Т Р У Д Ы

Белорусского государственного технологического университета

Издается с июля 1993 года
Выходит один раз в год

Серия II

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ И ИНФОРМАТИКА

ВЫПУСК XVI

Учредитель – учреждение образования
«Белорусский государственный
технологический университет»

Минск 2008

УДК [53+51+004](060.55)
Ф50

Рекомендовано к изданию редакционно-издательским советом университета.

Главный редактор научного журнала «Труды БГТУ»
ректор, профессор И. М. Жарский

Редакционная коллегия:
В. М. Марченко, зав. кафедрой, доктор физ.-мат. наук, профессор (главный редактор серии);
И. И. Наркевич, зав. кафедрой, доктор физ.-мат. наук, профессор (зам. главного редактора);
В. С. Вихренко, зав. кафедрой, доктор физ.-мат. наук, профессор;
В. Л. Колесников, доктор техн. наук, профессор;
П. П. Урбанович, доктор техн. наук, профессор;
М. А. Журавков, зав. кафедрой БГУ, доктор физ.-мат. наук, профессор;
А. И. Калинин, зав. кафедрой БГУ, доктор физ.-мат. наук, профессор;
Н. Т. Квасов, зав. кафедрой БГУИР, доктор физ.-мат. наук, профессор;
В. И. Кувшинов, генеральный директор Объединенного института энергетических и ядерных исследований НАН Беларуси, доктор физ.-мат. наук, профессор;
Л. И. Минченко, зав. кафедрой БГУИР, доктор физ.-мат. наук, профессор;
Я. В. Радыно, зав. кафедрой БГУ, доктор физ.-мат. наук, профессор, член-кор. НАН Беларуси;
Н. П. Можей, доцент, канд. физ.-мат. наук (секретарь)

Работы, рассмотренные и принятые к опубликованию редакционной коллегией шестнадцатого выпуска серии «Физико-математические науки и информатика», проклассифицированы по следующим направлениям: математика (ответственный проф. В. М. Марченко); механика (ответственный проф. В. С. Вихренко); физика (ответственный проф. И. И. Наркевич); общетехнические науки и информатика (ответственные проф. В. Л. Колесников и проф. П. П. Урбанович).

Раздел «Математика» представлен исследованиями по теории стационарных гибридных управляемых систем, методам решения систем дифференциальных уравнений, а также изучению действий групп на многообразиях.

Раздел «Механика» посвящен исследованию методами статистической механики равновесных и транспортных характеристик молекулярных и решеточных систем, в том числе формулировке замкнутой системы интегральных уравнений для частичных функций распределения, эволюции неоднородных систем при наличии фазовых переходов первого и второго рода, диффузии в двухкомпонентных системах на однородных решетках и в однокомпонентных системах при статическом и динамическом случайном распределении барьеров; упаковки молекул ДНК на гистонах; разработке модели и численной схемы интегрирования уравнений движения ствола дерева при падении.

Раздел «Физика» включает результаты исследований по столкновению тяжелых ионов высоких энергий, расчету свободной энергии модели плосконапряженного состояния тонких молекулярных пленок, применению кинетической теории ползучести при кручении полимерных образцов, изучению фотопроводимости в двухкомпонентных тонкопленочных нанокомпозитных структурах, световому тушению спонтанного и вынужденного излучений растворов сложных соединений, расчету распределения концентрации неравновесного заряда и напряженности холловского поля в кремнии, определению элементного состава и микротвердости покрытий, сформированных в условиях ассистирования или саморадиации, износу ионно-плазменных покрытий ножей фрез из твердых сплавов, тушению триплетного состояния Mg-фталоцианина комплексами порфиринов и методике расчета индукции магнитного поля поверхностных токов.

Раздел «Общетехнические науки и информатика» содержит результаты научных исследований по проблемам оптимального оперативного управления процессами химической технологии, моделирования дискретных систем и стационарных случайных процессов, программной криптографической компьютерной защиты информационных потоков и повышению помехоустойчивости каналов связи, теории и практики создания интерактивных компьютерных средств обучения.

Выпуск будет полезен научным работникам, аспирантам и студентам старших курсов, интересующимся фундаментальными и прикладными исследованиями в области математики, механики, физики, автоматики и информатики.

Статьи поступили в редакцию 01.04.2008.

© Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет», 2008

УДК 517.977

В. М. Марченко, профессор; О. Н. Пыжкова, доцент

ОТНОСИТЕЛЬНАЯ УПРАВЛЯЕМОСТЬ ЛИНЕЙНЫХ СТАЦИОНАРНЫХ ГИБРИДНЫХ СИСТЕМ С МНОГОМЕРНЫМ ВРЕМЕНЕМ[1]

Linear hybrid differential-discrete two dimensional time (2-D) systems are studied from the point of view of relative controllability property. For such systems, a defining equation is introduced, algebraic properties of the defining equation solution are investigated and analytical solution representations of considered hybrid 2-D systems into series of their defining equation solutions are given. This result is applied to obtaining the effective parametric criterion, which expressed in terms of defining equation solutions, of relative controllability with respect to continuous and piecewise continuous state variable of the systems under consideration.

Введение. Автоматика и телемеханика, теория передачи информации, радиология и химическая кинетика, оптика и радиоастрономия, моделирование технологических процессов в ядерных реакторах, плазме и лазерах, задачи демографии и экономики и т. д. предъявляют все более возрастающие требования к математическим моделям реальных систем автоматического регулирования. Все вышеперечисленное, а также прогресс средств вычислительной техники, широкое распространение микропроцессоров в производстве диктуют необходимость изучения фундаментальных проблем математической теории управления, ставят новые задачи для более широкого класса динамических систем. Кроме того, появляется потребность в разработке новых более эффективных методов изучения систем, в частности систем с запаздыванием, динамических систем с алгебраическими связями, описывающих процессы, в которых как эффектом запаздывания, так и алгебраическими связями пренебречь нельзя. Особый класс составляют динамические аналого-цифровые системы, моделирующие динамические процессы, рассматриваемые на дискретных слоях. Большинство из перечисленных процессов приводят к математическим моделям в виде гибридных систем. Следует, однако, признать, что термин «гибридные системы» перегружен [1–7].

Ниже рассматриваются гибридные дифференциально-алгебраические системы с многомерным временем, состоящим из непрерывной и дискретной компонент.

1. Постановка задачи. Рассмотрим объект управления, описываемый следующей гибридной 2-D системой:

$$\dot{x}_1(t,i) = A_{11}x_1(t,i) + A_{12}x_2(t,i) + B_1u(t,i), \quad t \in R_+ = [0,+\infty], \tag{1a}$$

$$x_2(t,i+1) = A_{21}x_1(t,i) + A_{22}x_2(t,i) + B_2u(t,i), \quad i \in Z_+, \tag{1b}$$

где $\dot{x}_1(t,i) = \dfrac{\partial x_1(t,i)}{\partial t}$, $x_1(t,i) \in R^{n_1}$, $x_2(t,i) \in R^{n_2}$, $u(t,i) \in R^m$ и $A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22}, B_1, B_2$ – постоянные матрицы соответствующих размеров.

Граничные условия для (1a) и (1b) зададим в виде

$$x_1(0,i) = x_1(i), \ i \in Z_+, \qquad x_2(t,0) = x_2(t), \ i \in R_+. \tag{2}$$

Отметим, что гибридная система (1) имеет структуру, схожую с известной моделью Россера.

Определение. При заданном моменте времени $t_1 > 0$ и слое $i_1 \in Z$ система (1), (2) называется (t_1, i_1)-управляемой относительно x_1, если для любых начальных данных $x_1(i)$, $i \in Z_+$, $x_2(t)$, $t \in R_+$, любого конечного состояния $x_1^* \in \mathrm{R}^{n_1}$, любых вектор-функций найдется кусочно-непрерывное по t управление $u(t, i)$, $t \in [0, t_1]$, $i = 0, 1, ..., i_1$, такое, что соответствующее решение $x_1(t, i)$, $x_2(t, i)$, $t \in [0, t_1]$, , системы (1) с начальными условиями (2) обладает свойством $x_1(t_1, i_1) = x_1^*$.

Задача. Найти параметрический критерий относительной (t_1, i_1)-управляемости гибридной 2-D системы (1), (2).

2. Определяющие уравнения. По аналогии с развитой для динамических систем с последействием техникой определяющих уравнений [8] наряду с гибридной непрерывно-дискретной 2-D системой (1) рассмотрим дискретную 2-D систему вида

$$X^1_{k+1,i} = A_{11}X^1_{k,i} + A_{12}X^2_{k,i} + B_1U_{k,i}, \tag{3a}$$

$$X^2_{k,i+1} = A_{21}X^1_{k,i} + A_{22}X^2_{k,i} + B_2U_{k,i} \tag{3b}$$

с начальными условиями

[1] Работа выполнена в рамках сотрудничества с Белостокским техническим университетом.

$$X_{0,i}^{1}=0 \text{ для } i=0,1,\ldots \tag{4a}$$

$$X_{k,0}^{2}=0 \text{ для } k=0,1,\ldots \tag{4b}$$

$$U_{k,i}=\begin{cases} I_m, & k=i=0 \\ 0, & k^2+i^2\neq 0 \end{cases} \tag{4c}$$

3. Алгебраические свойства решений определяющих уравнений. Имеют место следующие утверждения.

Лемма. Имеют место следующие тождества:

$$(A_{11}+A_{12}w(I_{n_2}-A_{22}w)^{-1}A_{21})^{k-1}(B_1+$$

$$+A_{12}w(I_{n_2}-A_{22}w)^{-1}B_2)\equiv\sum_{j=0}^{\infty}X_{k,j}^{1}w^j,$$

$$(I_{n_2}-A_{22}w)^{-1}A_{21}w(A_{11}+A_{12}w(I_{n_2}-A_{22}w)^{-1}A_{21})^{k-1}\times$$

$$\times(B_1+A_{12}w(I_{n_2}-A_{22}w)^{-1}B_2)\equiv\sum_{j=0}^{\infty}X_{k,j}^{2}w^j,$$

$$k=1,2,\ldots;$$

$$(A_{22}+A_{21}w(I_{n_1}-A_{11}w)^{-1}A_{12})^{j-1}(B_2+$$

$$+A_{21}w(I_{n_1}-A_{11}w)^{-1}B_1)\equiv\sum_{k=0}^{\infty}X_{k,j}^{2}w^k,$$

$$(I_{n_1}-A_{11}w)^{-1}A_{12}w(A_{22}+A_{21}w(I_{n_1}-A_{11}w)^{-1}A_{12})^{j-1}\times$$

$$\times\ B_2+A_{21}w(I_{n_1}-A_{11}w)^{-1}B_1)\equiv\sum_{j=0}^{\infty}X_{k,j}^{1}w^k,$$

$$j=1,2,\ldots;$$

$$(I_{n_2}-A_{22}w)^{-1}B_2w\equiv\sum_{j=0}^{\infty}X_{0,j}^{2}w^j,$$

$$(I_{n_1}-A_{11}w)^{-1}B_1w\equiv\sum_{k=0}^{\infty}X_{k,0}^{1}w^k,$$

где $|w|<w_1$, $w\in C$, C – множество комплексных чисел; w_1 – достаточно малое положительное число.

Доказательство методом математической индукции.

4. Представление решений. Используя преобразование Лапласа по непрерывной переменной t, z-преобразование (дискретное преобразование Лапласа) по переменной i, с учетом алгебраических свойств решений определяющих уравнений можно показать, что решение системы (1) имеет следующее разложение в ряд по решениям ее определяющих уравнений:

$$x_1(t,\ i)=\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{k,j}^{1}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,\ i-j)\,d\tau+$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{k,j}^{11}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,\ i-j)+$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}X_{k,i+1}^{12}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2(\tau,0)d\tau, \tag{5a}$$

$$x_2(t,i)=\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{i}X_{k,j}^{2}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i-j)d\tau+$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{i}X_{k,j}^{21}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,\ i-j)+$$

$$+\sum_{j=1}^{i}X_{0,j}^{2}u(t,\ i-j)+$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}X_{k,i+1}^{22}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2\ \tau,0)d\tau+X_{0,i+1}^{22}x_2(t,0). \tag{5b}$$

Доказательство. Действительно, подставим выражения (5) для $x_1(t,\ i)$, $x_2(t,\ i)$ в (1). Имеем:

1) для $x_1(t,\ i)$:

$$\dot{x}_1(t,i)=\sum_{k=2}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{1}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-2}}{(k-2)!}u(\tau,i-j)d\tau+$$

$$+\sum_{j=0}^{i}X_{1j}^{1}u(t,i-j)+\sum_{k=2}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{11}\frac{t^{k-2}}{(k-2)!}x_1(0,i-j)+$$

$$+\sum_{k=2}^{\infty}X_{k\,i+1}^{12}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-2}}{(k-2)!}x_2(\tau,0)d\tau+X_{1\,i+1}^{12}x_2(t,0)=$$

$$=\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{k+1\,j}^{1}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i-j)d\tau+$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{k+1\,j}^{11}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,i-j)+$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}X_{k+1\,i+1}^{12}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2(\tau,0)d\tau+\sum_{j=0}^{i}X_{1j}^{1}u(t,i-j)+$$

$$+X_{1i+1}^{12}x_2(t,0)=A_{11}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{1}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i-j)d\tau+$$

$$+A_{12}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{2}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i-j)d\tau+$$

$$+A_{11}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{11}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,i-j)+$$

$$+A_{12}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{21}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,i-j)+$$

$$+A_{11}\sum_{k=1}^{\infty}X_{k\,i+1}^{12}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2(\tau,0)d\tau+$$

$$+A_{12}\sum_{k=1}^{\infty}X_{k\,i+1}^{22}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2(\tau,0)d\tau+$$

$$+B_1u(t,i)+A_{12}\sum_{j=1}^{i}X_{0j}^{2}u(t,i-j)+A_{12}X_{0\,i+1}^{22}x_2(t,0)=$$

$$=A_{11}x_1(t,i)+A_{12}x_2(t,i)+B_1u(t,\tau);$$

2) для $x_2(t, i)$:

$$x_2(t,i+1)=\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{i+1}X_{kj}^{2}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i+1-j)d\tau+$$

$$+\sum_{j=1}^{i+1}X_{0j}^{2}u(t,i+1-j)+X_{0\,i+1+1}^{22}x_2(t,0)+$$

$$+\sum_{k=2}^{\infty}X_{k\,i+1+1}^{22}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2(\tau,0)dt+$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i+1}X_{kj}^{21}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,i+1-j)=$$

$$=\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{k\,j+1}^{2}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i-j)d\tau+$$

$$+\sum_{j=0}^{i}X_{0\,j+1}^{2}u(t,i-j)+\sum_{k=2}^{\infty}X_{k\,i+1+1}^{22}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2(\tau,0)dt+$$

$$+X_{0\,i+1+1}^{22}x_2(t,0)+\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{k\,j+1}^{21}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,i-j)=$$

$$=A_{21}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{1}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i-j)d\tau+$$

$$+A_{22}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{2}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i-j)d\tau+$$

$$+A_{21}\sum_{k=1}^{\infty}X_{k\,i+1}^{12}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2(\tau,0)d\tau+$$

$$+A_{22}\sum_{k=1}^{\infty}X_{k\,i+1}^{22}\int_0^t\frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}x_2(\tau,0)d\tau+$$

$$+A_{21}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{11}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,i-j)+$$

$$+A_{22}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}X_{kj}^{21}\frac{t^{k-1}}{(k-1)!}x_1(0,i-j)+$$

$$+A_{22}\sum_{j=1}^{i}X_{0j}^{2}u(t,i-j)+B_2u(t,i)+A_{22}X_{0\,i+1}^{22}x_2(t,0)=$$

$$=A_{21}x_1(t,i)+A_{22}x_2(t,i)+B_2u(t,i).$$

5. Относительная управляемость. Из определения относительной управляемости и представлений решений системы (1) в форме (5) вытекает, что система (1) (t_1, i_1)-управляема относительно x_1 тогда и только тогда, когда система

$$\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=0}^{i_1}X_{k,j}^{1}\int_0^{t_1}\frac{(t_1-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}u(\tau,i-j)d\tau=p^*$$

