B \& \bar{F}_{DN}^B$
	P_2^2	$\tau_n^B \& (\tau_3^B \vee (\tau_3' \& \tau_3) \vee K_d^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B \vee t_n^B) \& \omega_0^B \& (\psi^B \vee \Phi^B \& \psi^B) \vee \varphi^B \Delta\alpha^B \& \Delta\beta^B \& \Delta\alpha'^B \& \Delta\beta'^B \& E_0^B \& Z_\phi^B \& K_E^B \& U^B \& F_{DN}^B$
	P_2^3	$\tau_n^B \& (\tau_3^B \vee (\tau_3' \& \tau_3) \vee K_d^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B \vee t_n^B) \& (\Delta\alpha^B \vee \Delta\beta^B \vee \Delta\alpha'^B \vee \Delta\beta'^B) \& \& (E_0^B \vee Z_\phi^B \vee K_E^B \vee U^B \vee F_{DN}^B) \& \bar{\omega}_0^B$
	P_2^4	$\tau_n^B \& (\tau_3^B \vee (\tau_3' \& \tau_3) \vee K_d^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B \vee t_n^B) \& (\Delta\alpha^B \vee \Delta\beta^B \vee \Delta\alpha'^B \vee \Delta\beta'^B) \& \& (E_0^B \vee Z_\phi^B \vee K_E^B \vee U^B \vee F_{DN}^B) \& (\psi^B \vee \Phi^B \vee \varphi^B \vee \Delta\omega^B)$
P_3	P_3^1	$\bar{\tau}_3^B \& \bar{\varphi}^B \& \bar{Z}_\phi^B$
	P_3^2	$\tau_3'^B \vee \varphi^B \vee Z_\phi^B$
P_4	P_4^1	$(\tau_3^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B \vee \Delta\alpha^B \vee \Delta\beta^B \vee \Delta\alpha'^B \vee \Delta\beta'^B \vee (\tau_3' \& \tau_3) \vee K_d^B) \& \bar{E}_0^B \& \bar{Z}_\phi^B \& \& \bar{K}_E^B \& \bar{\omega}_0^B \& \bar{\varphi}^B \& \bar{U}^B \& \bar{\Phi}^B \& \bar{\psi}^B \& \Delta\bar{\omega}^B \& \bar{F}_{DN}^B$
	P_4^2	$(E_0^B \vee Z_\phi^B \vee K_E^B \vee \omega_0^B \vee \varphi^B \vee U^B \vee \Phi^B \vee \psi^B \vee \Delta\omega^B \vee F_{DN}^B) \& \bar{\tau}_3^B \& \bar{\tau}_n^B \& \& \Delta\bar{\alpha}^B \& \Delta\bar{\beta}^B \& \Delta\bar{\alpha}'^B \& \Delta\bar{\beta}'^B$
	P_4^3	$(\tau_3^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B \vee \Delta\alpha^B \vee \Delta\beta^B \vee \Delta\alpha'^B \vee \Delta\beta'^B \vee (\tau_3' \& \tau_3) \vee K_d^B) \& \& (E_0^B \vee Z_\phi^B \vee K_E^B \vee \omega_0^B \vee \varphi^B \vee U^B \vee \Phi^B \vee \psi^B \vee \Delta\omega^B \vee F_{DN}^B)$
P_5	P_5^1	$(\tau_3^B \vee (\tau_3'^B \& \tau_3^B) \vee \Delta\alpha^B \vee \Delta\beta^B \vee \Delta\alpha'^B \vee \Delta\beta'^B \vee K_d^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B) \& \Delta\bar{\omega}^B$
	P_5^2	$\Delta\omega^B$
	P_5^3	$\Delta\omega^B \& (\tau_3^B \vee (\tau_3'^B \& \tau_3^B) \vee \Delta\alpha^B \vee \Delta\beta^B \vee \Delta\alpha'^B \vee \Delta\beta'^B \vee K_d^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B)$
	P_5^4	$(E_0^B \& K_E^B) \& \Delta\bar{\omega}^B$
	P_5^5	$(\tau_3^B \vee (\tau_3'^B \& \tau_3^B) \vee \Delta\alpha^B \vee \Delta\beta^B \vee \Delta\alpha'^B \vee \Delta\beta'^B \vee K_d^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B) \& (E_0^B \& K_E^B)$
	P_5^6	$(\tau_3^B \vee (\tau_3'^B \& \tau_3^B) \vee \Delta\alpha^B \vee \Delta\beta^B \vee \Delta\alpha'^B \vee \Delta\beta'^B \vee K_d^B \vee \tau_n^B \vee \Delta T^B) \& (E_0^B \& K_E^B)$
P_6	P_6^1	\bar{U}^B
	P_6^2	U^B

Таблица 2

**Ограничения, налагаемые ограничительными свойствами
на модель радиосигналов**

Классификационный признак	Ограничительный признак	Ограничения
$P_0(1)$	$P_0(1)^1$	$J_k = 1$
	$P_0(1)^2$	$J_k = 2$
	$P_0(1)^3$	$J_k > 2$
$P_0(2)$	$P_0(2)^1$	$N = 1$
	$P_0(2)^2$	$N > 1$
$P_0(3)$	$P_0(3)^1$	$K_d = 1, F_{3P}(\cdot) = F_3(\cdot)$
	$P_0(3)^2$	$K_d > 1$

С целью синтеза СВУ для моделирования детерминированных радиотехнических сигналов с переменным коэффициентом затухания, зависимым от дальности, может быть использован следующий вектор основных свойств:

$$\vec{P} = (p_1^1, p_2^3, p_3^1, p_4^3, p_5^1, p_6^1)$$

и ограничительный вектор:

$$\vec{P}_0 = (p_0(1)^2, p_0(2)^2, p_0(3)^2).$$

Тогда математическая модель радиосигналов с требуемыми свойствами будет иметь вид

$$y(t - \tau_3) = E'_0 \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^{N_m} \left(\frac{1}{\tau_3^{(m,n)}} \right)^4 F_3 \left\{ \left[\chi_p(F_{cp}(\alpha^{(m,n)}, \alpha_a(t_0, x(t))), T_{пов}), \chi_3(\tau_3^{(m,n)}) \right] \right\},$$

где $E'_0 = \frac{2E_0}{c}$; F_{cp} – функция сравнения; c – скорость распространения электромагнитных волн.

Управление динамикой формируемых СВУ процессов может осуществляться с использованием программных средств, создаваемых на основе известных методик моделирования радиолокационной обстановки [3].

Заключение. Применение методики синтеза математических моделей с требуемыми свойствами при синтезе специализированных вычислительных устройств для формирования радиосигналов позволяет создавать СВУ, отличающиеся простотой, более низкими стоимостью разработки, изготовления и эксплуатации, потребляемой мощностью, весом, габаритами, высокой надежностью, технологичностью, обусловленной возможностью реализации всех структурных составляющих на типовых узлах цифровой вычислительной техники.

Литература

1. Кобайло А. С., Жилияк Н. А. Методика синтеза математических моделей с требуемыми свойствами // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 190–194.
2. 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.
3. Дятко А. А., Костромицкий С. М., Шумский П. Н. Математическая модель сигнала, отраженного от земной поверхности, при сопровождении РЛС низколетящей цели // Доклады БГУИР. 2015. № 8. С. 17–23.

References

1. Kobaylo A. S., Zhilyak N. A. Methods of synthesis of mathematical models with the desired properties. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 190–194 (In Russian).
2. Kobaylo A. S. Theory of computing systems for real-time simulation of physical processes on the example of radio signals. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2014, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 135–137 (In Russian).
3. Dyatko A. A., Kostromitskiy S. M., Shumskiy P. N. Mathematical model of the signal reflected from the ground during radar accompanying low-flying targets. *Doklady BGUIR* [Reports of BSUIR], 2015, no. 8, pp. 17–23 (In Russian).

Информация об авторе

Кобайло Александр Серафимович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: kac_53@mail.ru

Information about the author

Kobaylo Aleksandr Serafimovich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Assistant Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kac_53@mail.ru.

Поступила 15.03.2016

УДК 004.031.43–044.962

А. Д. Новицкая, Н. А. Жилияк

Белорусский государственный технологический университет

**МЕТОДЫ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБЪЕКТОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ
В РАЗРАБОТКЕ СИСТЕМ ОГРАНИЧЕНИЯ ДОСТУПА В ПОМЕЩЕНИЯ**

В данной статье рассмотрены методы и алгоритмы, предназначенные для распознавания объектов на изображениях как с последующим анализом исторических данных, так и с анализом данных в режиме реального времени. Приведены возможные подходы при разработке программного обеспечения для ограничения физического доступа в помещения, сформулированы задачи, которые может решать такое программное обеспечение.

Выявлены как простейшие, так и более сложные алгоритмы и методы, которые необходимы для решения приведенных задач. В качестве простейших способов описаны методы ковариации и сравнения шаблонов. Алгоритм ковариации двух изображений рассмотрен как возможный способ реализации методов сравнения шаблонов. Изучены особенности методов, основанных на геометрических характеристиках лица, осуществляющих поиск на основании контрольных точек и их сочетаний, сети Хопфилда. Особое внимание уделено методу Виолы – Джонса, основанному на вейвлетах Хаара. Данный метод был рассмотрен как основа для разработки программного средства определения и распознавания лиц, так как может работать в режиме реального времени и является гибким, есть возможность дорабатывать и модифицировать его.

Реализация вышеназванных методов поможет получить полноценную и рабочую систему ограничения доступа на территорию предприятия и обеспечить надежную базу для безопасного хранения ценной конфиденциальной информации.

Ключевые слова: распознавание лиц, распознавание объектов, Хаар, Виола – Джонс, сравнение шаблонов, ковариация, сети Хопфилда.

A. D. Novitskaya, N. A. Zhilyak

Belarusian State Technological University

**OBJECT RECOGNITION METHODS USED IN THE DEVELOPMENT
OF SYSTEMS OF ACCESS RESTRICTION TO PREMISES**

This article describes image recognition methods and algorithms that deals with historical analyzing and real-time processing. Potential approaches in physical security access control software development were given, and tasks that should be solved by such software were formulated.

Basics and more complex algorithms and techniques that are needed to solve formulated tasks were presented. As the simplest examples Covariance method and Template matching were described. Covariance of two images is a possible way to implement Templates matching. The basic characteristics of methods which based on generating face control points and Hopfield network were described. The special attention was given to Viola – Jones method that based on the Haar wavelet. This method can be used as a basis for the image detection and facial recognition software tool development, because it can work as real-time method and can be modified.

Methods mentioned before will be helpful to developing physical security access control systems and provide reliable basis for the safe confidential data storage.

Key words: face recognition, object recognition, Haar, Viola – Jones, template matching, covariance, Hopfield network.

Введение. Когда речь заходит о безопасности работы с информацией и ее хранения, в первую очередь вспоминаются множество способов обеспечения надежной работы непосредственно вычислительных систем с помощью программных и аппаратных средств. Однако не стоит забывать об организационных мерах и процедурах, существующих на предприятии или в организации.

Вся информация, в конечном счете, хранится на физических носителях, поэтому разграничение доступа к хранилищу данных, оборудова-

нию, ценным документам так важно. Без процедур ограничения физического доступа сотрудников в различные помещения невозможно обеспечить защиту информации должным образом. Четкие инструкции обычно содержатся в политике безопасности конкретной организации. Помочь исключить ошибки, связанные с человеческим фактором, может автоматизация части работы, выполняемой охраной.

В контексте обсуждаемой задачи это можно обеспечить с помощью:

– систем контроля доступа в здания и помещения;

– систем видеонаблюдения.

Такой подход актуален для работы пограничных пропускных пунктов, аэропортов, вокзалов, опознания отдельных людей в записях массы людей, на записях уже произошедших событий, ограничения доступа нежелательных посетителей в некоторые объекты (доступ по принципу «черных списков»), криминалистики.

Основная часть. Для реализации данного подхода к работе необходимо обратиться к методам распознавания образов в изображениях. Теория распознавания образа – раздел информатики и смежных дисциплин, развивающий основы и методы классификации и идентификации предметов, явлений, процессов, ситуаций, которые характеризуются конечным набором некоторых свойств и признаков. Отсюда можно сделать вывод о том, что распознавание лиц – это частный случай обнаружения предметов на изображении по приметам [1].

Для оптического распознавания образов можно применить метод перебора вида объекта под различными углами, масштабами, смещениями и т. д. Второй подход – найти контур объекта и исследовать его свойства (связность, наличие углов и т. д.). Еще один подход – использовать искусственные нейронные сети. Этот метод требует либо большого количества примеров задачи распознавания (с правильными ответами), либо специальной структуры нейронной сети, учитывающей специфику данной задачи.

Для начала работы по разработке программного обеспечения для определения и идентификации лиц людей поставим следующие задачи:

1) определение лиц и сохранение снимков видеокамер для дальнейшей обработки;

2) распознавание конкретного индивида на изображении с камеры наблюдения в реальном времени.

Практически все, наиболее популярные, из существующих алгоритмов действуют в следующей последовательности:

– детектирование и локализация лица на изображении;

– выравнивание изображения лица (геометрическое и яркостное);

– вычисление признаков;

– распознавание – сравнение вычисленных признаков с заложенными в базу данных эталонами.

В большинстве случаев, когда нужно простое сравнение двух достаточно похожих фрагментов изображения, его реализуют через их ковариацию [2].

На примере данный метод можно представить следующим образом: объект, содержащий

искомый образец, передвигается по координатам X, Y по изображению, в котором осуществляется поиск. Работа алгоритма считается успешной, когда находится такая точка, где отличие искомого образца от изображения, в котором производился поиск, достигает своего минимума:

$$\sum_{i < W, j < H} [I(x+i, y+j) - J(i, j)],$$

где I – изображение, в котором производится поиск; J – образец для сравнения; W – ширина образца (в пикселях); H – высота образца (в пикселях); x, y – координаты текущего пикселя изображения, в котором происходит поиск.

Этот способ быстр в реализации и интуитивен. Однако у него есть свои недостатки:

1) низкая скорость работы, особенно при обработке больших изображений. Если будет задействован образец $a \cdot a$ пикселей и изображение поиска $b \cdot b$ пикселей, то количество операций можно рассчитать как $a^2 \cdot (b - a)^2$;

2) нестабильная работа при смене освещения;

3) нестабильная работа при изменении масштаба или повороте изображения;

4) нестабильная работа в случае, если часть изображения – изменяющийся фон.

С этими недостатками можно бороться следующими методами:

– недостатки в скорости работы устраняются путем проведения поиска с большим шагом при маленьком разрешении;

– недостатки освещения можно нейтрализовать нормировкой или переходом к бинаризации области;

– изменения масштаба и небольшие искажения объекта поиска можно устранить изменением разрешения при корреляции;

– с фоном при таком подходе никто не борется.

На очень схожем подходе работают методы сравнения шаблонов (Template Matching), где для сравнения областей применяются простейшие алгоритмы вроде попиксельного сравнения. Их основными принципами являются выделение областей лица на изображении и их сравнение для двух различных изображений. Каждая совпавшая область увеличивает меру сходства.

В связи с тем, что используются простейшие алгоритмы поиска, можно столкнуться со следующими недостатками:

1) ресурсоемкий (хранение промежуточной информации, эталонов для сравнения, сама обработка всей имеющейся информации);

2) нестабильная работа в случае смены освещения;

3) нестабильная работа при изменении масштаба или повороте изображения;

4) нестабильная работа в случае изменения выражения лица;

5) нельзя с точностью сказать, был ли найден искомый объект, так как результатом работы является вероятностная характеристика;

6) ложные срабатывания (у разных изображений могут быть сходные детали или области).

Еще одной группой методов являются методы, основанные на геометрических характеристиках лица [3].

Процесс распознавания представляет собой сравнение признаков человека, имеющих в базе, с признаками на изображении, имеющимся для сравнения. Правильное нахождение ключевых точек на изображении является гарантией успешного распознавания.

Отсюда можно выделить недостатки данного метода:

- нахождению ключевых точек будет мешать наличие на фото человека очков, бороды, изменений прически, макияжа;

- нестабильная работа при изменении освещения;

- нестабильная работа в случае изменения ракурса (фото должно быть сделано в анфас);

- нестабильная работа при изменении выражения лица.

Таким образом, данный алгоритм будет полезен для определенных задач, например, когда требуется сравнить изображение лица, полученного в текущий момент, с фотографией в документе.

Существуют и более гибкие методы и алгоритмы поиска. Наиболее широко используется для таких задач метод Виолы – Джонса. Он является высокоэффективным для поиска объектов на изображениях и видеопоследовательностях в режиме реального времени. В основе этого алгоритма лежит идея вейвлетов Хаара. Однако в чистом виде алгоритмы, работающие с интенсивностью изображения, имеют большую вычислительную сложность, поэтому данный подход был адаптирован в методе Виолы – Джонса.

Признак Хаара состоит из смежных прямоугольных областей. В общем виде метод можно описать следующими шагами: прямоугольные области позиционируются на изображении, затем суммируются интенсивности пикселей в областях, потом вычисляется разность между этими суммами (суммарного значения области темных пикселей из суммарного значения области светлых пикселей). Эта разность будет значением определенного признака, определенного размера, определенным образом размещенного на изображении. Чаще всего используются области прямоугольной формы либо формы, которую можно представить как совокупность прямоугольников для того, чтобы можно было применить технику интегральных изображений для расчета суммарных интенсивностей в них.

Интегральное представление изображения – это матрица, размерность которой совпадает с размерностью исходного изображения. Элементы этой матрицы рассчитываются по формуле

$$I(x, y) = \sum_{i=j=1}^{i \leq W, j \leq H} J(i, j),$$

где $I(x, y)$ – элемент интегрального изображения; $J(i, j)$ – яркость пикселя исходного изображения; W, H – ширина и высота исходного изображения.

Таким образом, каждый элемент интегрального изображения $I(x, y)$ содержит в себе сумму пикселей изображения в прямоугольнике от (1, 1) до (x, y) [4].

Основные принципы, на которых базируется данный метод, таковы:

- 1) работа с объектами в интегральном отображении (для увеличения скорости вычисления объектов);

- 2) работа с признаками Хаара, с помощью которых происходит поиск лица и его черт;

- 3) используется бустинг (от англ. boost – улучшение, усиление) с целью выбора наиболее подходящих признаков для искомого объекта на данной части изображения;

- 4) все признаки поступают на вход классификатора, который дает результат «верно» либо «ложь»;

- 5) используются каскады признаков для быстрого отбрасывания окон, где не найдено лицо.

Характеристику Хаара можно определить как функцию f от суммарной интенсивности I_A и I_B двух прямоугольных участков изображения A и B таких, что участок A вложен в участок B . На сегодняшний день используется характеристика вида $f(A, B) = \alpha I_A + \beta I_B$, где α и β – константы [4].