разрешима для любых $p^*\in R^{n_1}$ относительно управления $u(t, i)$, $t\in[0, t_1]$, $i=0,1,...,i_1$, откуда в силу линейной независимости функций $\frac{(t_1-\tau)^{k-1}}{(k-1)!}$, $k=1,2,...$, на основании известной из функционального анализа L-проблемы моментов получаем следующий параметрический критерий управляемости системы (1):

$$\operatorname{rank}\left[X_{k,j}^{1},\ k=1,2,...;\ i=0,1,...,i_1\right]=n. \quad (6)$$

Используя алгебраические свойства решений определяющего уравнения, можно показать, что среди них существует конечное число образующих (обобщение теоремы Гамильтона – Кэли), что допускает уточнение критерия (6).

Теорема. Система (1) (t_1, i_1)-управляема относительно x_1 тогда и только тогда, когда

$$\operatorname{rank}\left[X_{k,j}^{1},\ k=1,2,...,n_1;\ i=0,1,...,i_1\right]=n.$$

Заключение. В работе рассмотрена (t_1, i_1)-управляемость гибридной 2-D системы относительно x_1. Предложенная методика исследования позволяет применить полученные результаты на случай управляемости этой системы относительно x_2, а также относительно x_1, x_2, однако это предмет другой статьи.

Литература

1. März, R, Solvability o f lin ear d ifferential algebraic equations with pr operly s tated l eading terms / R. März // Results in Mathematics 45(2004) – Basel: Birkhauser Verlag. – 2004. – P. 88–95.

2. De l a S en, M . The r eachability a nd observability o f hy brid m ultirate sampling line ar systems / M. De la Sen // Computers Math. Applic. – 1996. – Vol. 31, № 1. – P. 109–122.

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

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

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

6. Щеглова, А. А. Наблюдаемость вырожденных линейных гибридных систем с постоянными коэффициентами / А. А. Щеглова // Автоматика и телемеханика. – 2004. – № 11. – С. 86–101.

7. Marchenko, V . M. On the observability of linear d ifferential-algebraic s ystems with delays / V. M. Marchenko, O. N. Poddubnaya, Z. Zaczkiewicz // IEEE Trans. Automat. Control. – 2006. – Vol. 51, № 8. – P. 1387–1392.

8. Габасов, Р. Качественная теория оптимальных процессов / Р. Габасов, Ф. М. Кириллова. – М.: Наука, 1971. – 508 с.

УДК 517.977

V. M. Marchenko, professor; Z. Zaczkiewicz, magistr

ON THE WEAK OBSERVABILITY OF SMALL SOLUTIONS OF DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC SYSTEMS WITH DELAYS[1]

The paper considers the problem of observability of small solutions for hybrid time invariant differential-difference dynamic systems, i. e. linear stationary differential-algebraic systems with delays (DAD systems). Several types of observability of small solutions are defined and the corresponding parametric criteria are given. Spectral observability is considered and relation of the spectral observability to the observability of small solutions is discussed.

Introduction. The behaviour of a number of real physics process consists of a combination of dynamic (differential) and algebraic (functional) dependencies. These processes are described by differential-algebraic (DAE) systems. In that sense these systems are hybrid systems. It should be noted that the term «hybrid systems» has been widely used in the literature in various senses [1].

The paper deals with the weak observability of small solutions of DAD systems; it is an extension of the work [2]. The small solution is a solution that goes to zero faster than any exponential function. Existence of such solutions for linear retarded systems was proved by Henry [3] and later by Kappel [4] for linear neutral type systems. Lunel [5] gave explicit characterization of the smallest possible time for which small solutions vanish. Observability of small solutions for the retarded time delay system case was first studied by Manitius [6] and for general neutral system by Salomon [7].

1. Preliminaries. Let us consider DAD system in the form

$$\dot{x}_1(t) = A_{11}x_1(t) + A_{12}x_2(t),\ t > 0, \qquad (1)$$

$$x_2(t) = A_{21}x_1(t) + A_{22}x_2(t-h),\ t \ge 0, \qquad (2)$$

with output

$$y(t) = B_1x_1(t) + B_2x_2(t), \qquad (3)$$

Here $x_1(t) \in \mathbb{R}^{n_1}$, $x_2(t) \in \mathbb{R}^{n_2}$, $y(t) \in \mathbb{R}^m$, $t \ge 0$; $A_{11} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_1}$, $A_{12} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}$, $A_{22} \in \mathbb{R}^{n_2 \times n_2}$, $B_1 \in \mathbb{R}^{r \times n_1}$, $B_2 \in \mathbb{R}^{r \times n_2}$ are constant matrices h is a constant delay, $h > 0$. We regard an absolute continuous n_1-vector functions $x_1(\cdot)$, and piecewise continuous $x_2(\cdot)$ n_2-vector functions as the solutions of systems (1)–(3), if they satisfy the equation (1) for almost all $t > 0$ and (2) for all $t \ge 0$. System (1)–(3) should be completed with initial conditions in the form

$$x_1(0+) = x_1(0) = x_{10},$$
$$x_2(\tau) = \psi(\tau), \tau \in [-h, 0), \qquad (4)$$

where $\psi \in PC([-h, 0), \mathbb{R}^m)$ and $PC([-h, 0), \mathbb{R}^m)$ is a set of piecewise continuous m-vector functions in $[-h, 0]$.

Let $E(g)$ denote the exponential type of $g : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$, assuming g is an entire function of order 1. Then

$$E(g) = \limsup_{|s| \to \infty} \frac{\log|g(s)|}{|s|}.$$

For $g : \mathbb{C} \to \mathbb{C}^q$ the exponential type of g is defined by

$$E(g) = \max_{1 \le j \le q} E(g_j), \text{ where } g = \begin{bmatrix} g_1 & \dots & g_q \end{bmatrix}^T.$$

Let $\Delta(p)$ be the characteristic matrix function

$$\Delta(p) = \begin{pmatrix} pI_{n_1} - A_{11} & -A_{12} \\ -A_{21} & I_{n_2} - A_{22}e^{-ph} \end{pmatrix}.$$

The matrix function $\Delta(p)$ appears by applying the Laplace transform to system (1)–(3). Let $\det\Delta(p)$ be the determinant of $\Delta(p)$. It follows from the above that the exponential type of $\det\Delta(p)$ is less or equal n_2h. Define ε by

$$E(\det\Delta(p)) = n_2h - \varepsilon.$$

Let $\operatorname{adj}\Delta(p)$ be the matrix function of cofactors of $\Delta(p)$. Since the cofactors C_{ij} are $(n_1 + n_2 - 1)(n_1 + n_2 - 1)$ subdeterminants of $\Delta(p)$, the exponential type of the cofactors is less or equal n_2h. Define σ by

$$\max_{1 \le i, j \le n_1 + n_2} E(C_{ij}) = n_2h - \sigma.$$

We have [2].

Proposition 1. For $x_1(\cdot)$, $x_2(\cdot)$ being solutions of system (1)–(3) the following implications hold:

i) if $\forall k \in \mathbb{Z}$ $x_1(t)e^{kt} \to 0$ as $t \to +\infty$,

then $x_1(t) = 0$ for all $t \ge \varepsilon - \sigma$; (5)

ii) if $\forall k \in \mathbb{Z}$ $x_2(t)e^{kt} \to 0$ as $t \to +\infty$,

then $x_2(t) = 0$ for all $t \ge \varepsilon - \sigma$. (6)

Definition 1. We say that a solution $x_1(\cdot)$, $x_2(\cdot)$ is small, if there exists $T > 0$ such that $x_1(t) = 0$, $x_2(t) = 0$ for $t \ge T$. A small solution is trivial, if it is zero for $t > 0$.

[1] The work is written in the framework of the cooperation with Bialystok Technical University.

Definition 2. We say that system (1)–(3) has a nontrivial small solutions, if there exists a solution $x_1(\cdot)$, $x_2(\cdot)$ such that conditions (5), (6) hold and at least $x_1(\cdot)$ or $x_2(\cdot)$ is not trivial.

Definition 3. We say that system (1)–(3) has a nontrivial small solution with respect to x_1, if there exists a solution $x_1(\cdot)$, $x_2(\cdot)$ such that condition (5) holds and $x_1(\cdot)$ is not trivial.

Definition 4. We say that system (1)–(3) has a nontrivial small solution with respect to x_2, if there exists a solution $x_1(\cdot)$, $x_2(\cdot)$ such that condition (6) holds and $x_2(\cdot)$ is not trivial.

2. Observability.

2.1. Observability of small solutions.

Definition 5. We say that nontrivial small solutions of system (1)–(3) are observable, if every nontrivial small solution has nonzero output for some $t > 0$. This means that

$$\exists T > 0 \quad \left.\begin{array}{r} x_1(t) = 0 \forall t \geq T \\ x_2(t) = 0 \forall t \geq T \\ y(t) = 0 \forall t > 0 \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} x_1(t) = 0, x_2(t) = 0, \\ \forall t > 0. \end{array}\right.$$

Theorem 1. Nontrivial small solutions of system (1)–(3) are observable, if and only if the following conditions hold:

$$\text{i) } \max_{\lambda \in \mathbb{C}} \operatorname{rank} \begin{bmatrix} A_{11} - \lambda I_{n_1} & A_{12} & 0 \\ A_{21} & -I_{n_2} & A_{22} \\ 0 & A_{22} & 0 \\ B_1 & B_2 & 0 \end{bmatrix} = \\ = n_1 + n_2 + \operatorname{rank} A_{22}, \qquad (7)$$

$$\text{ii) } \operatorname{rank} \begin{bmatrix} B_2 A_{22} \\ B_2 (A_{22})^2 \\ \vdots \\ B_2 (A_{22})^{n_2} \\ (A_{22})^{n_2} \end{bmatrix} = \operatorname{rank} \begin{bmatrix} B_2 A_{22} \\ B_2 (A_{22})^2 \\ \vdots \\ B_2 (A_{22})^{n_2} \\ (A_{22})^{n_2} \\ A_{22} \end{bmatrix}. \qquad (8)$$

Proof. The proof is similar to theorem 2 and it can be omitted.

2.2. Spectral observability.

Definition 6. System (1)–(3) is infinite-time observable, if for all initial data for which $y(t) = 0$ for $t \in [0, \infty)$ there exists t_1 such that $x_1(t) = 0$ and $x_2(t) = 0$ for $t \in [t_1, \infty)$.

Definition 7. System (1)–(3) is finite-time observable at t_2, if for all initial data, for which $y(t) = 0$ for $t \in [0, \infty)$, $x_1(t) = 0$ and $x_2(t) = 0$ for $t \in [t_2, \infty)$.

Definition 8. System (1)–(3) is spectrally observable, if all its eigenvalues are observable. An eigenvalue λ is observable if the corresponding eigensolution of the form $x_1(t) = \exp(\lambda t) x_1(0)$, $x_2(t) = \exp(\lambda t) x_2(0)$, $x_1(0) \neq 0$, $x_2(0) \neq 0$, obtains $y(t) = 0$ for $t \in [0, \infty)$.

We have [2].

Proposition 2. System (1)–(3) is spectrally observable if and only if

$$\operatorname{rank} \begin{pmatrix} \lambda I_{n_1} - A_{11} & -A_{12} \\ -A_{21} & I_{n_2} - A_{22} e^{-\lambda h} \\ B_1 & B_2 \end{pmatrix} = n_1 + n_2, \qquad (9)$$

for all complex λ.

Proposition 3. System (1)–(3) is spectrally observable if and only if system (1)–(3) is infinite-time observable.

Corollary 1. System (1)–(3) is spectrally observable if and only if system (1)–(3) is finite-time observable at $\varepsilon - \sigma$.

Proof. By proposition 1 and proposition 3.

3. Relative observability of small solutions.

Definition 9. Nontrivial small solutions with respect to x_2 of system (1)–(3) are weakly observable, if every nontrivial small solution with respect to x_2 has nonzero output for $t > 0$ and x_1 is a zero solution, i. e.

$$\exists T > 0 \quad \left.\begin{array}{r} x_1(t) = 0 \forall t > 0 \\ x_2(t) = 0 \forall t \geq T \\ y(t) = 0 \forall t \geq 0 \end{array}\right\} \Rightarrow x_2(t) = 0, \ \forall t > 0$$

Theorem 2. Nontrivial small solutions with respect to x_2 of system (1)–(3) are observable if and only if the following condition holds:

$$\operatorname{rank} \begin{bmatrix} B_2 A_{22} \\ B_2 (A_{22})^2 \\ \vdots \\ B_2 (A_{22})^{n_2} \end{bmatrix} = \operatorname{rank} \begin{bmatrix} B_2 A_{22} \\ B_2 (A_{22})^2 \\ \vdots \\ B_2 (A_{22})^{n_2} \\ A_{22} \end{bmatrix}. \qquad (10)$$

Proof. *The necessary condition.* We assume that $x_1(t) \equiv 0$, $t > 0$, $\varphi(\tau) = \begin{cases} 0, \ \tau \in (-h, 0), \\ \varphi_0, \ \tau = -h. \end{cases}$ Then equation (1) is satisfied for almost all $t > 0$ and weak observability with respect to x_2 of system (1)–(3) means that conditions $B_2 A_{22} \varphi_0 = 0, \ \ldots, B_2 (A_{22})^k \varphi_0 = 0$ for $k = 1, 2, \ldots$ implies $A_{22} \varphi_0 = 0$ that by the Cayley – Hamilton theorem is equivalent to condition (10).