Применение алгоритма Виолы и Джонса требует корректировки освещения:

$$I'(x, y) = \frac{I(x, y) - \mu}{c\sigma}, \quad c > 0,$$

где $I(x, y)$ – интенсивность в точке (x, y) ; μ – оценочное среднее значение интенсивности по некоторой окрестности; c – положительная константа, которую обычно полагают равной двум; σ – оценочная дисперсия [4].

Ключевой особенностью признаков Хаара является наибольшая по сравнению с остальными признаками скорость. При использовании интегрального представления изображения признаки Хаара могут вычисляться за постоянное время (примерно 60 процессорных инструкций на признак из двух областей) [4].

Кроме простых алгоритмов, существует подход к распознаванию образов, требующий обучения нейронной сети. В качестве примера можно рассмотреть нейронную сеть Хопфилда. Алгоритм обучения этой сети существенно

отличается от классических алгоритмов обучения перцептронов тем, что вместо последовательного приближения к нужному состоянию с вычислением ошибок все коэффициенты весовой матрицы рассчитываются по одной формуле, за один цикл, после чего сеть сразу готова к работе [5].

Недостатки, с которыми можно столкнуться, прибегая к решению задачи с помощью сети Хопфилда:

– запоминаемые образы не должны быть сильно похожи;

– изображение не должно быть смещено или повернуто относительно его исходного состояния.

Для устранения этих недостатков рассматриваются различные модификации классиче-

ской нейронной сети Хопфилда. При выборе данного метода с учетом и исправлением заранее известных недостатков можно получить нейронную сеть, которая запоминает некоторое количество векторов и при подаче на вход любого вектора определяет, на какой из запомненных он более всего похож.

Заключение. Таким образом, потратив некоторое время на планирование и внедрение перечисленных выше технических и организационных мер, можно создать полноценную и рабочую систему ограничения доступа на территорию предприятия и обеспечить надежную базу для безопасности хранения ценной конфиденциальной информации.

Литература

1. Фомин Я. А. Распознавание образов: теория и применение. М.: ФАЗИС, 2012. 429 с.
2. Weisstein E. W. Covariance [Electronic resource] // Wolfram MathWorld. URL: <http://mathworld.wolfram.com/Covariance.html> (date of access: 12.12.2015).
3. Лебеденко Ю. И. Биометрические системы безопасности. Тула: Directmedia, 2013. 159 с.
4. Viola P., Jones M. J. Rapid object detection using a boosted cascade of simple features [Electronic resource] // IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Kauai, Hawaii, USA, 2001. URL: <http://www.vision.caltech.edu/html-files/EE148-2005-Spring/pprs/viola04ijcv.pdf> (date of access: 17.12.2015).
5. Hopfield J. J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities [Electronic resource] // Proceedings of National Academy of Sciences. 1982. Vol. 79 (8). URL: <http://www.pnas.org/content/79/8/2554.full.pdf> (date of access: 10.01.2016).

References

1. Fomin Ja. A. *Raspoznaniye obrazov: teoriya i primeneniye* [Objects recognition: Theory and practice]. Moscow, Fazis Publ., 2012. 429 p.
2. Weisstein E. W. Covariance. *Wolfram MathWorld*. Available at: <http://mathworld.wolfram.com/Covariance.html> (accessed 12.12.2015).
3. Lebedenko U. I. *Biometricheskiye sistemy bezopasnosti* [Biometrical security systems]. Tula, Directmedia, 2013. 159 p.
4. Viola P., Jones M. J. Rapid object detection using a boosted cascade of simple features. *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. Available at: <http://www.vision.caltech.edu/html-files/EE148-2005-Spring/pprs/viola04ijcv.pdf> (accessed 17.12.2015).
5. Hopfield J. J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proceedings of National Academy of Sciences*, 1982, vol. 79 (8). Available at: <http://www.pnas.org/content/79/8/2554.full.pdf> (accessed 10.01.2016).

Информация об авторах

Новицкая Александра Дмитриевна – магистрант. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: liloddy@gmail.com

Жиляк Надежда Александровна – кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gh_nadya@mail.ru

Information about the authors

Novitskaya Aleksandra Dmitriyevna – Master's degree student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: liloddy@gmail.com

Zhilyak Nadezhda Aleksandrovna – PhD (Engineering), Assistant Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gh_nadya@mail.ru

Поступила 15.03.2016

УДК 519.6

М. В. Гладкий

Белорусский государственный технологический университет

МОДЕЛЬ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ MAPREDUCE

Предмет исследования данной статьи – алгоритмы и методы эффективной обработки и анализа данных большого объема, основанных на использовании парадигмы распределенных вычислений в компьютерных кластерах MapReduce.

Рассмотрена общая схема работы, область применения и принципы параллельной реализации MapReduce вычислений на кластерных системах. Выявлены основные стадии обработки информации в исследуемой модели: Map (предварительная обработка данных), Combine (частичная агрегация данных по ключу), Shuffle (разделение данных на секции и сортировка промежуточных пар по ключу), Reduce (свертка обработанных данных).

Разработана классификация алгоритмов и методов решения задач, использующих описанную модель распределенных вычислений. В качестве классификаторов выступают стадии обработки MapReduce, а также возможные сценарии прикладного использования решаемых задач. Данная классификация позволила разбить совокупность решаемых задач на четыре категории: MapReduce (задачи, для решения которых применяются функции Map и Reduce), MapOnly (задачи, для решения которых можно обойтись только стадией Map), цепочки MapReduce (задачи, для решения которых необходимо последовательно использовать несколько моделей MapReduce) и ReduceJoin (задачи, в которых необходимо объединять содержимое нескольких документов по ключу). Для каждой из групп приводятся различные примеры и сценарии.

Ключевые слова: распределенные вычисления, компьютерный кластер, MapReduce, Combine, Shuffle.

M. V. Gladkiy

Belarusian State Technological University

THE MODEL OF DISTRIBUTED COMPUTING MAPREDUCE

The subject of the research in this article is algorithms and methods of effective processing and analysis data. It is based on the paradigm of distributed computing in computer clusters MapReduce.

The General scheme of work, scope and principles of parallel implementations of the MapReduce computing on cluster systems have been considered. The main stages of the information processing identified in the study model: Map (data preprocessing), Combine (partial data aggregation key), Shuffle (time-dividing the data into sections and sorting the intermediate pairs by key), Reduce (compress the processed data).

Algorithms classification and methods for task solution, which use the model of distributed computing has been developed. The stages of MapReduce processing act as classifiers, and possible scenarios of application of tasks. This classification allowed us to divide the aggregate a set of tasks into four categories: MapReduce (tasks for which apply Map and Reduce functions), MapOnly (for which you can get by with just a stage Map), chaining MapReduce (tasks, for the solution of which is necessary to consistently apply multiple models MapReduce) and ReduceJoin (tasks that you want to merge the contents of multiple documents by key). Various examples and scenarios are given for each group.

Key words: distributed computing, cluster computing, MapReduce, Combine, Shuffle.

Введение. В современном мире все большую роль играют технологии, обеспечивающие эффективную обработку больших массивов данных. Мировой объем информации увеличивается более чем в 2 раза каждые два года, что говорит о лавинообразном росте общего количества данных. Современные программные средства предъявляют серьезные требования к вычислительным ресурсам, значительно превышающие возможности отдельных компьютеров. Особое значение уделяется алгоритмам и методам, применяемым для обработки и анализа данных с использованием компьютерных

кластеров, состоящих из сотен или тысяч узлов. Однако реализация процедур обработки данных на кластерных системах сопряжена с решением таких задач, как разбиение и распределение данных между процессорами, балансировка нагрузки, обработка отказов, сбор и агрегация промежуточных результатов [1].

Кроме того, на данном этапе развития средств распараллеливания вычислений отсутствует детальное описание алгоритмов, методов и подходов распределенной обработки данных, что связано с бизнес-моделью многих компаний. Данная область исследования требует

детального изучения: необходимо рассмотреть и исследовать парадигму эффективной обработки и анализа данных большого объема MapReduce; классифицировать совокупность решаемых задач в исследуемой области по различным критериям.

Основная часть. Одним из самых эффективных методов обработки больших объемов данных в распределенных средах является парадигма MapReduce, предложенная компанией Google в начале 2000-х для сканирования и обработки большого количества страниц из сети Интернет. Впервые такая парадигма была реализована в составе распределенной файловой системы GFS (Google File System) и в высокопроизводительной нереляционной базе данных Big Table [1].

Данная модель отличается простотой и удобством использования, скрывает от пользователя детали организации вычислений на кластерной системе. Преимущество MapReduce заключается в том, что она позволяет распределенно выполнять операции предварительной обработки и свертки. Операции предварительной обработки работают независимо друг от друга и могут производиться параллельно. Аналогичным образом множество рабочих узлов осуществляют операцию свертки – для этого необходимо, чтобы все результаты предварительной обработки с одним конкретным значением ключа обрабатывались одним рабочим узлом в один момент времени [2].

Параллелизм также дает некоторые возможности восстановления после частичных сбоев серверов: если в рабочем узле, производящем операцию предварительной обработки или свертки, возникает сбой, то его работа может быть передана другому рабочему узлу (при условии, что входные данные для проводимой операции доступны). Пользователю достаточно описать процедуру обработки данных в виде нескольких функций, после чего система автоматически распределяет вычисления по кластеру, обрабатывает отказы машин, балансирует нагрузку и координирует взаимодействия между машинами.

В рамках концепции MapReduce предполагается, что данные организованы в виде некоторого набора упорядоченных записей, а их обработка происходит в три стадии: Map, Shuffle и Reduce (рис. 1).

Стадия Map. На этой стадии выполняется предварительная обработка и фильтрация данных при помощи функции Map, которую определяет пользователь. Принцип работы подобен операции Map в функциональных языках программирования – пользовательская функция применяется к каждой входной записи и воз-

вращает множество пар ключ – значение. Все запуски функции работают независимо и могут работать параллельно, в том числе на разных машинах кластера. Функция Map, как правило, применяется на той же машине, на которой хранятся данные. Это позволяет снизить передачу данных по сети (принцип локальности данных) [3].

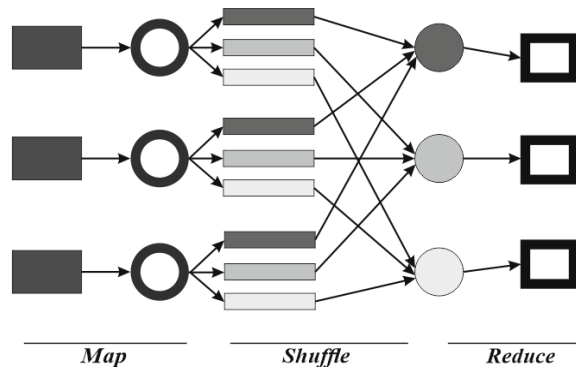


Рис. 1. Стадии работы парадигмы MapReduce

Стадия Shuffle. На этой стадии вывод функции Map разбивается на специальные секции (корзины). Каждая корзина соответствует одному ключу вывода стадии Map. Кроме того, она принимает на вход совокупность записей, соответствующих данному ключу, и общее количество Reduce-задач, а возвращаемым значением является номер задачи, в которой обрабатывалась каждая запись. Каждая секция формируется на основе функции хеширования, которая вызывается для каждого ключа и зависит от определенных критериев, например от номера задачи. Для ускорения процесса обработки информации очень часто на данной стадии применяют алгоритмы параллельной сортировки. В первую очередь они требуются в тех случаях, когда разные атомарные обработчики возвращают наборы с одинаковыми ключами, при этом правила сортировки на этой фазе могут быть заданы программно и использовать какие-либо особенности внутренней структуры ключей разделения (partition key) [4].

Стадия Reduce. Каждая корзина со значениями, сформированная на стадии Shuffle, попадает на вход функции Reduce. Эта функция вычисляет финальный результат для каждой отдельной секции. Все запуски Reduce, как и функция Map, работают независимо и могут работать параллельно, в том числе на разных машинах кластера. Для некоторых видов обработки свертка не требуется, и каркас возвращает в этом случае набор отсортированных пар, полученных базовыми обработчиками.

Парадигма MapReduce достаточно гибкая и может легко адаптироваться под разные типы задач, включая в себя дополнительные стадии обработки информации. Например, стадия *Combine* применяется в тех случаях, когда в результатах функции Map содержится значительное число повторяющихся значений промежуточного ключа, а определенная пользователем задача Reduce является коммутативной и ассоциативной. В таких случаях необходимо осуществить частичную агрегацию данных до их передачи по сети. Функция *Combine* выполняется на той же машине, что и задача Map. Результаты функции *Combine* помещаются в промежуточные файлы, которые впоследствии пересылаются в задачи Shuffle или Reduce [5].

Парадигма распределенных вычислений MapReduce в настоящее время широко используется не только для эффективной обработки больших объемов данных, но и для решения прикладных задач, связанных с расширенной обработкой текста, сортировкой данных, индексированием документов, вычислением индексов цитируемости, статистическим анализом, машинным обучением, обработкой изображений. Классифицировать многообразие этих задач только по области применения не представляется возможным по причине того, что многие области знаний тесно взаимодействуют между собой. Имеет смысл добавить другой критерий, связанный со стадиями обработки данных парадигмой MapReduce. В результате исследования было выделено четыре класса задач, при решении которых применяют данную модель распределенных вычислений.

К первому классу, называемому *MapReduce*, необходимо отнести все возможные методы, алгоритмы, использующие в исследуемой парадигме минимум две стадии: Map и Reduce. При решении практических задач зачастую стадии Shuffle или *Combine* не нужны. В таком случае общая схема работы парадигмы MapReduce упрощается и будет иметь следующий вид:

1. В модель распределенных вычислений подается коллекция документов (записей).

2. Функция Map применяется к каждой паре входных данных и возвращает набор промежуточных пар.

3. MapReduce-контейнер группирует промежуточные значения, связанные с одним ключом, и передает эти значения функции Reduce. Она преобразует промежуточные значения в окончательный набор значений для данного ключа. Как правило, это одно агрегированное значение, например сумма.

К группе *MapOnly* относят задачи, для решения которых можно обойтись только стадией Map (рис. 2). Примерами таких задач являются

фильтрация данных (например, поиск нужной информации в лог-файлах по определенному критерию), преобразование данных (например, удаление определенного свойства в JSON-документе или перевод текста в нижний регистр), загрузка и выгрузка данных из внешнего источника (например, вставка записей в NoSQL-базу данных). В описанных типах задач пользователю требуется получить набор пар ключ – значение, поэтому другие стадии, такие как *Combine*, *Reduce*, ему не нужны [6].

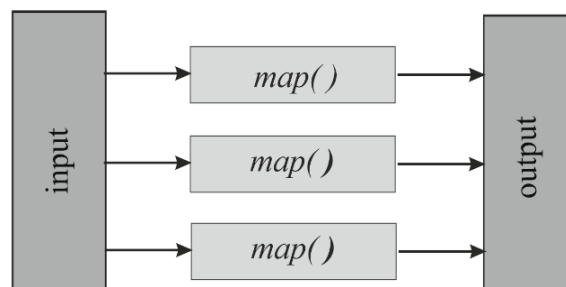


Рис. 2. Схема работы MapOnly

Цепочки MapReduce. К данной группе относят ситуации, когда для решения определенных задач реализации одной MapReduce-модели недостаточно. Тогда их объединяют в цепочки, которые могут выполняться либо линейно, либо представлять собой более сложный направленный ациклический граф. Для линейной цепочки проще всего запускать задания одно за другим, дожидаясь успешного завершения задания перед запуском следующего. Если одно из заданий завершается неудачно, то последующие задания в конвейере выполняться не будут. Когда их последовательность сложнее линейной цепочки, то необходимо определенным образом организовать поток операций, учитывая информацию о зависимости между вызовами MapReduce-задач. Если одно из заданий завершается с ошибкой, планировщик должен прекратить анализ зависимостей и прервать выполнение всей цепочки задач (рис. 3).

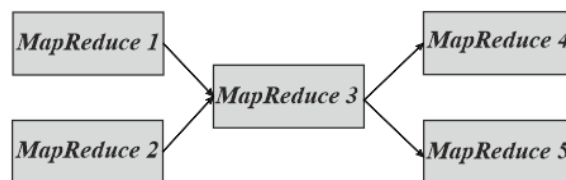


Рис. 3. Цепочки MapReduce

ReduceJoin. К данному классу относят задачи, в которых необходимо объединить содержимое нескольких документов по некоторому ключу в выходном потоке данных. Результат работы этих задач очень похож на принцип

работы с реляционными базами данных, где часто используют очень удобную операцию Join, позволяющую совместно обрабатывать содержание некоторых таблиц, объединив их по некоторому ключу. Примером таких задач является объединение двух или более лог-файлов сервера в один итоговый документ либо определение, на какой из двух серверов пользователь чаще заходит по его IP-адресу [4].

Модель ReduceJoin функционирует, используя следующий алгоритм (рис. 4):

1. На вход поступает две коллекции документов (записей).

2. Каждая из коллекций запускает отдельную MapOnly-задачу, преобразующую входные данные к паре ключ – значение. В качестве ключа используется поле, по которому нужно объединять записи коллекций, а в качестве значений выступает пара Type (тип коллекции) и Value (любые дополнительные данные, привязанные к ключу).

3. Результат работы MapOnly подается на вход следующей модели MapReduce. Эта цепочка должна содержать пустую функцию Map, которая копирует входные данные. Далее на стадии Shuffle данные разделяются по ключам и подаются на вход функции Reduce в виде пары, где в качестве значения используется массив элементов Type и Value.

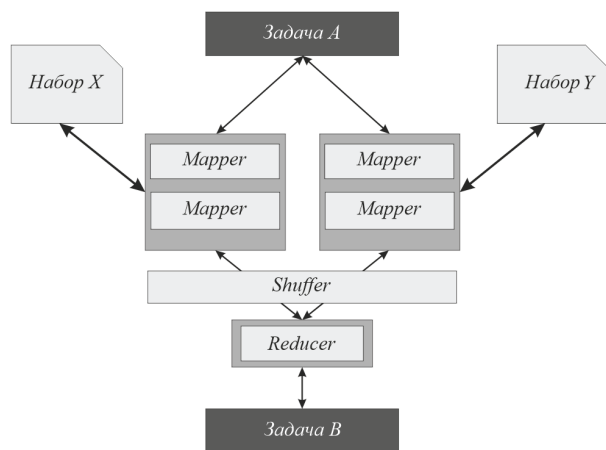


Рис. 4. Схема работы ReduceJoin

Модель MapReduce накладывает ряд ограничений на реализующее ее программное средство в связи с необходимостью автоматизировать распараллеливание, запуск и управление вычислениями на кластере. Кроме того, данная парадигма всегда требует полного сканирования данных, поэтому использование индексов здесь недопустимо. Это означает, что подход MapReduce плохо применим и требует дополнительных оптимизаций, когда необходимо получить ответ в режиме реального времени.