The sufficient condition. If condition (10) is satisfied then there exists a matrix $D \in \mathbb{R}^{n_2 \times r n_2}$ such that $A_{22} = D \begin{bmatrix} B_2 A_{22} \\ B_2 (A_{22})^2 \\ \vdots \\ B_2 (A_{22})^{n_2} \end{bmatrix}$. For any initial

function $\varphi(\tau), \tau \in [-h,\ 0]$ for which $B_2(A_{22})^k \varphi(\tau) \equiv 0$, $\tau \in [-h, 0]$, $k = 1, \ldots, n_2$ condition $A_{22}\varphi(\tau) \equiv 0$, $\tau \in [-h, 0]$ is also satisfied that is equivalent to the weak observability of nontrivial small solutions of system (1)–(3) with respect to x_2.

Definition 10. We say that $x_1(t),\ t > 0$, $x_2(t),\ t > 0$ is a strong solution of system (1)–(3), if equations (1)–(3) are satisfied for all $t,\ t \geq 0$ (the derivative in (1) we means right-hand derivative at $t = 0$).

Theorem 3. Nontrivial strong small solutions with respect to x_2 for system (1)–(3), are observable if and only if the following condition holds:

$$\operatorname{rank}\begin{bmatrix} A_{12}A_{22} \\ \vdots \\ A_{12}A_{22}^{n_2} \\ B_2A_{22} \\ \vdots \\ B_2A_{22}^{n_2} \end{bmatrix} = \operatorname{rank}\begin{bmatrix} A_{12}A_{22} \\ \vdots \\ A_{12}A_{22}^{n_2} \\ B_2A_{22} \\ \vdots \\ B_2A_{22}^{n_2} \\ A_{22} \end{bmatrix}. \qquad (11)$$

Proof. Definition 10 is equivalent to

$$\left[\begin{array}{c} \left.\begin{array}{c} A_{12}x_1(t) = 0,\ t > 0 \\ x_2(t) = A_{22}x_2(t-h),\ t > 0 \\ y(t) = B_2x_2(t),\ t > 0 \end{array}\right\} \Rightarrow x_2(t) = 0,\ t > 0 \end{array}\right] \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \left[\begin{array}{c} A_{12}(A_{22})^i\varphi(\tau) = 0 \\ B_2(A_{22})^j\varphi(\tau) = 0 \end{array}\right\} \Rightarrow A_{22}\varphi(\tau) = 0,$$

where

$$[\tau \in -h, 0),\ i = 1, \ldots, n_2;\ j = 1, \ldots, n_2] \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \{\varphi^T(\tau)[(A_{22}^T)^i A_{12}^T, (A_{22}^T)^j B_2^T,$$

$$i = 1, \ldots, n_2;\ j = 1, \ldots, n_2] \Rightarrow \varphi^T(\tau)A_{22}^T = 0\}.$$

It is equivalent to (11).

Corollary 2. If nontrivial strong small solutions with respect to x_2 of system (1)–(3) are observable then nontrivial small solutions with respect to x_2 of the system are also observable.

Definition 9. Nontrivial small solutions with respect to x_1 of system (1)–(3) are weakly observable if every non trivial small solution with respect to x_1 has nonzero output for $t > 0$ and for x_2 being zero solution, i. e.

$$\left.\begin{array}{c} x_2(t) = 0\ \forall t > 0 \\ \exists T > 0\ x_1(t) = 0\ \forall t \geq T \\ y(t) = 0\ \forall t > 0 \end{array}\right\} \Rightarrow x_1(t) = 0, \forall t > 0.$$

Theorem 4. Nontrivial small solutions with respect to x_1 of system (1)–(3) are always observable.

Proof. Condition $x_2(t) = 0$ for $t > 0$ implies $\dot{x}_1(t) = A_{11}x_1(t)$, and the system has solutions of the form $x_1(t) = e^{A_{11}t}x_1(0)$, it proves that all small solutions with respect to x_1 are trivial.

Conclusion. In this paper we investigated the problem of relative weak observability of nontrivial small solutions of the hybrid differential-difference (HDR) systems. Weak observability of nontrivial small solution with respect to x_2 and x_1 are considered. Strong small solutions are defined and weak observability of nontrivial strong small solutions with respect to x_2 is established. Other types of observability and relations between these types of observability are discussed.

References

1. Марченко, В. М. Некоторые нерешенные задачи в теории управляемых динамических ГДР систем / В. М. Марченко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2006. – Вып. XIV. – С. 3–6.

2. Marchenko, V. M. Observability of small solutions of linear differential-algebraic systems with delays / V. M. Marchenko, Z. Zaczkiewicz // Control and Cybernetics. – 2006. – Vol. 35, № 4. – P. 997–1013.

3. Henry, D. Small Solutions of Linear Autonomous Functional Differential Equations / D. Henry // J. Differential Equations. – 1970. – Vol. 8. – P. 494–501.

4. Kappel, F. Laplace transform methods and linear autonomous functional differential equations / F. Kappel // Math. Institur, Univ. Graz, Bericht. – 1976. – № 64.

5. Verduyn Lunel, S. M. A Sharp Version of Henry's Theorem on Small Solutions / S. M. Verduyn Lunel // J. Differential Equations. – 1986. – Vol. 62, № 2. – P. 266–274.

6. Manitius, A. F-controlability and observability of linear retarded systems / A. Manitius // Appl. Math. Optim. – 1982. – Vol. 9. – P. 73–95.

7. Salamon, D. On controllability and observability of time delay systems / D.Salamon // IEEE Trans. Automat. Contr. – 1984. – Vol. 29. – P. 432–439.

УДК 517.929

Т. Б. Копейкина, доцент; А. С. Гусейнова, ассистент

УПРАВЛЯЕМОСТЬ СТАЦИОНАРНЫХ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННЫХ СИСТЕМ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

The controllability problem of time-invariant singularly perturbed dynamic systems with constant delay (SPSD) is considered in this paper. Decomposition of controllability property for (n_1+n_2)-SPSD by means of the controllability of degenerated n_1-system and boundary layer n_2-system is obtained for new condition on the parameters of SPDS under consideration. Controllability conditions for these systems are proved which are affective and expressed through the solutions of recurrence algebraic equations. The example of the five-order system is considered and controllability conditions are obtained for it.

Введение. Проблемы управляемости и наблюдаемости объектов, поведение которых описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с постоянными коэффициентами, впервые были решены американским математиком Р. Калманом в 1960 г. Эти проблемы, как и прежде, играют центральную роль в современной теории управления, в частности, при исследовании управляемости функционально-дифференциальных, сингулярно возмущенных систем (СВС), т. е. объектов, составляющие которых обладают существенно различными скоростями, СВС с запаздыванием (СВСЗ).

Известно, что во многих задачах динамики полета, химической кинетики, автоматического управления и регулирования условие управляемости является необходимым условием существования решения исследуемых задач. Проблеме управляемости стационарных и нестационарных СВС с различными видами запаздываний (малыми, постоянными, зависящими от времени) и без запаздываний в последние годы посвящен ряд работ как отечественных, так и зарубежных ученых [1–4]. Возросшее внимание к СВС объясняется широким спектром их приложения. Достаточно хорошо изучена управляемость стационарных СВС. Очевидно, однако, что СВСЗ наиболее адекватно отражают наличие задержек в работе исследуемых объектов. Такие объекты описываются, например, линейными стационарными СВС с запаздыванием (ЛССВСЗ) вида

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= A_{11}x(t) + A_{12}x(t-h) + \\ &+ C_{11}y(t) + C_{12}y(t-h) + B_1u(t), \\ \mu\dot{y}(t) &= A_{21}x(t) + A_{22}x(t-h) + \\ &+ C_{21}y(t) + C_{22}y(t-h) + B_2u(t) \end{aligned} \qquad (1)$$

как в медленных x, так и в быстрых y переменных. В (1) $\{x(t), y(t)\}-(n_1+n_2)$-вектор состояния системы в момент времени t; $t\in[0, T]$ $x(t)\in R^{n_1}$, $y(t)\in R^{n_2}$, u – управляющее воздействие из класса кусочно-непрерывных r-вектор-функций ($u\in PC([0,T], R^r)$, называемое далее *допустимым*; A_{ij}, C_{ij}, B_j, $i, j=1,2$ – заданные постоянные матрицы соответствующих размеров; μ – малый положительный параметр, $\mu\in\left(0, \mu^0\right]$, $\mu^0 << 1$; h – запаздывание, $h=\text{const}>0$.

Ранее задача относительной управляемости (ОУ) ЛССВСЗ (1) исследовалась либо в предположении $C_{22}=0_{n_2}$, где 0_{n_2} – квадратная $(n_2\times n_2)$-матрица с нулевыми элементами, либо при условии $\det C_{21}\neq 0$ [1]. В данной работе рассматривается ОУ ЛССВСЗ (1) по x, по y, по совокупности переменных $\{x, y\}$ при *новом*, достаточно общем предположении относительно параметров системы: $\det(C_{21}+mC_{22})\neq 0$.

При исследовании качественных свойств СВС (наблюдаемости, управляемости и др.) важно иметь условия, при которых данные свойства обладают *декомпозицией*, позволяющей, например, судить об управляемости (n_1+n_2)-ЛССВСЗ (1) на основании некоторых подсистем меньшего порядка. Такими тесно связанными с ЛССВСЗ (1) являются вырожденная n_1-система (ВС) и n_2-система пограничного слоя (СПС). Поэтому сначала доказаны критерии (т. е. необходимые и достаточные условия) ОУ как ВС, так и СПС, связанных с ЛССВСЗ (1), а затем – достаточные условия ОУ ЛССВСЗ (1), выраженные через условия ОУ ВС и СПС. Все полученные результаты носят эффективный характер, поскольку выражены через решения матричных рекуррентных *определяющих уравнений.*

Вспомогательные результаты. Рассмотрим ЛССВСЗ (1), решение которой определяется начальными условиями

$$\begin{aligned} x(0, \mu) &= \{\varphi(\theta), x(0)=x_0\}, \\ y(0, \mu) &= \{\psi(\theta), y(0)=y_0\}, \quad \theta\in[-h, 0), \end{aligned} \qquad (2)$$

где $\varphi\in PC([-h, 0), R^{n_1})$, $\psi\in PC([-h, 0), R^{n_2})$ – кусочно-непрерывные n_1- и n_2-вектор-функции на $[-h, 0)$, $x_0\in R^{n_1}$, $y_0\in R^{n_2}$.

Приведем определение и ряд лемм, необходимых для доказательства условий ОУ ЛССВСЗ (1), (2).

Определение. ЛССВСЗ (1), (2) при заданном μ называется относительно управляемой на отрезке $[0, T]$ по медленной переменной x (по быстрой переменной y; по совокупности

переменных $\{x, y\}$), если для любого вектора $c_1 \in R^{n_1}$ (любого вектора $c_2 \in R^{n_2}$; любых векторов $c_1 \in R^{n_1}$, $c_2 \in R^{n_2}$) и любых начальных условий (2) существует допустимое управление $u(t)$, $t \in [0, T]$, такое, что соответствующая им компонента $x(t, \mu) = x(t, \mu; x, \varphi; y, \psi; u)$, $t > 0$, (компонента $y(t, \mu) = y(t, \mu; x, \varphi; y, \psi; u)$, $t > 0$; компоненты $x(t, \mu)$, $y(t, \mu)$, $0\rangle$ решения $\{x(t, \mu), y(t, \mu)\}$, $t > 0$, удовлетворяет условию $x(T, \mu) = c_1$ (условию $y(T, \mu) = c_2$; условиям $x(T, \mu) = c_1$, $y(T, \mu) = c_2$).

Для решения задачи ОУ ЛССВСЗ (1) представим ее в операторной форме

$$\begin{aligned} p\,x(t) &= (A_{11} + A_{12}e^{-ph})x(t) + \\ &+ (C_{11} + C_{12}e^{-ph})y(t) + B_1 u(t), \\ \mu\, py(t) &= (A_{21} + A_{22}e^{-ph})x(t) + \\ &+ (C_{21} + C_{22}e^{-ph})y(t) + B_2 u(t), \end{aligned} \tag{3}$$

где p – оператор дифференцирования, $p \equiv d/dt$; e^{-ph} – оператор сдвига аргумента функции на величину h: $e^{-ph}z(t) \equiv z(t-h)$.

Известно [1], что об ОУ $(n_1 + n_2)$-ЛССВСЗ (1), (2) можно судить на основании того, являются ли ОУ две системы меньшей размерности: вырожденная ($\mu = 0$) n_1-система и n_2-СПС. Поэтому прежде чем изучать проблему ОУ ЛССВСЗ (1), найдем вид ее ВС, СПС и получим условия их ОУ. Затем определим связь этих условий с условиями ОУ ЛССВСЗ (1).

Формальное решение ЛССВСЗ (1) ищем, согласно [5], как представление вектор-функции $z(t, \mu) \equiv \{x(t, \mu), y(t, \mu)\} \in R^{n_1+n_2}$ в виде суммы слагаемых в различных временных шкалах:

$$z(t, \mu) = z_s(t) + z_f(\tau), \quad \tau = \frac{t}{\mu}. \tag{4}$$

В (4) τ – «быстрое» время, компоненты $x(t, \mu), y(t, \mu)$ $(n_1 + n_2)$-вектор-функции $z(t, \mu)$ имеют вид $x(t, \mu) = x_s(t) + x_f(\tau)$, $y(t, \mu) = y_s(t) + y_f(\tau)$, где $x_s(t)$, $x_f(\tau)$ – соответственно медленная и быстрая составляющие медленной переменной $x(t, \mu)$, а $y_s(t)$, $y_f(\tau)$ – быстрой переменной $y(t, \mu)$ решения $\{x(t, \mu), y(t, \mu)\}$ системы (1). Будем искать допустимое управление $u(t, \mu)$, обеспечивающее ОУ ЛССВСЗ (1), (2), также в виде $u(t, \mu) = u_s(t) + u_f(\tau)$.