Эффективная реализация MapReduce невозможна без эффективной организации способа хранения данных на кластерной системе. Для этой цели используются распределенные файловые системы (DFS), обеспечивающие высокую производительность, масштабируемость, надежность и доступность данных. Эти файловые системы должны быть оптимизированы для хранения файлов большого размера, эффективного использования сетевых ресурсов и оптимизации под высокую агрегированную пропускную способность, нестандартный интерфейс файловой системы, а также ослабленную модель целостности данных, связанную с хранением слабоструктурированной или не структурированной информации [6].

Запуском MapReduce-задач на кластере должен управлять планировщик, который отслеживает состояние всех узлов и подбирает группу машин для выполнения задания. Вызовы функции Map распределяются между несколькими машинами путем автоматического разбиения входных данных, хранящихся в распределенной файловой системе, на несколько частей. Полученные порции данных могут обрабатываться параллельно различными машинами. Вызовы Reduce распределяются путем разбиения пространства промежуточных ключей на совокупность частей, определяемых с помощью заданной функции разбиения. Каждый из Reduce-процессов загружает со всех Map-процессов порции обработанных данных с соответствующими значениями промежуточных ключей, производит сортировку и объединение этих данных, после чего выполняет функцию Reduce. Результаты вычислений записываются в виде файлов в DFS [5].

Парадигма MapReduce используется многими компаниями, такими как: Google (служит для параллельных вычислений над очень большими, несколько петабайт, наборами данных в компьютерных кластерах), CouchDB (использует MapReduce для определения представлений поверх распределенных документов), MongoDB (позволяет применять MapReduce для параллельной обработки запросов на нескольких серверах), Apache Hadoop (фреймворк для разработки и выполнения распределенных программ), Nvidia (распараллеливание вычислений на видео-ядрах с использованием технологий CUDA), Яндекс (обработка и анализ данных Интернет-сайтов). Каждая компания имеет свои закрытые реализации моделей MapReduce, позволяющие выполнять задачи, написанные на языках Java, C++, C, Python, JavaScript, C#, Perl, Erlang, Ruby.

Заключение. В данной статье рассмотрена одна из основных моделей распределенных

вычислений MapReduce, применяемая для обработки и анализа больших массивов данных на кластерных системах. Выявлено, что отличительными особенностями рассматриваемой парадигмы являются ее высокая гибкость, простота и удобство использования. Она скрывает от пользователя детали организации вычислений на кластерной системе и открывает новые возможности по применению данных систем в научных и прикладных исследованиях для ре-

шения задач, связанных с обработкой изображений и текстовой информации, сортировкой данных, искусственным интеллектом.

В статье также была представлена классификация задач, решаемых с использованием исследуемой модели. В качестве классификаторов применялись стадии работы MapReduce-контейнера, а также учитывались возможные сценарии прикладного использования решаемых задач в распределенных компьютерных средах.

Литература

1. Евстигнеева И. Революция в аналитике. Как в эпоху Big Data улучшить ваш бизнес с помощью операционной аналитики? М.: Альпина Паблшер, 2016. 320 с.
2. Натан М. Большие данные. Принципы и практика построения масштабируемых систем обработки данных в реальном времени. М.: Вильямс, 2015. 368 с.
3. Фрэнкс Б. Укрощение больших данных. Как извлекать знания из массивов информации с помощью глубокой аналитики? М: Манн, Иванов и Фербер, 2014. 352 с.
4. Сухобоков А. А. Влияние инструментария Big Data на развитие научных дисциплин, связанных с моделированием. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2015. 51 с.
5. Dean J., Ghemawat S. MapReduce: Simplified data processing on large clusters // Proceedings of Operating Systems Design and Implementation (OSDI). 2004. P. 137–150.
6. Том У. Hadoop: Подробное руководство. СПб.: Питер, 2015. 670 с.

References

1. Evstigneeva I. *Revolyutsiya v analitike. Kak v epokhu Big Data uluchshit' vash biznes s pomoshch'yu operatsionnoy analitiki* [The revolution in Analytics. As in the era of Big Data to improve your business with operational Analytics?]. Moscow, Al'pina Publisher Publ., 2016. 320 p.
2. Natan M. *Bol'shiye dannyye. Printsipy i praktika postroeniya masshtabiruemykh sistem obrabotki dannykh v real'nom vremeni* [Big data. Principles and practice of building highly scalable data processing systems in real time]. Moscow, Vil'yams Publ., 2015. 368 p.
3. Frenks B. *Ukroshcheniye bol'shikh dannykh. Kak izvlekat' znaniya iz massivov informatsii s pomoshch'yu glubokoy analitiki* [The taming of big data. How to extract knowledge from the massive amounts of information using deep Analytics?]. Moscow, Mann, Ivanov i Ferber Publ., 2014. 352 p.
4. Sukhobokov A. A. *Vliyaniye instrumentariya Big Data na razvitie nauchnykh distsiplin, svyazannykh s modelirovaniem* [The impact of Big Data tools for the development of scientific disciplines related to modeling]. Moscow, MGTU imeni N. E. Bauman Publ., 2015. 51 p.
5. Dean J., Ghemawat S. MapReduce: Simplified data processing on large clusters. *Proceedings of Operating Systems Design and Implementation (OSDI)*, 2004, pp. 137–150.
6. Tom U. *Hadoop: Podrobnoye rukovodstvo* [Hadoop: The Definitive Guide]. St. Petersburg, Piter Publ., 2015. 670 p.

Информация об авторе

Гладкий Максим Валерьевич – ассистент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: MaksHladki@gmail.com

Information about the author

Gladkiy Maksim Valer'yevich – assistant lecturer, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: MaksHladki@gmail.com

Поступила 10.03.2016

УДК 681.391

М. Ф. Кудлацкая, Д. М. Романенко

Белорусский государственный технологический университет

**МЕТОД ИСПРАВЛЕНИЯ ГРУППИРУЮЩИХСЯ ОШИБОК
НА ОСНОВЕ МНОГОПороГОВОГО ДЕКОДИРОВАНИЯ
СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ ИТЕРАТИВНЫХ КОДОВ**

В статье описываются особенности исправления группирующихся ошибок методом многопорогового декодирования специализированных трехмерных линейных итеративных кодов. На основании того, что многопороговый декодер исправляет группирующиеся ошибки, кратность которых не превышает количество столбцов в плоскости, предлагается модифицировать трехмерные итеративные коды путем увеличения количества столбцов в плоскости. Данные коды характеризуются высокой избыточностью, которая не зависит от длины информационного слова. Поскольку эффективность исправления ошибок зависит не только от используемых кодов, но и от декодера, то для повышения эффективности целесообразно модифицировать многопороговый декодер. Путем экспериментального подбора параметров удалось сократить число итераций декодирования, а соответственно, и время исправления ошибок. Предлагаемый метод позволяет исправлять группирующиеся ошибки кратностью до $k/4 + 1$ при скорости кода $R = 0,4$, $k/8 + 1$ при $R = 0,5$ и $k/16 + 1$ при $R = 0,57$ (где k – количество информационных бит). Установлено, что полученные модифицированные трехмерные коды и многопороговый декодер для исправления группирующихся ошибок не уступают по корректирующим способностям известным циклическим кодам, обладая при этом минимальной сложностью аппаратной и программной реализации.

Ключевые слова: кодирование, многопороговое декодирование, группирующиеся ошибки, трехмерные итеративные коды, пороговое значение, проверочные символы, ошибочные биты.

M. F. Kudlatskaya, D. M. Romanenko

Belarusian State Technological University

**THE METHOD OF GROUP ERROR CORRECTION
ON THE BASIS OF THE MULTITHRESHOLD DECODING
OF SPECIALIZED ITERATIVE CODES**

The article describes the correction features of the grouped mistakes by the multithreshold decoding method of specialized three-dimensional linear iterative codes. On the basis of the fact that the multithreshold decoder corrects the grouped errors which frequency rate not exceeding quantity of the columns in the plane, it is offered to modify three-dimensional iterative codes by the increase quantity of columns in a plane. The offered codes are characterized by high redundancy which doesn't depend on the length of the information word. As efficiency of mistakes correction depends not only on the used codes, but also on the decoder, for the purpose of efficiency increase, it is offered to modify the multithreshold decoder. By experimental selection of parameters it was succeeded to reduce number of decoding iterations, and respectively time of mistakes correction. The offered method allows to correct the grouped errors that frequency rate to $k/4 + 1$ at a code speed $R = 0.4$, $k/8 + 1$ at $R = 0.5$ and $k/16 + 1$ at $R = 0.57$ (k – the number of information bits). It is established that the offered modified three-dimensional codes and the multithreshold decoder for correction of the grouped mistakes don't concede on the correcting abilities known cyclic codes, possessing at the same time the minimum complexity of hardware and program realization.

Key words: coding, multithreshold decoding, grouped mistakes, three-dimensional iterative codes, threshold, parity, error bits.

Введение. В современных каналах связи, кроме одиночных ошибок, вызванных шумами, часто встречаются пакетные ошибки, обусловленные импульсными помехами и замираниями. Это приводит к искажению сотен, а то и тысяч бит подряд. Конечно же, не многие помехоустойчивые коды способны исправить и даже обнаружить такие ошибки. Среди существующих избыточных кодов наибольшей эффек-

тивностью исправления группирующихся ошибок отличаются циклические коды Рида – Соломона, коды Файра и др. Известно, что эти коды обладают высокой корректирующей способностью и низкой избыточностью. Так, коды Рида – Соломона формируют не менее $r = 2 \cdot t$ избыточных символов для исправления группирующейся ошибки кратностью t , а коды Файра – не менее $r = 3 \cdot t - 1$ [1]. Но при этом

они характеризуются высокой сложностью аппаратной и программной реализации.

Основная часть. В работе [2] исследовалась эффективность исправления группирующихся ошибок методом многопорогового декодирования (МПД) трехмерных линейных итеративных кодов (ТЛИК). Результаты исследований показали, что многопороговое декодирование трехмерных итеративных кодов гарантированно исправляет группирующиеся ошибки, кратность которых не превышает количество столбцов в плоскости трехмерного кода. Данный вывод позволяет предположить, что увеличение числа столбцов в плоскости приведет к увеличению кратности исправляемой ошибки. Руководствуясь представленными результатами, предлагается модификация структуры ТЛИК с максимально возможным числом столбцов в плоскости. Детальный анализ процесса декодирования ТЛИК показал, что диагональные проверки между плоскостями со смещением по горизонтали ($dzh1$, $dzh2$) [3] отрицательно влияют на эффективность исправления пакетных ошибок, так как появление ошибок в этих ($dzh1$, $dzh2$) избыточных битах приводит к размножению ошибок при декодировании. Учитывая это, данные проверки целесообразнее исключить, что повысит не только эффективность коррекции ошибок, но и скорость кода.

Рассмотрим предлагаемую модификацию кодов на примере трехмерного линейного итеративного кода с пятью проверками на четность. В первую очередь предполагается исключение проверок $dzh1$ из кода ТЛИК5, что сократит число проверок до четырех (соответственно, минимальное кодовое расстояние $d = 5$), поэтому модификацию рассматриваемого кода обозначим ТЛИК4. Предположим, необходимо закодировать информационное слово $X_k = 0110100111110111000111110110100111110110100111110110100111110001$, длина которого $k = 64$ символа и рассчитывается как:

$$k = k_1 \cdot k_2 \cdot k_3, \quad (1)$$

где k_1 – количество строк в плоскости; k_2 – количество столбцов в плоскости; k_3 – количество плоскостей.

Учитывая, что k_2 должно быть максимальным, то целесообразно принять $k_1 = k_3 = 2$, следовательно, $k_2 = 16$. Для удобства дальнейшего пояснения условно назовем такой код ТЛИК4-16, где 16 – это количество столбцов в плоскости. Общий вид ТЛИК4-16 соответствует общему виду ТЛИК [3], он включает те же соотношения проверок, что и ТЛИК5, за исключением проверок $dzh1$ (2): горизонтальные проверки (h), вертикальные проверки (v), первые диагональные проверки между плоско-

стями со смещением по вертикали ($dzv1$), z -проверки:

$$\begin{aligned} X_{65} &= X_1 \oplus X_2 \oplus X_3 \oplus X_4 \oplus \\ &\oplus X_5 \oplus X_6 \oplus X_7 \oplus X_8 \oplus \\ &\oplus X_9 \oplus X_{10} \oplus X_{11} \oplus X_{12} \oplus \\ &\oplus X_{13} \oplus X_{14} \oplus X_{15} \oplus X_{16}, \\ X_{66} &= X_{17} \oplus X_{18} \oplus X_{19} \oplus X_{20} \oplus \\ &\oplus X_{21} \oplus X_{22} \oplus X_{23} \oplus X_{24} \oplus \\ &\oplus X_{25} \oplus X_{26} \oplus X_{27} \oplus X_{28} \oplus \\ &\oplus X_{29} \oplus X_{30} \oplus X_{31} \oplus X_{32}, \\ &\dots \\ X_{69} &= X_1 \oplus X_{17}, \quad X_{70} = X_2 \oplus X_{18}, \\ &\dots \\ X_{101} &= X_1 \oplus X_{49}, \quad X_{102} = X_{17} \oplus X_{33}, \\ &\dots \\ X_{133} &= X_1 \oplus X_{33}, \dots X_{164} = X_{32} \oplus X_{64}. \end{aligned} \quad (2)$$

В соответствии с соотношениями проверок (2) для информационного слова $X_k = 011010011111011100011111011010011111011010011111010100111110001$ ($k = 64$) рассчитаны следующие избыточные символы $X_r = 11010111011010011110100111110110111001010100010000010101010011110010011111011010001110110100111000$.

ТЛИК4-16 можно записать в виде кодовых слов:

- $k_1 \cdot k_3$ n_2 -разрядных кодовых слов строк;
- $k_2 \cdot k_3$ n_1 -разрядных кодовых слов столбцов;
- $k_2 \cdot k_3$ (при $k_3 \leq k_2$) n_1 -разрядных или $k_1 \cdot k_2$ (при $k_3 > k_2$) n_3 -разрядных кодовых первых межплоскостных со смещением по вертикали диагональных слов;
- $k_1 \cdot k_2$ n_3 -разрядных кодовых z -слов.

При этом $n_1 = k_1 + 1$, $n_2 = k_2 + 1$, $n_3 = k_3 + 1$.

Величину избыточности r (количество избыточных символов) ТЛИК4-16, учитывая, что код не имеет структуру куба, так как $k_1 \neq k_2$, а $k_2 \neq k_3$, можно определить с помощью выражения

$$r = k_1 \cdot k_3 + 2 \cdot k_2 \cdot k_3 + k_1 \cdot k_2. \quad (3)$$

Поскольку минимальное кодовое расстояние ТЛИК4-16 $d = 5$, то можно утверждать, что данный код позволяет корректировать и обнаруживать все двукратные ошибки.

Значения относительной избыточности $r_{\text{отн}} = r/n$ кодов ТЛИК4 с максимальным числом столбцов в плоскости при различных значениях длины информационного слова k приведены в табл. 1.

Таблица 1
Величины относительной избыточности для ТЛИК4 с максимальным количеством столбцов в плоскости

Длина информационного слова k	Размерность матрицы (k_1, k_2, k_3)	Относительная избыточность $r_{отн}$
8	(2, 2, 2)	0,666
16	(2, 4, 2)	0,636
64	(2, 16, 2)	0,610
128	(2, 32, 2)	0,605
256	(2, 64, 2)	0,602
512	(2, 128, 2)	0,601
1024	(2, 256, 2)	0,601
4096	(2, 1024, 2)	0,600

Как видно из расчетов (табл. 1) и графика (рис. 1), относительная избыточность ТЛИК4-16 в меньшей степени зависит от длины информационной последовательности, чем другие рассматриваемые коды, при этом по сравнению с ними обладает самой высокой избыточностью, если длина кодового слова превышает 128 бит.

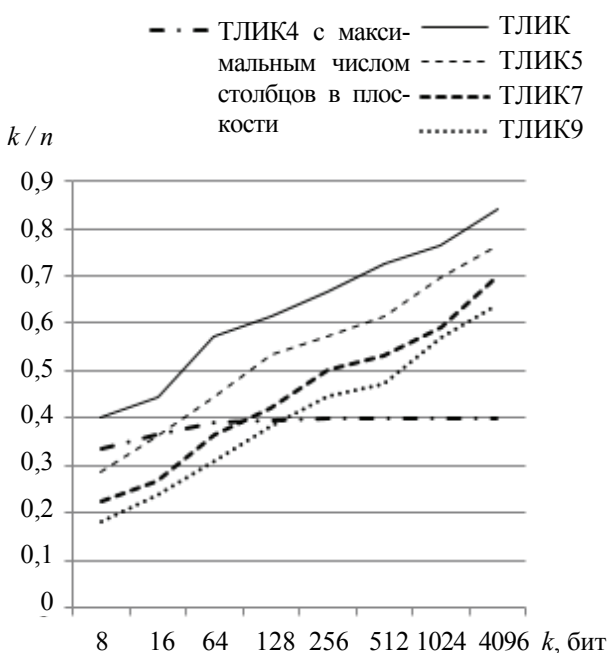


Рис. 1. Относительная избыточность кодов

Эффективность исправления ошибок зависит не только от используемого кода, но и от декодера. Многопороговый декодер эффективно справляется с группирующимися ошибками [2, 3], тем не менее, изменяя параметры декодера (число итераций декодирования и пороговые значения), можно повысить не только эффективность исправления группирующихся ошибок в кодовых словах (долю исправленных ошибок), но и сократить время декодирования.

Согласно [2, 3], число итераций многопорогового декодирования ТЛИК5 равняется трем с пороговыми значениями 5, 4 и 3 на первой, второй и третьей итерациях соответственно. Однако путем экспериментального подбора параметров удалось модифицировать декодер с целью повысить долю исправленных группирующихся ошибок. Для кода ТЛИК4-16 модификация многопорогового декодера подразумевает декодирование в две итерации с пороговым значением 3 на первой и второй итерациях декодирования. Очевидно, что число итераций многопорогового декодера напрямую влияет на время декодирования. Следовательно, уменьшение количества итераций сократит время декодирования, что является явным преимуществом модифицированного декодера по сравнению с обычным МПД.

Для моделирования модифицированного многопорогового декодирования трехмерных итеративных кодов разработано программное средство ASDecoder v.1.0 [4], включающее программную реализацию кодера и многопорогового декодера. Результатами моделирования модифицированного многопорогового декодирования кода ТЛИК4-16 является доля исправленных группирующихся ошибок в кодовых последовательностях, которая выражается отношением числа исправленных ошибок к общему числу всех возможных ошибок в декодируемой кодовой последовательности. Рассмотрим ситуацию, когда в передаваемом сообщении кроме многократной пакетной ошибки возникают независимые ошибки низкой кратности (однократные и двукратные). Как это влияет на эффективность исправления ошибок в кодовом слове, продемонстрировано в табл. 2.