Положив в (3) $\mu = 0$, получим гибридную [6] систему относительно медленных переменных x_s, y_s, u_s, которая при условии обратимости неограниченного оператора $C_{21} + C_{22}e^{-ph}$ позволяет представить $y_s(t)$ в виде

$$\begin{aligned} y_s(t) &= -(C_{21} + C_{22}e^{-ph})^{-1} \times \\ &\times (A_{21} + A_{22}e^{-ph})x_s(t) + B_2 u_s(t). \end{aligned} \tag{5}$$

Подставив (5) в первое уравнение (3) получим n_1-систему дифференциальных уравнений

$$\dot{x}_s(t) = A(e^{-ph})x_s(t) + B(e^{-ph})u_s(t) \tag{6}$$

относительно $x_s(t)$ с параметрами

$$\begin{aligned} A(e^{-ph}) &= A_{11} + A_{12}e^{-ph} - \\ &- (C_{11} + C_{12}e^{-ph})(C_{21} + C_{22}e^{-ph})^{-1} \times \\ &\times (A_{21} + A_{22}e^{-ph}), \\ B(e^{-ph}) &= B_1 - (C_{11} + C_{12}e^{-ph}) \times \\ &\times\ C_{21}(+ C_{22}e^{-ph})^{-1} B_2. \end{aligned} \tag{7}$$

В силу теоремы Гамильтона – Кэли [7] любая квадратная $(n \times n)$-матрица A удовлетворяет своему характеристическому уравнению $\det(\lambda E_n - A) = 0$

$$\begin{aligned} A^n - \alpha_1 A^{n-1} + \ldots + (-1)^{n-1}\alpha_{n-1}A + \\ + (-1)^n \alpha_n E_n = 0_n. \end{aligned} \tag{8}$$

Коэффициенты α_k, $k = \overline{1, n}$ в (8) вычисляются по формуле

$$\alpha_k = \sum_{1 \le i_1 < \ldots < i_k \le n} A\begin{pmatrix} i_1 \ldots i_k \\ i_1 \ldots i_k \end{pmatrix}, \quad k = \overline{1, n}, \tag{9}$$

где запись $\alpha_k = \sum_{1 \le i_1 < \ldots < i_k \le n} A\begin{pmatrix} i_1 \ldots i_k \\ i_1 \ldots i_k \end{pmatrix}$ означает сумму главных миноров порядка k матрицы A. Из очевидного тождества $(C_{21} + mC_{22})^{-1} \times \times (C_{21} + mC_{22}) = E_{n_2}$ и (8) следует представление обратной матрицы $(C_{21} + mC_{22})^{-1}$ в виде

$$\begin{aligned} (C_{21} + mC_{22})^{-1} &= \frac{(-1)^{n_2-1}}{\alpha_{n_2}}((C_{21} + mC_{22})^{n_2-1} - \\ &- (\alpha_1\ C_{21} + mC_{22})^{n_2-2} + \ldots + (-1)^{n_2-1}\alpha_{n_2-1}E_{n_2}). \end{aligned} \tag{10}$$

Очевидно, в силу (9) $\alpha_{n_2} = \det(C_{21} + mC_{22})$.

Лемма 1. Пусть $A, C \in R^{n \times n}$, $n \ge 1$. Тогда

$$\begin{aligned} &\det(A + mC) = \\ &= \sum_{i=0}^{n} m^i \sum_{1 \le l_1 < \ldots < l_i \le n} \det A_{[iC]}^{(l_1, \ldots, l_i)}, \end{aligned} \tag{11}$$

где запись $\det A_{[iC]}^{(l_1, \ldots, l_i)}$ означает замену i столбцов с номерами $l_1, \ldots, l_i$ в матрице A соответствующими столбцами матрицы C.

В лемме 1 по определению полагаем $\sum_{1 \le l_1 < l_0 \le 1} \det A_{[0C]}^{(l_0)} = \det A_{[0C]}^{(0)} = \det A$.

Доказательство этой леммы и леммы 2 проводится методом математической индукции по n и здесь опускается.

Замечание. В данной работе решение задачи ОУ ЛССВСЗ (1), (2) рассматривается при условии $\alpha_{n_2} \equiv \text{const} \neq 0$ в (10). Нетрудно показать, что из равенства (11) леммы 1 это предположение равносильно следующим трем условиям:

$$\det C_{21} \neq 0, \quad \det C_{22} = 0,$$
$$\sum_{1 \le l_1 < \ldots < l_i \le n_2} \det C_{21[iC_{22}]}^{(l_1, \ldots, l_i)} = 0, \quad \forall i = \overline{1, n_2}. \quad (12)$$

Лемма 2. Пусть $A, C \in R^{n \times n}$. Тогда для любого $k \le n$ коэффициенты α_k, $k = \overline{1, n}$ матричного уравнения

$$(A + mC)^n -$$
$$-(\alpha_1 \ A + mC)^{n-1} + \ldots + (-1)^n \alpha_n E_n = 0_n \quad (13)$$

определяются по формуле

$$\alpha_k = \sum_{1 \le i_1 < \ldots < i_k \le n} (A + mC) \begin{pmatrix} i_1 \ldots i_k \\ i_1 \ldots i_k \end{pmatrix} =$$
$$= \sum_{1 \le l_1 < \ldots < l_k \le n} \sum_{j=0}^{k} m^j \sum_{1 \le l_1 < \ldots < l_j \le k} \det A_{[jC]}^{(l_1, \ldots, l_j)} \begin{pmatrix} l_1 \ldots l_k \\ l_1 \ldots l_k \end{pmatrix}, (14)$$

где $\sum_{1 \le l_1 < \ldots < l_j \le k} \det A_{[jC]}^{(l_1, \ldots, l_j)} \begin{pmatrix} l_1 \ldots l_k \\ l_1 \ldots l_k \end{pmatrix}$ – главные миноры порядка k матрицы A, в которых j столбцов заменены соответствующими столбцами матрицы C.

С учетом (12) формулу (11) можно записать иначе:

$$(C_{21} + mC_{22})^{-1} =$$
$$= \frac{(-1)^{n_2 - 1}}{\det C_{21}} \sum_{i=1}^{n_2 - 1} (-1)^i \alpha_i (C_{21} + mC_{22})^{n_2 - i - 1}, \quad (15)$$

где вид коэффициентов α_i представлен в следующей лемме.

Лемма 3 [8]. Пусть $A, C \in R^{n \times n}$. Тогда для любого $k \ge 0$ справедливо равенство

$$(A + mC)^k = \sum_{i=0}^{k} m^i V_k(ih), \quad (16)$$

где m – числовой параметр, $m > 0$; $V_k(ih)$ – решения матричного рекуррентного уравнения (*определяющего уравнения*)

$$V_{k+1}(ih) = AV_k(ih) + CV_k((i-1)h),$$
$$i = 0, 1, 2, \ldots, \quad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

с начальными условиями

$$V_0(0) = E_n, \quad V_0(ih) = 0_n, \quad i \neq 0.$$

Введем обозначение:

$$\xi_{ij} = \sum_{1 \le l_1 < \ldots < l_i \le n_2} \sum_{1 \le l_1 < \ldots < l_j \le i} \det C_{21[jC_{22}]}^{(l_1, \ldots, l_j)} \begin{pmatrix} l_1 \ldots l_i \\ l_1 \ldots l_i \end{pmatrix}.$$

Заметим, что $\xi_{00} = 1, \xi_{0j}$ @$0, \ j > 0$. С учетом условий (12) и (14) из (15) получаем еще одно представление обратной матрицы:

$$(C_{21} + mC_{22})^{-1} =$$
$$= \frac{(-1)^{n_2 - 1}}{\det C_{21}} \sum_{i=1}^{n_2 - 1} m^i \sum_{j=0}^{i} \sum_{k=0}^{n_2 - 1} (-1)^k \xi_{kj} V_{n_2 - 1 - k}((i-j)h). (17)$$

С помощью (17) можно найти аналитическое представление ВС (6) с коэффициентами

$$A(e^{-ph}) = \sum_{i=0}^{n_2 + 1} L_i e^{-iph}, \ B \ e^{-(ph)} = \sum_{i=0}^{n_2 + 1} D_i e^{-iph}, \quad (18)$$

где

$$L_0 = A_{11} + N_0, \ L_1 = A_{12} + N_1$$
$$L_i = N_i, \ \overline{i = 2, n_2 + 1},$$

$$N_i = \frac{(-1)^{n_2 - 1}}{\det C_{21}} \sum_{q=1}^{2} \sum_{l=1}^{2} \sum_{j=0}^{i+l+q-2} \sum_{k=0}^{n_2 - 1} (-1)^k \xi_{kj} C_{1l} \times$$
$$\times V_{n_2 - 1 - k}\big(i + l + q - 2 - j)h\big) A_{2q}, \quad (19)$$
$$(\overline{i = 0, \ n_2 + 1}) \vee (i + l + q - 2 \le n_2 - 1),$$

$$D_0 = B_1 + \frac{(-1)^{n_2 - 1}}{\det C_{21}} \sum_{k=0}^{n_2 - 1} (-1)^k \xi_{k0} C_{11} V_{n_2 - 1 - k}(0) B_2,$$

$$D_i = \frac{(-1)^{n_2 - 1}}{\det C_{21}} \times$$
$$\times \sum_{l=1}^{2} \sum_{j=0}^{i+l-1} \sum_{k=0}^{n_2 - 1} (-1)^k \xi_{kj} C_{1l} V_{n_2 - 1 - k}\big((i + l - j - 1)h\big) B_2, (20)$$
$$\big(i = \overline{1, n_2}\big) \vee (i + l - 1 \le n_2 - 1), \ D_{n_2 + 1} \equiv 0_{n_2}.$$

Подставляя (18) в (6) получим

$$\dot{x}_s(t) = \sum_{i=0}^{n_2 + 1} L_i e^{-iph} x_s(t) + \sum_{i=0}^{n_2 + 1} D_i e^{-iph} u_s(t), \quad (21)$$

т. е. аналитическое представление вырожденной n_1-системы для $(n_1 + n_2)$-ЛССВСЗ (1). Очевидно, (21) представляет собой дифференциальную систему с $(n_2 + 1)$-кратным временным запаздыванием в состоянии и n_2-кратным (в силу $D_{n_2 + 1} \equiv 0_{n_2}$) запаздыванием в управлении. Для однозначного определения движения системы (21) при $t > 0$ необходимо иметь начальные условия для $x_s(t)$, $t \in [-(n_2 + 1)h, \ 0]$, $u_s(t)$, $t \in [-n_2 h, \ 0]$, которые определяются из (2):

$$x_{0s}(\cdot) = \{\varphi(\theta), \ \theta < 0, \ x_s(0) = x_{0s}\},$$
$$u_s(t) \equiv 0, \ t < -(n_2 + 1)h, \quad (22)$$

где $\varphi(\theta)$, $u_s(t)$ – кусочно-непрерывные n_1- и r-вектор-функции соответственно.

Найдем аналитический вид СПС, соответствующей ЛССВСЗ (1). Как показано в [1],

уравнение для n_2-СПС ЛССВСЗ (1) получается путем «замораживания» медленных переменных $x_s(t)$ в уравнении быстрых движений исходной ЛССВСЗ (1) и введения нового «быстрого» времени $\tau = t/\mu$. Это уравнение имеет вид

$$\frac{dy_f(\tau)}{d\tau} = C_{21}y_f(\tau) + \\ + C_{22}y_f(\tau - h_1) + B_2u_f(\tau), \qquad (23)$$

$$h_1 = \frac{t}{\mu}, \quad \tau \in \left[0, \ \frac{T}{\mu}\right).$$

Начальные условия для (23) следуют из (2) с учетом (4) и (22):

$$y_{0f}(\cdot) = \{N_0\varphi(\theta) + \psi(\theta), \\ \theta \in [-h, \ 0), \ y(0) = N_0x_0 + y_0\}. \qquad (24)$$

Заметим, что СПС (23) является системой с бесконечно большим запаздыванием h_1 при $\mu \to 0$.

Решение задачи относительной управляемости. Введем невырожденную (для любых матриц S_i, R_i, $i = \overline{0, n_2}$) замену переменных [1]:

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = \\ = \begin{bmatrix} E_{n_2} & -\mu\sum_{i=0}^{n_2} S_i e^{-iph} \\ -\sum_{i=0}^{n_2} R_i e^{-iph} & E_{n_1} + \mu\sum_{i=0}^{n_2} R_i e^{-iph}\sum_{i=0}^{n_2} S_i e^{-iph} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \xi(t) \\ \eta(t) \end{pmatrix}. \qquad (25)$$

Данная замена позволяет выбрать неизвестные матрицы S_i, R_i, $i = \overline{0, n_2}$ таким образом, что полученные в силу (25) системы дифференциальных уравнений относительно $\xi(t)$, $\eta(\tau)$ являются системами с разделенными переменными с запаздыванием (СРПЗ):

$$\dot{\xi}(t) = \sum_{i=0}^{n_2+1}\left(L_i + O(\mu)\right)e^{-ph}\xi(t) + \\ + \sum_{i=0}^{n_2+1}(D_i + O(\mu))e^{-ph}u(t), \\ \mu\dot{\eta}(t) = (C_{21} + O(\mu))\eta(t) + \\ + (C_{22} + O(\mu))\eta(t - h) + B_2u(t), \qquad (26)$$

(соответственно с (n_2+1)-запаздыванием по состоянию и с одним запаздыванием по управлению) с начальными условиями

$$\xi_0(\cdot) = \{\varphi(\theta), \ \theta \in [-(n_2+1)h, 0), \ \xi(0) = x_0\}, \\ \eta_0(\cdot) = \{N_0\varphi(\theta) + \psi(\theta), \ \theta \in [-h, \ 0), \\ \eta(0) = N_0x_0 + y_0\}, \qquad (27)$$

где L_i, D_i, $i = \overline{0, n_2+1}$ имеют вид (19), (20).

Поскольку невырожденное преобразование (25) сохраняет все качественные свойства ЛССВСЗ (1), (2), далее вместо (1), (2) можно исследовать управляемость СРПЗ (26).

Очевидно, что невозмущенная система

$$\dot{\xi}(t) = \sum_{i=0}^{n_2+1} L_i e^{-iph}\xi(t) + \sum_{i=0}^{n_2+1} D_i e^{-iph}u(t) \qquad (28)$$

$$\dot{\eta}(\tau) = C_{21}\eta(\tau) + C_{22}\eta(\tau - h_1) + B_2u(\tau) \qquad (29)$$

с точностью до $O(\mu)$ совпадает с СРПЗ (26); n_1-система (28) с точностью до обозначений есть ВС (21), а n_2-система (29), полученная из (26) заменой $\tau = t/\mu$ – СПС (23). Критерии ОУ таких систем известны [9]: для ОУ системы (28) на отрезке $[0, T]$ необходимо и достаточно, чтобы

$$\operatorname{rank}\left\{X_k(s), k = \overline{1, n_1(n_2+2)}, s = \overline{0, (n_2+1)h}\right\} = n_1. \qquad (30)$$

В (30) $X_k(s) \in R^{n_1 \times r}$ – матричные решения определяющего уравнения

$$X_{k+1}(s) = \sum_{i=0}^{n_2+1} L_i X_k(s - ih) + \sum_{i=0}^{n_2+1} D_i U_k(s - ih), \qquad (31)$$

$$k = 0, 1, 2, ..., \quad s = 0, 1, 2, 3, ...,$$

системы (28) с начальными условиями

$$X_0(s) = 0_{n_1 \times r} \ \forall s, \ X_k(s) = 0_{n_1 \times r}, \\ U_k(s) = 0_r, \qquad (32.1)$$

$$\forall s < 0, \quad k = 1, 2, 3, ...,$$

$$U_0(s) = \begin{cases} E_r, & s = 0, \\ 0_r, & s \neq 0. \end{cases} \qquad (32.2)$$

Критерий ОУ системы (29) имеет вид

$$\operatorname{rank}\{Y_k(s), k = \overline{1, n_2}; s \in [0, (n_2+1)h_1]\} = n_2, \qquad (33)$$

где $Y_k(s) \in R^{n_2 \times r}$ – матричные решения определяющего уравнения

$$Y_{k+1}(s) = C_{21}Y_k(s) + , \\ + C_{22}Y_k(s - h_1) + B_2U_k(s) \qquad (34)$$

$$k = 0, 1, 2, ...,$$

с начальными условиями (32.2) и

$$Y_0(s) = 0_{n_2 \times r} \ \forall s, \ Y_k(s) = 0_{n_2 \times r}, U_k(s) = 0_r, \qquad (35)$$

$$\forall s < 0, \quad k = 1, 2, 3, ...,$$

Теорема 1 [1]. Если система (28) ОУ на $[0, T]$, т. е. выполнено условие (30), то существует $\mu^* > 0$ таке что для всех $\mu \in \left(0, \ \mu^*\right]$, СРПЗ (26), (27) ОУ по переменной ξ.

Из теоремы 1 и представления ЛССВСЗ (1), (2) в виде (26) следует теорема 2.

Теорема 2. Если (30) выполняется, то существует $\mu^* > 0$ такое что для всех $\mu \in \left(0, \mu^*\right]$, ЛССВСЗ (1), (2) ОУ на $[0, T]$ по медленной переменной x.

Теорема 3. Если система (29) ОУ на $\left[0, T/\mu\right]$, т. е. выполняется условие (33), то существует $\mu^* > 0$ такое, что для всех $\mu \in \left(0, \mu^*\right]$ система (26) ОУ по переменной η.

Поскольку (29) с точностью до обозначений совпадает с (23), то справедливо утверждение.

Теорема 4. Если выполняется (33), то существует $\mu^* > 0$ такое, что ЛССВСЗ (1), (2) ОУ по быстрой переменной y на $[0, T]$ для всех $\mu \in \left(0, \mu^*\right]$.

Теорема 5. Если выполнены условия (30), (33), то существует такое $\mu^* > 0$, что для всех $\mu \in \left(0, \mu^*\right]$ ЛССВСЗ (1), (2) ОУ на $[0, T]$ по совокупности переменных $\{x, y\}$.

Пример. На отрезке времени $[0; 3,5]$ рассмотрим ОУ системы

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_1(t) - 2x_1(t-1) + y_1(t) \\ \dot{x}_2 = x_2(t) - 2x_2(t-1) + u(t) \\ \mu\dot{y}_1 = x_1(t) - x_1(t-1) + y_1(t) + 2y_2(t) - y_1(t-1) \\ \mu\dot{y}_2 = x_2(t) + x_2(t-1) + y_2(t) - y_3(t) + y_2(t-1) \\ \mu\dot{y}_3 = 3y_1(t) - 3u(t) \end{cases} \quad (36)$$

по совокупности переменных $\{x, y\}$, где

$$x(t) = = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} \in R^2; \; y(t) = \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \\ y_3(t) \end{pmatrix} \in R^3.$$

Очевидно, (33) является ЛССВСЗ вида (1) с параметрами

$$\mathrm{A}_{11} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{A}_{12} = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix},$$

$$C_{11} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_{21} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_{22} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$C_{21} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 3 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_{22} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$B_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad B_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -3 \end{pmatrix},$$

$n_1 = 2, n_2 = 3; \; t \in [0; 3,5]; T = 3,5; h = 1.$

Проверим выполнение условий (30), (3 3) теоремы 5, которые для (36) имеют вид

$$\operatorname{rank}\left\{X_k(s), \; k = \overline{1, 10}, \; s = \overline{0, 4}\right\} = 2, \quad (37)$$

$$\operatorname{rank}\left\{Y_k(s), \quad k = \overline{1, 3}, \quad s \in [0, \frac{4}{\mu}]\right\} = 3, \quad (38)$$

где $X_k(s), Y_k(s)$ определяются по формулам (31), (32.1), (32.2); (34) , (35) ; $X_0(0) \overset{(32.1)}{=} 0_{2\times1}$; $Y_0(0) \overset{(35)}{=} 0_{3\times1}$, а $X_k(i) = 0_{2\times1}$, $Y_k(i\frac{4}{\mu}) = 0_{3\times1}$; $\forall i > k$, в силу свойств [1] определяющих уравнений. Так как

$$X_2(0) = L_0 D_0 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$X_2(1) = L_0 D_1 + L_1 D_0 = \begin{pmatrix} \frac{5}{3} \\ -2 \end{pmatrix},$$

$$X_2(2) = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ 0 \end{pmatrix},$$

где L_i, D_i вычислены по формулам (19), (20), то

$$\operatorname{rank}\begin{Bmatrix} -1 & \frac{5}{3} & \frac{1}{3} & \cdots \\ 1 & -2 & 0 & \ldots \end{Bmatrix} = 2.$$

Следовательно, система (36) управляема по x.

Проверим выполнение условия (38). Поскольку

$$Y_1(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -3 \end{pmatrix}, \; Y_2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}, \; Y_3(0) = \begin{pmatrix} 6 \\ 3 \\ 6 \end{pmatrix},$$

то

$$\operatorname{rank}\begin{Bmatrix} 0 & 0 & 6 & \cdots \\ 0 & 3 & 3 & \cdots \\ -3 & 0 & 6 & \cdots \end{Bmatrix} = 3,$$

т. е. (36) управляема по y. Объединение полученных условий в силу теоремы 5 означает ОУ системы (36) по $\{x, y\}$.

Заключение. Исследована относительная управляемость ЛССВСЗ при новом условии на параметры системы. Получены достаточные условия ОУ по медленной переменной x, по быстрой переменной y, по совокупности

переменных $\{x, y\}$, выраженные через решения соответствующих определяющих уравнений.

Литература

1. Копейкина, Т. Б. Об управляемости линейных сингулярно возмущенных систем с запаздыванием / Т. Б. Копейкина // Дифференциальные уравнения. – 1989. – Т. 25, № 9. – С. 1508–1518.

2. Kopeikina, T. B. Some approaches to the controllability investigation of singularly perturbed dynamic systems / T. B. Kopeikina // Systems Science. – 1995. – Vol. 21, № 1. – P. 17−36.

3. Glizer, V. Y. Controllability of nonstandard singularly perturbed systems with small state delay / V. Y. Glizer // IEEE Trans. Automat. Control. – 2003. – Vol. 48, № 34. – P. 1280−1285.

4. Копейкина, Т. Б. Об управляемости линейных сингулярно возмущенных систем с малым запаздыванием / Т. Б. Копейкина, А. С. Гусейнова // Вестник БНТУ. – 2006. – № 4. − С. 54−58.

5. Васильева, А. Б. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений / А. Б. Васильева, В. Ф. Бутузов. – М.: Наука, 1973. – 242 с.

6. Марченко, В. М. Представление решений управляемых гибридных систем / В. М. Марченко, О. Н. Поддубная // Проблемы управления и теории информации. – 2002. – Т. 149, № 6. – С. 17–25.

7. Гантмахер, Ф. Р. Теория матриц / Ф. Р. Гантмахер. – М.: Наука, 1988. – 552 с.

8. Марченко, В. М. Об одном доказательстве критерия управляемости для систем с запаздывающим аргументом нейтрального типа / В. М. Марченко // Вестник БГУ. Сер. 1. − 1972. – Т. 3. – С. 11–13.

9. Controllability and observability of multivariable systems with delay / F. M. Kirillova [et al.] // IFAC Symp. on Multivariable Technical Control Systems. Techn. papers. Dusseldorf, FRG. − 1971. − P. 1−6.

УДК 514.144.12

Н. П. Можей, доцент

ОРБИТАЛЬНЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ГРУПП АФФИННЫХ И ПРОЕКТИВНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ

This paper is devoted to the study of locally transitive affine and projective actions in low dimensions. We classify locally transitive subalgebras in the Lie algebra of three-dimensional affine and projective spaces. We pick those of these subalgebras that have finitely many orbits and find their decompositions into orbits. Also, a classification of finite orbit decompositions of connected affine transformation groups in space is obtained.

Введение. В конце прошлого века Софус Ли создал теорию «непрерывных групп преобразований», из которой выросло направление, названное теперь теорией групп Ли. Понятие действия группы Ли было отправной точкой исследований Софуса Ли, которые привели к созданию теории, носящей теперь его имя. Софусом Ли была получена, в частности, классификация аналитических локальных действий групп Ли на открытых подмножествах пространств R^n и C^n при $n = 1, 2$ [1, 2].

Темой настоящей работы является описание локально-транзитивных аффинных действий на R^3 и проективных на RP^3, т. е. описание связных локально-транзитивных подгрупп группы Ли $\mathrm{Aff}(3, R) = GL(3, R) \times R^3$ и, соответственно, группы $SL(4, R)$, а также описание их орбитальных разложений.

Основная часть. Гомоморфизм α группы Ли G в группу диффеоморфизмов многообразия M называется ее *действием* на M, если отображение

$$G \times M \to M, \quad (g, x) \mapsto \alpha(g)x$$

дифференцируемо.

Например, естественное действие $SL(n, P)$ в проективном пространстве является действием в смысле теории групп Ли (в дальнейшем под полем P будем подразумевать R или C).

Любой гомоморфизм $f: G \to GA(S)$ можно рассматривать как действие группы Ли G на аффинном пространстве S (здесь GA – полная аффинная группа).

В работах Софуса Ли изучаются группы, состоящие из локальных аналитических диффеоморфизмов, а не действия абстрактно заданных групп Ли.

Локальным действием группы G на многообразии M называется дифференцируемое отображение $f: W \to M$, где W – открытое подмножество в $G \times M$, содержащее $\{e\} \times M$ и удовлетворяющее свойствам действия на области определения этих свойств.

Пусть заданы два локальных действия: f – действие группы G на многообразии M и f' – действие группы G' на многообразии M'. Эти действия являются *локально подобными*, если существуют такие открытые подмножества U в M и U' в M', что локализации действий f на U и f' на U' подобны (т. е. существуют локальный изоморфизм групп Ли $h: G \to G'$ и диффеоморфизм $\varphi: U \to U'$, такие что

$$f'(h(g), \varphi(x)) = \varphi(f(g, x))$$

для всех $g \in G$, $x \in U$, для которых определены обе части). Если $G = G'$ и $h = \mathrm{id}$, то мы имеем *локально изоморфные локальные действия* f и f'. Если $G = G'$, а изоморфизм h внутренний (т. е. для некоторого $a \in G$ имеем $g \mapsto aga^{-1}$), то локально подобные действия будут локально изоморфны, а их локальный изоморфизм, заданный на открытом подмножестве в U, имеет вид

$$\psi: x \mapsto f'(a, \varphi(x)).$$

При классификации локальных действий удобен переход к инфинитезимальному языку. Локальное действие группы Ли G на многообразии M однозначно определяется действием касательной алгебры Ли $\mathfrak{g}$ на M, причем локальные действия групп Ли являются локально подобными тогда и только тогда, когда подобны соответствующие действия алгебр Ли (аналогичное утверждение верно для локально изоморфных локальных действий).

Описание подгрупп аффинной группы сводится к описанию локально-транзитивных подалгебр алгебры Ли $\mathfrak{aff}(3, R) = \mathfrak{gl}(3, R) \times R^3$ (с точностью до группы Aff(3, R)). Описание подгрупп группы Ли Aff(2, R) проделано, например, в [3].

Множество всех подалгебр алгебры Ли $\mathfrak{aff}(3, R)$ находится во взаимно однозначном соответствии с множеством троек $(\mathfrak{a}, W, \omega)$, где $\mathfrak{a}$ – подалгебра алгебры Ли $\mathfrak{gl}(3, R)$; W – подпространство в $V = R^3$, инвариантное относительно $\mathfrak{a}$; ω: $\mathfrak{a} \to V / W$ – такое линейное отображение, что $\omega([x, y]) = x.\omega(y) - y.\omega(x)$ для всех $x, y \in \mathfrak{a}$ [4]. Элементы ω есть элементы $Z^1(\mathfrak{a}, V / W)$ – пространства 1-коциклов алгебры Ли $\mathfrak{a}$ с коэффициентами в V / W.

На множестве всех подалгебр действует группа Aff(3, R). Множество подалгебр алгебры Ли $\mathfrak{aff}(3, R)$ с точностью до этой группы находится во взаимно однозначном соответствии с множеством троек $(W, \mathfrak{a}, \omega)$, где $\omega \in H^1(\mathfrak{a}, V / W)$ [4].

Классифицируем подалгебры алгебры Ли $\mathfrak{aff}(3, R)$ с точностью локального подобия следующим образом.

1. Опишем подпространства W пространства V с точностью до действия группы $GL(3, \mathrm{R})$.

2. Для каждого такого подпространства W опишем все подалгебры $\mathfrak{a}$ алгебры Ли $\mathfrak{gl}(3, \mathrm{R})$, сохраняющие W, с точностью до сопряженности относительно преобразований полной линейной группы, сохраняющих W.

3. Для каждой такой подалгебры $\mathfrak{a}$ опишем элементы пространства $\mathrm{H}^1(\mathfrak{a}, V / W)$ с точностью до естественного действия группы всех преобразований из полной линейной группы, сохраняющих подпространство W.

Поскольку нас интересуют только локально-транзитивные подалгебры, то при классификации в каждом случае будем учитывать требование локальной транзитивности.