Анализ результатов моделирования показал, что метод исправления группирующихся ошибок на основе модифицированного многопорогового декодирования трехмерного итеративного кода с максимальным числом столбцов в плоскости эффективно справляется с группируемыми ошибками по сравнению с обычным МПД, при этом появление независимых ошибок низкой кратности незначительно снижает долю исправленных ошибок в кодовых сообщениях. График на рис. 2 наглядно демонстрирует, что предлагаемые параметры декодера повысили долю исправленных ошибок. Так, ТЛИК5 и обычный МПД гарантированно исправляют пятикратные группирующиеся ошибки, а специализированный ТЛИК4-16 и модифицированный МПД гарантированно исправляют ошибки, кратность которых достигает 17.

Табл. 3 содержит характеристики предлагаемых специализированных кодов. В зависимости от предполагаемой кратности ошибки или от требуемой скорости кодирования можно

выбрать код с соответствующими параметрами. Видно, что с ростом скорости кода уменьшается кратность группирующихся ошибок, которые можно исправить методом модифицированного многопорогового декодирования специализированных трехмерных итеративных кодов.

Таблица 2

Исправление группирующихся ошибок методом модифицированного многопорогового декодирования кода ТЛИК4-16

Кратность ошибки	Доля исправленных пакетных ошибок, %	Доля исправленных пакетных ошибок совместно с однократными, %	Доля исправленных пакетных ошибок совместно с двукратными, %
2	100	99,99	98,89
3	100	99,94	98,37
4	100	99,90	97,24
5	100	99,72	96,88
6	100	99,59	94,92
7	100	99,25	94,78
8	100	99,03	92,04
9	100	98,52	92,08
10	100	98,21	88,73
11	100	97,53	88,77
12	100	97,12	85,16
13	100	96,27	84,86
14	100	95,75	81,50
15	100	94,72	80,33
16	100	94,09	77,92
17	100	81,64	66,41
18	81,63	76,80	63,32
19	95,89	74,97	59,35
20	79,31	71,38	56,70

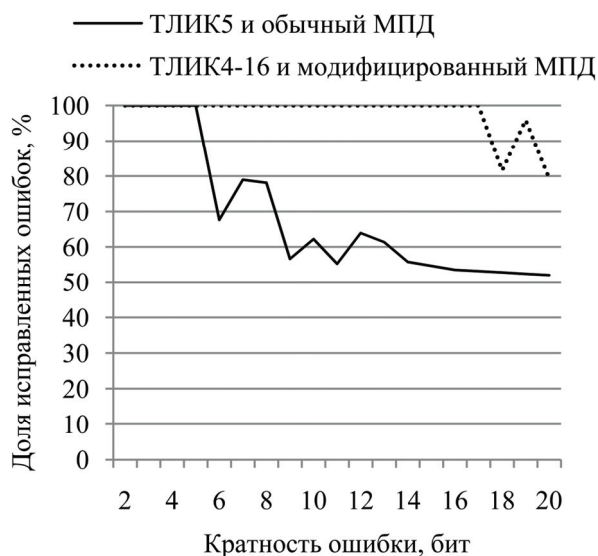


Рис. 2. Сравнительный анализ эффективности исправления пакетных ошибок

Таблица 3

Характеристики кодов для исправления пакетов ошибок

Скорость кода k/n	Длина информационной последовательности k			
	16384	8192	4096	2048
	Кратность исправляемого пакета t			
0,40	$k/4+1$	$k/4+1$	$k/4+1$	$k/4+1$
0,50	$k/8+1$	$k/8+1$	$k/8+1$	$k/8+1$
0,57	$k/16+1$	$k/16+1$	$k/16+1$	$k/16+1$
0,65				
0,66		$k/32+1$	$k/32+1$	$k/32+1$
0,67	$k/32+1$			
0,70				
0,71			$k/64+1$	$k/64+1$
0,72		$k/64+1$		
0,73	$k/64+1$			
0,76				$k/128+1$
0,78			$k/128+1$	
0,79		$k/128+1$		
0,80	$k/128+1$		$k/256+1$	
0,82		$k/256+1$		
0,83	$k/256+1$			
0,86	$k/512+1$			

Корректирующие способности полученных итеративных кодов не уступают упомянутым циклическим кодам. К достоинствам предлагаемого метода исправления группирующихся ошибок многопороговым декодированием итеративных кодов следует отнести сравнительно простые алгоритмы кодирования и декодирования, а также минимальную сложность аппаратной и программной реализации.

Заключение. Таким образом, наиболее эффективного исправления группирующихся ошибок по сравнению с обычными трехмерными итеративными кодами и МПД можно достичь совместным использованием модифицированного трехмерного итеративного кода и модифицированного многопорогового декодера. Предлагаемый метод исправления пакетных ошибок может применяться в каскадных схемах кодирования/декодирования наряду с трехмерными итеративными кодами и МПД, которые успешно справляются с многократными независимыми ошибками.

Кроме того, предлагаемые специализированные трехмерные итеративные коды в отличие от циклических кодов позволяют построить класс кодов с одинаковой архитектурой и разнообразных по скорости и числу проверок на четность, который позволяет разработать адаптивную систему кодирования/декодирования с возможностью динамического выбора кодов в зависимости от качества канала связи с целью повышения скорости или надежности передачи данных.

Литература

1. Теория прикладного кодирования / В. К. Конопелько [и др.]; под ред. проф. В. К. Конопелько. В 2 т. Т. 2. Минск: БГУИР, 2004. 688 с.
2. Multithreshold majority decoding of LDPC-codes / P. Urbanovich [et al.] // *Informatyka Automatyka Pomiaru*. 2012. No. 4a. P. 22–24.
3. Романенко Д. М., Шиман Д. В., Виткова М. Ф. Многопороговое мажоритарное декодирование низкоплотностных кодов // *Труды БГТУ*. 2011. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 128–132.
4. Кудлацкая М. Ф. Программная имитационная модель адаптивного многопорогового декодирования линейных блочных кодов // *Труды БГТУ*. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 208–212.

References

1. Konopel'ko V. K., Lipnitskiy V. A., Dvornikov V. D. *Teoriya prikladnogo kodirovaniya. V 2 tomakh. T. 2* [Theory application coding. In 2 vol. Vol. 2]. Minsk, BGUIR Publ., 2004. 688 p.
2. Urbanovich P., Romanenko D., Shiman D., Vitkova M. Multithreshold majority decoding of LDPC-codes. *Informatyka Automatyka Pomiaru*, 2012, no. 4a, pp. 22–24.
3. Romanenko D. M., Shiman D. V., Vitkova M. F. The multithreshold majority decoding of low-density codes. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2011, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 128–132 (In Russian).
4. Kudlatskaya M. F. Programme simulation model of adaptive multithreshold decoding of linear block codes. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 208–212 (In Russian).

Информация об авторах

Кудлацкая Марина Федоровна – ассистент кафедры информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kudlatskaya@gmail.com

Романенко Дмитрий Михайлович – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: rdm@tut.by

Information about the authors

Kudlatskaya Marina Fedorovna – assistant lecturer, the Department of Informatics and Web-design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kudlatskaya@gmail.com

Romanenko Dmitriy Mikhaylovich – PhD (Engineering), Assistant Professor, Head of the Department of Informatics and Web-design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: rdm@tut.by

Поступила 12.03.2016

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ	5
МАТЕМАТИКА	5
Марченко В. М., Борковская И. М., Пыжкова О. Н. Устойчивость гибридных динамических систем с многомерным временем	5
Волк А. М. Статистическая оценка параметров обобщенного гамма-распределения	10
Соловьева И. Ф. Исследование матриц Якоби и чисел обусловленности при решении нелинейных граничных задач	14
Якименко А. А. Модальное управление одной системой нейтрального типа	18
Можей Н. П. Трехмерные симметрические многообразия и тензоры Риччи на них	22
Шагова Т. Г. К вопросу об асимптотических разложениях рациональных мнемофункций	28
Яроцкая Л. Д. Об уравнении с двумя ядрами типа свертки Конторовича – Лебедева	31
МЕХАНИКА	36
Аргиракис П., Гиазитзидис П., Грода Я. Г. Кинетический коэффициент диффузии решеточного флюида на плоской квадратной решетке с заблокированными узлами	36
Бокун Г. С., Вихренко В. С. Химический потенциал в форме функционала плотности для описания импеданса электрохимической системы	41
Грода Я. Г., Вихренко В. С. Влияние параметров случайного распределения высот межузельных барьеров на энергию активации проводимости в квазидномерной решеточной модели топливной ячейки	46
ФИЗИКА	51
Крук Н. Н., Крылов А. Б. Перенос энергии в дендримерах с порфириновым ядром	51
Кленицкий Д. В., Крук Н. Н. Влияние триплетного состояния на интенсивность флуоресценции красителей при стационарном фотовозбуждении	56
Наркевич И. И., Квасов Н. Т., Козич Е. Ю. Двухуровневое молекулярно-статистическое изучение структуры и термодинамических характеристик однородных макроскопических систем и сферических наночастиц	61
Фарафонтова Е. В., Козич Е. Ю. Использование единой молекулярно-статистической модели для расчета свободной энергии, энтропии и теплоемкости вещества в конденсированном состоянии ...	66
Бокун Г. С. Алгоритмизация двухуровневого молекулярно-статистического подхода для расчета параметров кристаллических наночастиц со структурой алмазной решетки	71
Карлович Т. Б. Мультипиковый спектр резонансной флуоресценции в модели однокубитного лазера	76
Кухто А. В., Мисевич А. В., Почтенный А. Е. Электрические свойства пленочных структур на основе графена	81
Русак Л. Д., Почтенный А. Е., Мисевич А. В. Адсорбционно-резистивный эффект при воздействии аммиака на пленки фторзамещенного фталоцианина меди	86
Бобрович О. Г., Ташлыков И. С. Формирование покрытия на кремнии нанесением Cr в условиях ионного ассистирования	91
Тульев В. В., Ташлыков И. С. Микротвердость поверхности алюминия и сплава АК9, модифицированной осаждением покрытий Mo и W в условиях ионного ассистирования	96
Мадьяров В. Р. Измерение параметров электронного переноса в полупроводниках с помощью эффекта Фарадея в миллиметровом диапазоне	101
Чаевский В. В., Жилинский В. В., Чернашей О. Влияние параметров электрохимического осаждения на структуру и фазовый состав покрытия сплавом Ni-P	106