Получив классификацию локально-транзитивных аффинных подалгебр, изучим их орбитальные разложения. Выберем из полученных орбитальных разложений те, которые имеют конечное число орбит и не переводятся друг в друга аффинными преобразованиями. Для плоскости классификация конечных орбитальных разложений была проделана в [5].

Пусть $\{O_1, \ldots, O_p\}$ – набор орбит. Обозначим через x, y, z координаты в A^3. Каждую орбиту O_i на пространстве A^3 будем описывать при помощи системы соотношений вида

$$(f_{i1}(x, y, z) = 0) \wedge \ldots \wedge (f_{il}(x, y, z) = 0) \wedge$$

$$(f_{il+1}(x, y, z) > 0) \wedge \ldots \wedge (f_{ik}(x, y, z) > 0),$$

$1 \le k$, $f_{i1}, \ldots, f_{ik}$ – дифференцируемые функции. Точка m пространства A^3 принадлежит орбите O_i тогда и только тогда, когда ее координаты удовлетворяют данной системе. Орбитальное разложение для алгебры (группы) Ли аффинных преобразований будем записывать в следующем виде:

$$(m \in O_1) \vee (m \in O_2) \vee \ldots \vee (m \in O_p).$$

Теорема. Связная группа Ли аффинных преобразований, действующая на аффинном пространстве A^3 с конечным числом орбит, имеет одно из следующих аффинно неизоморфных орбитальных разложений:

1. $(x = 0 \vee x > 0 \vee x < 0) \wedge (y = 0 \vee y > 0 \vee y < 0) \wedge (z = 0 \vee z > 0 \vee z < 0)$.

2. $(z = 0 \vee z > 0 \vee z < 0) \wedge (x = y = 0 \vee x^2 + y^2 \neq 0)$.

3. $(x = 0 \vee x > 0 \vee x < 0) \wedge y = z = 0 \vee (y > 0 \vee y < 0) \wedge z = 0 \vee (z > 0 \vee z < 0)$.

4. $(x = 0 \vee x > 0 \vee x < 0) \wedge y = z = 0 \vee (y > 0 \vee y < 0) \wedge z = 0 \vee (2zx = y^2 \vee 2zx < y^2 \vee 2zx > y^2) \wedge (z > 0 \vee z < 0)$.

5. $(y = 0 \vee y > 0 \vee y < 0) \wedge z = 0 \wedge (x = 0 \vee x > 0 \vee x < 0) \vee (y = 0 \vee y > 0 \vee y < 0) \wedge (z > 0 \vee z < 0)$.

6. $(y = 0 \vee y > 0 \vee y < 0) \wedge (x = 0 \vee x > 0 \vee x < 0) \vee (z > 0 \vee z < 0)$.

7. $y = z = 0 \wedge (x = 0 \vee x > 0 \vee x < 0) \vee (y = 0 \vee y > 0 \vee y < 0) \wedge (z > 0 \vee z < 0) \vee (y > 0 \vee y < 0) \wedge z = 0$.

8. $(x = 0, z = y = 0) \vee (yz = x^2, y > 0, z > 0) \vee (yz = x^2, y < 0, z < 0) \vee (yz > x^2, y > 0, z > 0) \vee (yz > x^2, y < 0, z < 0) \vee (yz < x^2)$.

9. $(x = y = z = 0) \vee (x^2 + y^2 + z^2 \neq 0)$.

10. $(x = y = z = 0) \vee z > 0 \vee z < 0 \vee (z = 0, x^2 + y^2 \neq 0)$.

11. $(x = y = z = 0) \vee (x > 0, y = z = 0) \vee (x < 0, y = z = 0) \vee (y^2 + z^2 \neq 0)$.

12. $(x = 0 \vee x > 0 \vee x < 0) \wedge z = 0 \vee (z > 0 \vee z < 0) \wedge (x = yz \vee x < yz \vee x > yz)$.

13. $(y = 0 \vee y > 0 \vee y < 0) \wedge (z = 0 \vee z > 0 \vee z < 0)$.

14. $(x = 0 \vee x > 0 \vee x < 0) \wedge z = 0 \vee (z > 0 \vee z < 0)$.

15. $z = 0 \vee z > 0 \vee z < 0$.

16. $(y = 0 \vee y > 0 \vee y < 0) \wedge (x = z^2 \vee x > z^2 \vee x < z^2)$.

17. $z = 0 \wedge (x = y^2 \vee x > y^2 \vee x < y^2) \vee (z > 0 \vee z < 0)$.

18. $x = yz \vee x > yz \vee x < yz$.

19. $x = y^2 + z^2 \vee x < y^2 + z^2 \vee x > y^2 + z^2$.

20. $(x = y = 0) \vee (x^2 + y^2 \neq 0)$.

21. $y = z^2 \vee y < z^2 \vee y > z^2$.

22. $(x = yz - z^3 / 3) \vee (x < yz - z^3 / 3) \vee (x > yz - - z^3 / 3)$.

23. Все пространство A^3 – одна орбита.

Назовем *линейным* случай, когда каждая орбита в орбитальном разложении вкладывается в линейное подпространство той же размерности. В приведенной выше теореме линейными являются разложения 1, 2, 3, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 20, 23.

В разложениях 18, 19, 21, 22 орбитами являются поверхность (гиперболический параболоид, эллиптический параболоид, цилиндр с параболой в основании и поверхность Кэли соответственно), ее внутренность и внешность; в разложении 8 – точка, два конуса, их внутренности и внешность. В случаях 12, 16 и 4 орбитальные разложения получаются пересечением разложений 18, 21 и 8 с плоскостью, а именно: в случае 12 имеем две половинки гиперболических параболоидов, две их внутренности и две внешности, а также прямую пересечения параболоида и плоскости и две полуплоскости; в случае 16 получаем два полуцилиндра, две их внешности и две внутренности, а также плоскость, которая параболой разбивается на три орбиты; в случае 4 – две полупрямых пересечения полуконусов и плоскости по образующим конусов, два полуконуса без этих полупрямых, две их внешности и две внутренности, точку и две полуплоскости. В случае 17 парабола разбивает плоскость на три орбиты, а эта плоскость – в свою очередь, пространство на два полупространства. Это завершает описание всех орбитальных разложений.

Классифицируем теперь локально-транзитивные проективные действия на $\mathbb{R}P^3$, т. е. опишем связные локально-транзитивные подгруппы группы Ли $SL(4, \mathbb{R})$. Как сказано выше, это описание сводится к описанию локально-транзитивных подалгебр алгебры Ли $\mathfrak{sl}(4, \mathbb{R})$. Описание проводится с точностью до группы $SL(4, \mathbb{R})$, которая элемент $\varphi \in \mathfrak{sl}(4, \mathbb{R})$ переводит в элемент $g\varphi g^{-1}$, $g \in SL(4, \mathbb{R})$.

Опишем сначала локально-транзитивные подалгебры алгебры Ли $\mathfrak{sl}(4, \mathbb{R})$, действие которых сводится к аффинному. Пусть подгруппа в $SL(4, \mathbb{R})$ имеет трехмерное инвариантное подпространство. В некотором базисе ей соответствует некоторая подгруппа $\mathrm{Aff}(3, \mathbb{R})$, причем все подгруппы в $SL(4, \mathbb{R})$, сохраняющие трехмерное подпространство инвариантным, в некотором базисе имеют именно такой вид.

Группа должна действовать локально транзитивно, следовательно, существует открытое множество U, на котором группа действует транзитивно. Тогда она действует транзитивно и на открытом множестве

$$U \mid \{x_1 : x_2 : x_3 : 0\}.$$

Не нарушая общности, можно продолжать рассуждения для локальной карты на пространстве $\mathbb{R}P^3$

$$(x_1 : x_2 : x_3 : x_4) \mapsto \left(\frac{x_1}{x_4}, \frac{x_2}{x_4}, \frac{x_3}{x_4}\right).$$

Каждому проективному действию, сохраняющему трехмерное инвариантное подпространство, мы поставили в соответствие аффинное.

Классификация локально-транзитивных подалгебр алгебры $\mathfrak{sl}(4, \mathbb{R})$, имеющих трехмерное инвариантное подпространство, с точностью до подгруппы $\mathrm{Aff}(3, \mathbb{R})$ равносильна классификации аффинных подалгебр, которая была проделана ранее. Следовательно, чтобы описать подалгебры в $\mathfrak{sl}(4, \mathbb{R})$, сохраняющие трехмерное инвариантное подпространство, достаточно выбрать из подалгебр, соответствующих аффинным, несопряженные в группе проективных преобразований.

Проведем классификацию подалгебр, которые не сводятся к подалгебрам аффинной алгебры, т. е. не имеют трехмерных инвариантных подпространств (это означает, что подалгебра либо неразрешима, либо является вещественной формой разрешимой подалгебры, имеющей трехмерные инвариантные подпространства над полем $\mathbb{C}$).

Классифицируем неразрешимые подалгебры, не имеющие трехмерных инвариантных подпространств. Каждая неразрешимая подалгебра $\mathfrak{g}$ содержит полупростую подалгебру Леви $\mathfrak{a}$ (все полупростые подалгебры классифицированы); алгебра $\mathfrak{sl}(4, \mathbb{R})$ является $\mathfrak{a}$-модулем (относительно присоединенного представления) и разлагается в прямую сумму изотипных компонент; $\mathfrak{g}$ является прямой суммой своих пересечений с изотипными компонентами. Таким образом, чтобы определить $\mathfrak{g}$, найдем все подмодули каждой изотипной компоненты, составим их суммы и проверим, является ли полученное пространство алгеброй Ли.

Чтобы классифицировать разрешимые подалгебры, проверим для каждой найденной подалгебры, имеющей трехмерные инвариантные подпространства, содержит ли их ее вещественная форма. Это завершит классификацию.

Если проективная подалгебра имеет конечное число орбит, то соответствующая ей аффинная подалгебра также имеет конечное число орбит. Следовательно, в рассмотрении достаточно ограничиться проективными подалгебрами, у которых аффинные алгебры имеют конечное число орбит.

Заключение. Классифицированы локально-транзитивные аффинные и проективные действия на трехмерном пространстве, т. е. подалгебры алгебр аффинных и проективных преобразований, которые имеют открытые орбиты при действии на соответствующих пространствах. Проведено полное описание подалгебр полной аффинной алгебры и подалгебр проективной алгебры трехмерного пространства. Выделены подалгебры, действующие локально-транзитивно и, в особенности, имеющие конечное число орбит. Приведена классификация конечных орбитальных разложений.

Предложенная методика может быть использована для произвольной размерности.

Литература

1. Lie, S. Theorie der Transformationsgruppen / S. Lie, F. Engel. – Leipzig: Teubner, 1893. – 830 s.

2. Чеботатев, Н. Г. Теория групп Ли / Н. Г. Чеботатев. – М.; Л.: Гостехиздат, 1940. – 396 с.

3. Koch, R. M. On generating subgroups of the affine group in the plane by pairs of infinitesimal transformations / R. M. Koch, F. Lowenthal. – Rocky Mountain J. Math. – 1976. – Vol. 6, № 1. – P. 119–131.

4. Doubrov, B. Homogeneous surfaces in the three-dimensional affine geometry / B. Doubrov, B. Komrakov, M. Rabinovich. – Topology and geometry of submanifolds. River Edge: World Sci. – 1996. – Vol. 8. – P. 212–223.

5. Пясецкий, В. С. Конечные орбитальные разложения групп аффинных преобразований плоскости / В. С. Пясецкий // Вопросы теории групп и гомологической алгебры. – Ярославль: ЯГУ, 1988. – С. 155–157.

УДК 519.624

И. Ф. Соловьева, доцент

О МЕТОДАХ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ТРОЕША

In the given work for nonlinear boundary problems with small parameter at the senior derivative is constructed and researched the algorithm founded on a method of plural bilateral shooting. In the offered algorithm the initial boundary problem will be transformed to set of problems Cauchy. For the decision of problems Cauchy there is a wide set of methods of their numerical decision and the closing systems of the algebraic equations of the low order connected with them. The offered method of plural bilateral shooting receives the decision by known complexity of problem Troesh.

Введение. Граничная задача, поставленная Вейбелом Троешем, первоначально была связана с исследованием обжатия плазменного шнура давлением излучения. Из-за жестких ограничений решение не представляло особого физического интереса. Значительное внимание, проявленное к этой задаче в последние годы специалистами по численным методам, в основном объясняется тем, что она является хорошим тестом для проверки решения неустойчивых нелинейных граничных задач.

Постановка задачи. Рассмотрим сначала простой пример краевой задачи с условием в двух точках:

$$y'' = shy,\ \ y'(0) = 0,\ \ y(d) = c. \qquad (1)$$

Это уравнение получается из одномерного варианта эллиптического уравнения

$$V^2\varphi = ksh(q\varphi),$$

которое выводится из уравнения Пуассона – Больцмана. Если преобразовать уравнение (1) к нормальной форме, то получится следующая система уравнений первого порядка:

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = shy_1, \end{cases} \qquad (2)$$

где граничные условия будут иметь вид

$$y_2(0) = 0, \quad y_1(d) = c.$$

Учитывая, что исходная задача является эллиптической, то при пошаговом интегрировании системы дифференциальных уравнений (2) следует ожидать некоторой неустойчивости. Интегрирование вперед от $x = 0$ или назад от $x = d$ эквивалентно решению задачи Коши для эллиптического уравнения, а известно, что такой процесс неустойчив.

Уравнения (2) имеют решения экспоненциального вида, и на большом отрезке возрастающая экспоненциальная составляющая быстро становится доминирующей в численном решении. Следовательно, если провести интегрирование вперед, исходя из двух независимых наборов начальных данных при $x = 0$, то после прохождения некоторого отрезка окажется, что процесс интегрирования приводит фактически к одному и тому же решению. Если экспоненциальная составляющая нарастает слишком быстро, то решение может выйти за пределы разрядной сетки.

В данном случае возникающее затруднение не является непреодолимым, так как на не слишком большом отрезке интегрирования можно сравнительно просто получить решение, подавляя неустойчивость сшиванием решения в середине отрезка. Этот пример показывает общий источник трудностей, возникающих при использовании численных методов для краевых задач, которые часто имеют решения экспоненциального вида.

Более сложный вариант задачи подобного типа приводят Робертс и Шипман. Эта задача получила название задачи Троеша. В безразмерных переменных задача Троеша сводится к решению уравнения

$$y'' = ksh(ky), \qquad (3)$$

с граничными условиями

$$y(0) = 0, \quad y_1(1) = 1. \qquad (4)$$

Граничная задача вида (3), (4) имеет решение, которое хорошо себя ведет на отрезке $[0,1]$, если, например, $k = 1;\ 2$, однако, имеет полюс вблизи точки $x = 1$.

Например, в методе пристрелки производится интегрирование вперед от $x = 0$ с каким-либо образом выбранным значением $y'(0)$. Если оценка этого значения очень завышена, то полюс перемещается ближе к началу координат и может оказываться внутри отрезка интегрирования.

Решали задачу Троеша методом продолжения. Этот метод дает последовательный способ приближения к решению задачи.

Идея этих методов заключается в том, чтобы, используя известное решение в качестве начального приближения, найти решение для близкого значения параметра. Последовательно увеличивая каждый раз значение параметра на небольшую величину, можно получить искомое решение задачи.

Алгоритм метода множественной двусторонней пристрелки. Для решения граничной задачи вида (3), (4), лежащей в основе физической модели, описывающей процесс ограниче-

ния столба плазмы, предлагается метод множественной двусторонней пристрелки [1], алгоритм которого состоит в следующем.

1. Выбираем точки пристрелки:

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

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

2. Строим пристрелочные задачи Коши в прямом и обратном направлениях:

$$\begin{cases} u' = f(t,u),\ t \in J_{2j-1}^{(+)} = \{t_{2j-1} \le t \le t_{2j}\}, \\ u(t, y_{2j-1})\big|_{t=t_{2j-1}} = y_{2j-1}, \quad y_{2j-1} \in R^n, \end{cases} \tag{5}$$

$$\begin{cases} v' = f(t,v), \quad t \in J_{2j-1}^{(-)} = \{t_{2j-1j} \ge t \ge t_{2j-2}\}, \\ v(t, y_{2j-1})\big|_{t=t_{2j-1}} = y_{2j-1}, \quad y_{2j-1} \in R^n,\ j = \overline{1,m}, \end{cases} \tag{6}$$

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

3. Для полученных пристрелочных задач Коши составляем замыкающую систему уравнений вида

$$\begin{cases} u(t_{2j}, y_{2j-1}) - v(t_{2j}, y_{2j+1}) = 0, \quad j = \overline{1,m}, \\ g(v(t_0, y_1), u(t_{2m}, \gamma_{2m-1})) = 0. \end{cases} \tag{7}$$

4. Переписываем замыкающую систему вида (5) в операторной форме

$$H(z) = 0, \tag{8}$$

где

$$\begin{gathered} H : R^N \to R^N, \quad N = mn, \\ z = (y_1^T, y_2^T, ..., y_{2m-1}^T)^T. \end{gathered} \tag{9}$$

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

$$y_{2j-1}^* = y(t_{2j-1}),\ z^* = (y_1^{*T}, ..., y_{2m-1}^{*T})^T. \tag{10}$$

Тогда будет выполняться замыкающая система вида

$$H(z^*) = 0,$$

где z^* – искомое решение замыкающей системы уравнений (7).

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

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

Как уже было сказано, задача Троеша (3), (4) подробно изучалась, и ее в вычислительном отношении оценивают как достаточно сложную и трудоемкую.

Матрица Якоби для системы будет иметь вид

$$\frac{\partial f(t,y)}{\partial y} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ k^2 chky_1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Чем больше значение k в уравнении (3), тем более сложным является характер поведения решения $y_1(t)$ и его производной $y_2(t)$. Это объясняется тем, что решение $y_1(t)$ является гладкой функцией на интервале $[0,1]$. Однако в области $t = 1+0$ решение имеет особую точку и $y_1(t+0) = +\infty$. Причем особая точка располагается тем ближе к точке $t = 1$, чем больше взят параметр k. На отрезке $[0,1]$ вблизи правого конца картина решения приобретает форму пограничного слоя [2].

Пусть $\lambda = 5$. Выберем в качестве начального приближения $y^{(0)}(t)$ к решению задачи Троеша функцию $y^{(0)}(t) = \begin{bmatrix} t^{10} \\ 10t^9 \end{bmatrix}$.

Рассмотрим несколько вариантов расположения подинтервалов пристрелки $J_{y-1}^{(+)}$ и $J_{y-1}^{(-)}$:

$$J_1^{(-)} = \left[t^{(0)},\ t^{(1)}\right], \quad J_1^{(+)} = \left[t^{(1)},\ t^{(2)}\right],$$

$$J_3^{(-)} = \left[t^{(2)},\ t^{(3)}\right], \quad J_3^{(+)} = \left[t^{(3)},\ t^{(4)}\right].$$

Здесь $t^{(0)} = 0,\ t^{(4)} = 1$. А значения $t^{(1)}, t^{(2)}\ t^{(3)}$ нужно определить. Точки пристрелки здесь будут $t^{(1)}$ и $t^{(3)}$.

Выберем начальные приближения к истинным значениям параметров пристрелки:

$$y_1^{(0)} = \begin{bmatrix} (t^{(1)})^{10} \\ 10(t^{(1)})^9 \end{bmatrix},\ y_3^{(0)} = \begin{bmatrix} (t^{(3)})^{10} \\ 10(t^{(3)})^9 \end{bmatrix}.$$

Замыкающая система уравнений для исходной задачи примет вид [3]:

$$\begin{cases} u_1(t^{(0)}, y_1^{(k)}) = 0 \\ v_1(t^{(2)}, y_1^{(k)}) - u_1(t^{(2)}, y_3^{(k)}) = 0 \\ v_2(t^{(2)}, y_1^{(k)}) - u_2(t^{(2)}, y_3^{(k)}) = 0 \\ u_1(t^{(4)}, y_3^{(k)}) - 1 = 0 \end{cases} \tag{12}$$

или

$$H(Z^{(k)}) = 0, \tag{13}$$

где

$$Z^{(k)} = (y_{11}^{(k)}, y_{21}^{(k)}, y_{13}^{(k)}, y_{23}^{(k)})^{\bar{i}}.$$

Для системы уравнений (13) матрицу Якоби можно конкретизировать и записать в виде

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

предпологая, что справедливы равенства

$$g_1(y(a), y(b)) = y_1(a),$$

$$g_2(y(a), y(b) = y_1(b) - 1,$$

$$[a, b] = [0, 1].$$

Здесь рассмотрен случай, когда число точек пристрелки фиксировано и исследованы возможности влияния на свойства матрицы Якоби путем изменения расположения точек пристрелки. Такое влияние четко прослеживается, и в ряде случаев обнаруживаются интересные закономерности. Увеличением числа точек пристрелки можно добиться улучшения свойств матрицы Якоби:

$$\frac{\partial H}{\partial z} = \begin{bmatrix} U_1^{(2)} & -V_3^{(2)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_3^{(4)} & -V_5^{(4)} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U_{2m-3}^{(2m-2)} & -V_{2m-1}^{(2m-2)} \\ G_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & G_{2m-1} \end{bmatrix}.$$

Блочные матричные решения, составляющие матрицу Якоби, показывают, в какой мере им можно придать необходимые свойства за счет перемены интегрирования задач Коши и изменения длин пристрелочных подинтервалов.

Заключение. Предложенная модификация метода множественной двусторонней пристрелки достаточно перспективна для решения граничных задач с пограничным слоем и, в частности, для решения задачи Троеша. Она позволяет обойти сложную процедуру решения линейных алгебраических уравнений.

В предложенной модификации метода множественной двусторонней пристрелки практически отсутствуют какие-либо специальные ограничения на правую часть *f*, вид граничных условий *g* и области интегрирования [*a*, *b*].

Решение замыкающей системы вида (7) не зависит от выбранного метода решения задач Коши. А для решения задач Коши в настощее время существуют хорошо разработанные алгоритмы [4].

Литература

1. Кулешова, И. Ф. К теории метода множественной двусторонней пристрелки для линейных задач с пограничным слоем / И. Ф. Кулешова, П. И. Монастырный // ДАН БССР. – 1989. – Т. 33, № 2. – С. 106–109.

2. Кулешова, И. Ф. Получение границ спектра матриц Якоби в методе множественной двусторонней пристрелки / И. Ф. Кулешова // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 1995. – Вып. II. – С. 44.

3. Соловьева, И. Ф. О модификации метода пристрелки для нелинейных граничных задач / И. Ф. Соловьева // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2005. – Вып. VIII. – С. 27–29.

4. Деккер, К. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений / К. Деккер, Я. Вервер; пер. с англ. – М., 1983. – 200 с.

УДК 531.19

П. Аргиракис, профессор (Университет имени Аристотеля, г. Салоники, Греция);
В. С. Вихренко, профессор; Я. Г. Грода, доцент

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ РЕШЕТКИ НА ДИФФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА НА ПЛОСКИХ СТАТИЧЕСКИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ РЕШЕТКАХ

Diffusion properties of Langmuir lattice gases on statically disordered simple square, triangular, and honeycomb lattices are investigated. It is shown that in the high-temperature limit the diffusion coefficients of particles on statically disordered lattices can be calculated with the expression for the corresponding regular lattices with the average barrier heights of the disordered system. In the low-temperature limit the percolation path approximation is appropriate for calculating the diffusion coefficients. An interpolation formula is suggested for the diffusion coefficient at intermediate temperatures. Results of the analytical calculations and Monte-Carlo simulations for the diffusion coefficient coincide within a few per cent.

Введение. Одним из простейших способов описания неупорядоченных систем считается использование решеточной модели, в которой величины межузельных барьеров являются случайными величинами, зависящими лишь от положения на решетке (статическая неупорядоченность) или от времени (динамическая неупорядоченность) [1–4].

Проведенное ранее [5] рассмотрение показало, что для вычисления коэффициента диффузии решеточного газа на динамически неупорядоченной решетке при равномерном распределении барьеров может использоваться соотношение следующего вида:

$$D_J = D_0 \exp(-\beta\varepsilon_0)\times$$

$$\times\frac{\exp(\beta\mu)}{c}P(0;0)\frac{\sinh(\beta\delta\varepsilon)}{\beta\delta\varepsilon}, \qquad (1)$$

$$D_0 = \frac{za^2}{2d}\nu, \quad \beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}, \qquad (2)$$

где z – число ближайших соседей; a – расстояние между узлами решетки (длина прыжка частицы); d – размерность пространства; ν – характеристическая частота, имеющая порядок частоты колебаний частицы вблизи узла решетки и определяющая временную шкалу диффузионных процессов; k_{B} – постоянная Больцмана; T – температура; ε_0 – средняя величина межузельного барьера; μ, c – равновесные значения химического потенциала системы и концентрации частиц соответственно; $P(0;0)$ – вероятность двум ближайшим узлам быть вакантными; $\delta\varepsilon$ – максимальное отклонение высоты энергетического барьера ε_{ij} от среднего значения:

$$\varepsilon_0 - \delta\varepsilon \le \varepsilon_{ij} \le \varepsilon_0 + \delta\varepsilon. \qquad (3)$$

Выражение (1) представляет собой обобщение соотношения Жданова для кинетического коэффициента диффузии решеточного газа на упорядоченной решетке [6] на случай неупорядоченной системы. Входящие в него равновесные значения химического потенциала и функции вероятности могут быть вычислены с помощью диаграммного приближения [7]. Сопоставление результатов аналитических расчетов и компьютерного моделирования системы по методу Монте-Карло показало, что соотношение (1) в сочетании с диаграммным приближением позволяет определять с удовлетворительной точностью диффузионные характеристики как невзаимодействующих [5, 8], так и взаимодействующих [9, 10] решеточных флюидов на одно-, двух- и трехмерных динамически неупорядоченных решетках.

При статической неупорядоченности на квадратной решетке с равновероятным распределением энергетических барьеров кинетический коэффициент диффузии может быть определен [11] с помощью соотношения

$$D_J = D_0 \exp(-\beta\varepsilon_0)\frac{\exp(\beta\mu)}{c}P(0;0), \qquad (4)$$

которое совпадает с высокотемпературным пределом коэффициента диффузии на динамически неупорядоченной решетке. Здесь примечателен тот факт, что усреднение вероятности перехода частиц между узлами решетки приводит к экспоненте от средней величины межузельных барьеров, умноженной на обратную температуру.

Как в случае статической, так и динамической неупорядоченности для определения

коэффициента диффузии меченых атомов невзаимодействующего решеточного газа на неупорядоченной квадратной решетке может быть использовано [10, 11] выражение для корреляционного фактора упорядоченных систем [12]:

$$f_t(c) = 1 - \frac{2c}{6 - c - \xi(2 - c)}, \qquad (5)$$

где ξ = 10 440 / 9443.

В настоящей работе рассмотрено влияние геометрических особенностей решетки на диффузионные свойства ленгмюровского газа при статической неупорядоченности системы.

1. Аналитические выражения для кинетического коэффициента диффузии при статической неупорядоченности решетки. То, что для плоской квадратной статически неупорядоченной решетки соотношение (1) справедливо при произвольных температурах, может быть интерпретировано с точки зрения теории перколяции [13].

Как известно, порог перколяции p_c в случае задачи связей на квадратной решетке равен 0,5. Применительно к квадратной решетке это означает, что, поскольку при равномерно распределенных барьерах ровно их половина имеет высоту меньше средней высоты ε_0, в системе образуется перколяционный кластер из межузельных барьеров с высотой, не превосходящей среднего значения. При низких температурах частицы предпочитают двигаться вдоль такого кластера, так как преодоление более высоких барьеров намного менее вероятно. Поэтому энергия активации определяется максимальным значением энергии вдоль перколяционного пути, т. е. равна ε_0. При высоких температурах ($\beta\varepsilon_0 << 1$) уравнение (1) также сводится к соотношению (4), что и обеспечивает применимость последнего во всем интервале температур.

Приведенная интерпретация диффузионного процесса была использована для определения кинетического коэффициента диффузии на основе так называемого приближения перколяционного пути [14], согласно которому частицы движутся вдоль перколяционного кластера с минимально возможными энергиями барьеров. При принятом равномерном распределении барьеров в интервале $0 < \varepsilon_{jj} < 2\varepsilon_0$ перколяционный кластер включает барьеры не выше чем $\varepsilon_p = p_c\varepsilon_{\max}$. Это позволяет представить кинетический коэффициент диффузии в следующем виде:

$$D_J = D_0 \exp(-\beta\varepsilon_p)\frac{\exp(\beta\mu)}{c}P(0;0). \qquad (6)$$

Ясно, что данное соотношение справедливо лишь при достаточно низких температурах. С другой стороны, соотношение (4) представляет высокотемпературный предел. При промежуточных температурах следует использовать интерполяционную формулу [15]:

$$D_J = D_0 \exp(-\beta\varepsilon)\frac{\exp(\beta\mu)}{c}P(0;0), \qquad (7)$$

где

$$\varepsilon = \eta\varepsilon_p + (1-\eta)\varepsilon_0, \qquad 0 \le \eta \le 1, \qquad (8)$$

причем коэффициент η изменяется от единицы при предельно низких до нуля при высоких температурах.