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ	110
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ	110
Карпович Д. С., Шумский А. Н., Сарока В. В. Система управления беспилотным летательным аппаратом с применением теории нечетких множеств	110
Сухорукова И. Г., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Влияние условий фильтрации и сглаживания в информационных каналах на критерий серий	117
Олиферович Н. М., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Гармоническая идентификация технологических объектов в реальном времени	122
Анкуда М. А., Оробей И. О. Модель автодина с параметрическим возбуждением	127
Анкуда М. А., Оробей И. О. Адаптивный временной ЯМР-расходомер	132
Дятко А. А., Храменков А. С., Ярмолик С. Н., Шумский П. Н. Квазиоптимальный алгоритм распознавания радиолокационных объектов с последовательным уточнением информации о классе объекта и о продолжении наблюдения	137
Дятко А. А., Костромицкий С. М., Шумский П. Н. Расчет мощности радиолокационного сигнала, отраженного от морской поверхности, при наличии надводных судов	142
Ласовский Р. Н., Гапанюк Д. В. Моделирование распределения электрофизических характеристик токопроводящей керамики	147
ОБРАБОТКА И ПЕРЕДАЧА ИНФОРМАЦИИ	152
Миронов И. А., Жук Я. А. Централизованная система хранения и синхронизации электронных учебных материалов на основе «облачных» технологий	152
Гурин Н. И., Жук Я. А. Морфологический анализ текста для генерации базы знаний диалоговой информационной системы	156
Шутько Н. П. Алгоритмы реализации методов текстовой стеганографии на основе модификации пространственно-геометрических и цветовых параметров текста	160
Блинова Е. А. Стеганографический метод на основе изменения междустрочного расстояния неотображаемых символов строк электронного текстового документа	166
Буснюк Н. Н., Новиков В. А. Метод оптимального решения задачи о назначениях в сетевом планировании	170
СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И ОБУЧАЮЩИЕ СИСТЕМЫ	173
Колесников В. Л., Бракович А. И. Ментальное картрирование и UML-описание виртуального производственного комплекса	173
Гурин Н. И., Крылова Т. А. Интернет-приложение на платформе Node для электронной биржи перевозок	178
Герман О. В., Дунаев А. А. Задача изоморфизма графов в системе нечеткого распознавания	181
АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ	185
Кобайло А. С. Применение метода синтеза математических моделей с требуемыми свойствами на примерах проектирования специализированных вычислительных устройств для имитации радиосигналов	185
Новицкая А. Д., Жилияк Н. А. Методы распознавания объектов, используемые в разработке систем ограничения доступа в помещения	190
Гладкий М. В. Модель распределенных вычислений MapReduce	194
Кудлацкая М. Ф., Романенко Д. М. Метод исправления группирующихся ошибок на основе многопорогового декодирования специализированных итеративных кодов	199

CONTENTS

.....

PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES	5
MATHEMATICS	5
Marchenko V. M., Borkovskaya I. M., Pyzhkova O. N. The stability of hybrid dynamic 2-D-systems	5
Volk A. M. Statistical evaluation of parameters of the generalized gamma distribution	10
Solov'yeva I. F. The research of Jacobi matrices and condition numbers for solving nonlinear boundary value problems	14
Yakimenka A. A. Modal control for one neutral type system	18
Mozhey N. P. Three-dimensional symmetric spaces and Richi tensors on them	22
Shagova T. G. On the asymptotic expansions of rational mnemofunctions	28
Yarotskaya L. D. On the equation with two convolutions of the Kontorovich – Lebedev type in the kernels	31
MECHANICS	36
Argyris P., Giazitzidis P., Groda Ya. G. Jump diffusion coefficient of lattice fluids on a plane square lattice with blocked sites	36
Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Chemical potential as a density functional to describe the impedans of an electrochemical system	41
Groda Ya. G., Vikhrenko V. S. Influence of random distribution parameters of intersite barrier heights on conductivity activation energy in quasi-one-dimensional lattice model of fuel cell	46
PHYSICS	51
Kruk M. M., Krylov A. B. Energy transfer in dendrimers with porphyrin core	51
Klenitsky D. V., Kruk M. M. The triplet state influence on the dyes fluorescence intensity upon steady-state photoexcitation	56
Narkevich I. I., Kvasov N. T., Kozich E. Yu. Two-level molecular-statistical description of the structure and thermodynamic characteristics of homogeneous macroscopic systems and spherical nanoparticles	61
Farafontova E. V., Kozich E. Yu. Using a single molecular-statistic model to calculate free energy, entropy and heat capacity of the substance in the condensed state	66
Bokun G. S. The algorithmization of the two-level molecular-statistical approach for calculation of parameters of crystal nanoparticles with diamond lattice	71
Karlovich T. B. Multipeaked spectrum of resonance fluorescence in a single-qubit model	76
Kukhto A. V., Misevich A. V., Pochtenny A. E. Electrical properties of film structures based on graphene	81
Rusak L. D., Pochtenny A. E., Misevich A. V. Adsorption-resistive effect when exposing film of fluorine-substituted copper phthalocyanine to ammonia	86
Bobrovich O. G., Tashlykov I. S. The formation of coat on silicon at deposition of Cr in conditions of ion assisting	91
Tul'ev V. V., Tashlykov I. S. Microhardness of aluminum surface and AK9 alloy, obtained at deposition of Mo and W coatings under ion-assisting conditions	96
Madiarov V. R. Measurement of electronic transfer parameters in semiconductors using Faraday effect in millimeter-wave band	101
Chayouski V. V., Zhylinskiy V. V., Cernashejus O. The influence of electrochemical deposition parameters on the structure and phase composition of plating by the Ni-P alloy	106

COMPUTER SCIENCE AND ENGINEERING SCIENCES	110
MODELLING OF PROCESSES AND MANAGEMENT IN TECHNICAL SYSTEMS	110
Karpovich D. S., Shumski A. N., Saroka V. V. Control system of an unmanned aerial vehicle using the theory of fuzzy sets	110
Suhorukova I. G., Hryniuk D. A., Orobei I. O. Influence of conditions of filtering and smoothing in information channels runs tests	117
Oliferovich N. M., Hryniuk D. A., Orobei I. O. Harmonic identification of technological objects in real time	122
Ankuda M. A., Orobei I. O. The model of autodyne with parametric excitation	127
Ankuda M. A., Orobei I. O. The adaptive temporal NMR flowmeter	132
Dyatko A. A., Khramenkov A. S., Yarmolik S. N., Shumskiy P. N. Quasioptimum algorithm of radar-tracking recognition with sequential specification of the information on the object class and about supervision continuation	137
Dyatko A. A., Kostromitskiy S. M., Shumskiy P. N. Calculation of power of radiolocation sig- nal, reflected from marine surface, in the presence of surface vessels	142
Lasovsky R. N., Gapanjuk D. V. Simulation of electrophysical characteristics of electroconduc- ting ceramics	147
PROCESSING AND TRANSFER OF INFORMATION	152
Mironov I. A., Zhuk Ya. A. Central storage and synchronization system for e-learning materials based on “cloud” technologies	152
Gurin N. I., Zhuk Ya. A. Text morphological analysis for the dialog information system know- ledge base generation	156
Shut’ko N. P. The algorithms of realization of text steganography methods based on the modifica- tion of the geometric and color text parameters	160
Blinova E. A. Steganographic method based on the line-shift coding method on non-displayed symbols of the electronic text document	166
Busnyuk N. N., Novikov V. A. Optimal solution method of assignment problem in network planning	170
SYSTEM ANALYSIS AND TRAINING SYSTEMS	173
Kolesnikov V. L., Brakovich A. I. Mental mapping and UML-description of virtual industrial en- terprise	173
Gurin N. I., Krylova T. A. Internet application on platform Node for electronic exchange of traffic	178
German O. V., Dunaev A. A. Graph isomorphism problem in the fuzzy recognition system	181
ALGORITHMIZATION AND PROGRAMMING	185
Kobaylo A. S. The application of synthetic mathematical models with the desired properties on the example of specialized computing devices design to simulate radio signals	185
Novitskaya A. D., Zhilyak N. A. Object recognition methods used in the development of systems of access restriction to premises	190
Gladkiy M. V. The model of distributed computing MapReduce	194
Kudlatskaya M. F., Romanenko D. M. The method of group error correction on the basis of the multithreshold decoding of specialized iterative codes	199

Редактор *Е. С. Ватечкина*
Компьютерная верстка: *О. Ю. Шантарович, Е. В. Ильченко, С. С. Белявская*
Корректор *Е. С. Ватечкина*

Подписано в печать 30.09.2016. Формат 60×84¹/₈.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 25,1. Уч.-изд. л. 25,9.
Тираж 110 экз. Заказ 413.

Издатель и полиграфическое исполнение:
УО «Белорусский государственный технологический университет».
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий
№ 1/227 от 20.03.2014.
Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.