Рассматриваемая квадратная решетка уникальна в том отношении, что при равномерном распределении энергии барьеров порог перколяции и средняя энергия барьеров ε_0 совпадают. Это приводит к тому, что соотношения (6) и (7) для нее переходят в соотношение (4) вне зависимости от значения коэффициента η, которое оказывается применимым ко всей области изменения температур. Для других типов решетки порог перколяции отличается от средней энергии барьеров.

2. Статически неупорядоченная плоская треугольная решетка. Проведенное моделирование диффузии ленгмюровского газа по статически неупорядоченной плоской треугольной решетке показало, что зависимость кинетического коэффициента диффузии от обратной температуры является линейной. Это позволяет говорить об арениусовском характере данной зависимости и оценить среднюю энергию активации. Зависимость энергии активации от концентрации представлена на рис. 1.

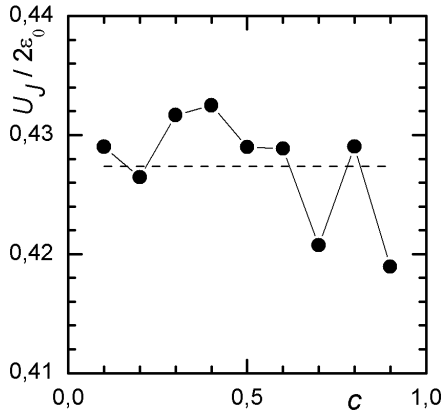


Рис. 1. Зависимость от концентрации средней энергии активации кинетической диффузии ленгмюровского решеточного газа на плоской треугольной статически неупорядоченной решетке

Энергия активации незначительно, в пределах 2%, флуктуирует вблизи некоторого среднего значения. Основной причиной этих флуктуаций, по-видимому, являются неточности, обусловленные ограниченностью статистики процедуры моделирования системы. Среднее значение энергии активации равно $0{,}8547\varepsilon_0$, что заметно отличается как от средней высоты меж-

узельного барьера ε_0, так и от величины порога перколяции $0{,}6946\varepsilon_0$, входящих в качестве энергий активаций в высоко- и низкотемпературные выражения для кинетического коэффициента диффузии (4) и (6) соответственно, но близко к значению $0{,}847\varepsilon_0$, полученному по соотношению (8) при $\eta = 0{,}5$. Эти величины отличаются менее чем на 1%, что соответствует точности метода Монте-Карло, применявшегося для моделирования диффузионного процесса.

На рис. 2 и 3 представлены зависимости кинетического коэффициента диффузии от концентрации, и проводится сопоставление результатов компьютерного моделирования и различных аналитических подходов. При этом, в случае ленгмюровского газа, для равновесных значений химического потенциала, концентрации частиц и функции вероятности $P(0;0)$ может быть использовано следующее соотношение:

$$\frac{\exp(\beta\mu)}{c} P(0;0) = 1 - c. \qquad (9)$$

Из рис. 2 видно, что даже при достаточно низкой температуре $k_B T / 2\varepsilon_0 = 0{,}2$ отсутствует соответствие результатов компьютерного моделирования как приближению перколяционного пути (6), так и, естественно, высокотемпературному соотношению (4). Это связано с тем, что приближение перколяционного пути применимо лишь при предельно низких температурах $k_B T / \varepsilon_0 < 0{,}1$, в то же время высокотемпературное приближение становится справедливым при температурах $k_B T \geq \varepsilon_0$. При промежуточных температурах $0{,}2 \leq k_B T / 2\varepsilon_0 \leq 0{,}5$ удовлетворительные результаты обеспечиваются соотношением (7) при $\eta = 0{,}5$.

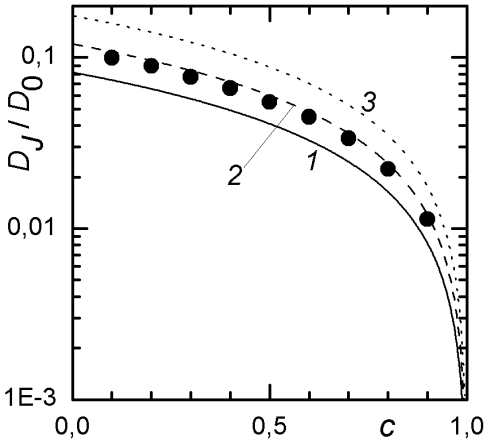


Рис. 2. Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии невзаимодействующего решеточного флюида на статически неупорядоченной плоской треугольной решетке при $T = 0{,}20$. Точками представлены результаты МКМ, кривыми *1*, *2* и *3* – аналитические результаты, вычисленные в соответствии с соотношениями (4), (7) при $\eta = 0{,}5$ и (6) соответственно

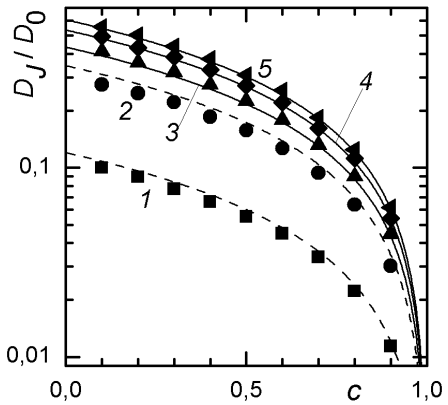


Рис. 3. Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии невзаимодействующего решеточного флюида на статически неупорядоченной плоской треугольной решетке. Точками представлены результаты МКМ, линиями – результаты использования соотношения (7) при $\eta = 0{,}5$ (кривые *1* и *2*) и соотношения (4) (кривые *3*–*5*): *1* – $T = 0{,}2$; *2* – $T = 0{,}4$; *3* – $T = 0{,}6$; *4* – $T = 0{,}8$ (*4*); *5* – $T = 1{,}0$

Следует также отметить, что при высоких температурах $k_B T >> \varepsilon_0$ формулы (4) и (7) приводят к практически одинаковым результатам.

3. Шестиугольная решетка. Аналогичные результаты были получены и для случая ленгмюровского газа на статически неупорядоченной плоской шестиугольной (пчелинносотовой) решетке (см. рис. 4 и 5).

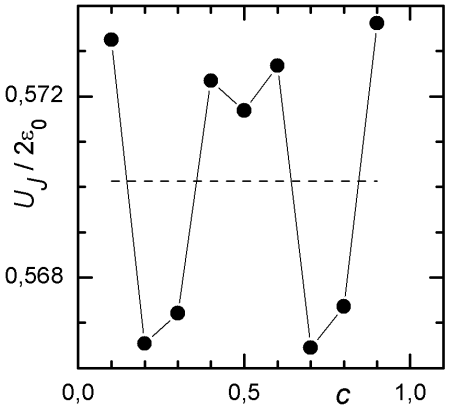


Рис. 4. Зависимость от концентрации средней энергии активации кинетической диффузии ленгмюровского решеточного газа на плоской шестиугольной статически неупорядоченной решетке

При этом определенная по данным моделирования средняя энергия активации кинетической диффузии, представленная на рис. 4, оказывается равной $1{,}140\varepsilon_0$, что хорошо соотносится с результатом применения соотношения (8) при $\eta = 0{,}5$ – $1{,}153\varepsilon_0$ (для рассматриваемой системы $\varepsilon_p = 1{,}3054\varepsilon_0$).

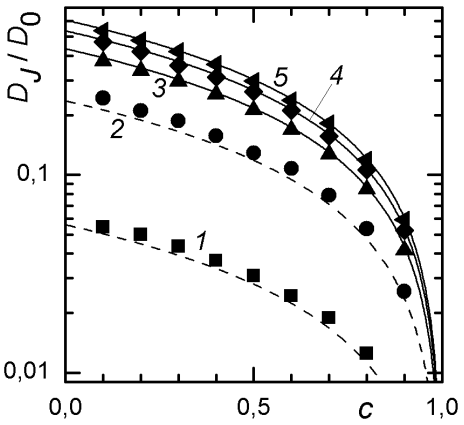


Рис. 5. Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии невзаимодействующего решеточного флюида на статически неупорядоченной плоской шестиугольной решетке. Точками представлены результаты МКМ, линиями – результаты использования соотношения (7) при η = 0,5 (кривые *1* и *2*) и соотношения (4) (кривые *3–5*): *1* – T = 0,2; *2* – T = 0,4; *3* – T = 0,6; *4* – T = 0,8; *5* – T = 1,0

Как и в случае треугольной решетки, высокотемпературное приближение становится применимым уже при $k_B T \geq \varepsilon_0$, а для определения кинетического коэффициента диффузии при более низких температурах может использоваться соотношение (7) при η = 0,5.

Заключение. Сопоставление результатов компьютерного моделирования и аналитических расчетов показало, что для изучения диффузионных свойств плоских равномерно статически неупорядоченных решеток при температурах $k_B T \geq \varepsilon_0$ может с успехом применяться соотношение (4). Что касается более низких температур, то при $k_B T / \varepsilon_0 < 0{,}1$ может использоваться приближение перколяционного пути (6), а в области $0{,}2 \leq k_B T / 2\varepsilon_0 \leq 0{,}5$ хорошие результаты получаются при использовании соотношений (7) и (8) при η = 0,5.

Литература

1. Haus, J. W. Diffusion in regular and disordered lattices / J. W. Haus, K. W. Kehr // Phys. Rep. – 1987. – Vol. 150, № 5-6. – P. 263–406.

2. Avramov, I. Diffusion in a random medium: A Monte Carlo study / I. Avramov, A. Milchev, P. Argyrakis // Phys. Rev. E. – 1993. – Vol. 47, № 4. – P. 2303–2307.

3. Dependence of the diffusion coefficient on the energy distribution of random barriers / P. Argyrakis [et al.] // Phys. Rev. E. – 1995. – Vol. 52, № 4. – P. 3623–3631.

4. Effect of temperature on biased random walks in disordered media / E. Arapaki [et al.] // Phys. Rev. E. – 1997. – Vol. 56, № 1. – P. R29–R31.

5. Грода, Я. Г. Диффузия невзаимодействующего решеточного газа на одномерной неупорядоченной решетке / Я. Г. Грода, В. С. Вихренко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2006. – Вып. XIV. – С. 21–25.

6. Zhdanov, V. P. General equation for description of surface diffusion in the framework of the lattice gas model / V. P. Zhdanov // Surf. Sci. – 1985. – Vol. 149, № 1. – P. L13–L17.

7. Vikhrenko, V. S. The diagram approximation for lattice systems / V. S. Vikhrenko, Ya. G. Groda, G. S. Bokun // Phys. Let. A. – 2001. – Vol. 286, № 2/3. – P. 127–133.

8. Грода, Я. Г. Одночастичная и коллективная диффузия невзаимодействующего решеточного газа на динамически неупорядоченной плоской квадратной решетке / Я. Г. Грода // Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов: материалы Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 6–8 июня 2006 г. / БГТУ. – Минск, 2006. – С. 235–236.

9. Вихренко, В. С. Влияние характера межчастичного взаимодействия на диффузионные свойства решеточного газа на динамически неупорядоченной одномерной решетке / В. С. Вихренко, Я. Г. Грода // Современные проблемы физики – 2006: материалы конференции молодых ученых и специалистов, Минск, 21–23 июня 2006 г. / Ин-т физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси. – Минск, 2006. – С. 103–108.

10. Аргиракис, П. Влияние характера межчастичного взаимодействия на диффузионные свойства решеточного газа на плоской квадратной динамически неупорядоченной решетке / П. Аргиракис, Я. Г. Грода, С. В. Дубинин // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 33–37.

11. Аргиракис, П. Диффузия невзаимодействующего решеточного газа на двухмерной статически неупорядоченной решетке / П. Аргиракис, Е. Арапаки, Я. Г. Грода // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2006. – Вып. XIV. – С. 26–28.

12. Lattice-gas theory of collective diffusion in adsorbed layers / A. Danani [et al.] // Int. J. Mod. Phys. B. – 1997. – Vol. 11, № 19. – P. 2217–2279.

13. Тарасевич, Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы / Ю. Ю. Тарасевич. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 112 с.

14. Dyre, J. C. Universality of ac conductivity in disordered solids / J. C. Dyre, B. S. Schrøder // Rev. Mod. Phys. – 2000. – Vol. 72. – P. 873.

15. Diffusion characteristics of particles on energetically disordered lattices / P. Argyrakis [et al.] // Solid State Ionics. – 2008. – Vol. 179. – P. 143–147.

УДК 531.19

П. Аргиракис, профессор (Университет имени Аристотеля, г. Салоники, Греция);
Я. Г. Грода, доцент

ДИФФУЗИЯ ЛЕНГМЮРОВСКОГО РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА НА НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ ПРИ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ ВЫСОТ БАРЬЕРОВ

Diffusion properties of Langmuir lattice gases on the simple square disordered lattice with exponential distribution of barriers are investigated. The analytical expressions for calculating the jump diffusion coefficient of particles on the dynamically and statically disordered lattices are proposed. Monte Carlo simulations are performed as well. The average activation energy of jump diffusion coefficient is determined. Results of the analytical calculations of the kinetic diffusion coefficient coincide within a few per cent with Monte-Carlo simulation data.

Введение. Для моделирования свойств неупорядоченных сред, наряду с равномерным распределением высот межузельных барьеров [1–7], широко используются решеточные модели, в которых высоты барьеров задаются согласно экспоненциальному распределению [8]:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon_0}\exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right), \qquad (1)$$

где ε, ε_0 – величина межузельного барьера и ее среднее значение соответственно. При заданном распределении высоты межузельных барьеров изменяются от 0 до ∞, но вероятности появления энергий барьеров значительно больших среднего значения ε_0 экспоненциально малы. Ранее [3–7] были исследованы диффузионные характеристики систем с равномерно распределенными барьерами. Настоящая работа посвящена изучению диффузии в системах с барьерами, распределенными в соответствии с законом (1).

1. Аналитическое выражение для коэффициента диффузии. Для произвольной решеточной системы вычисление кинетического коэффициента диффузии D_J сводится к определению средней интенсивности w перехода частицы в один из соседних узлов решетки [9]:

$$w = c^{-1}\left\langle w_{ij} n_j (1-n_i)\right\rangle, \qquad (2)$$

где w_{ij} – частота перескока частицы из узла j в узел i; n_i – число заполнения i-го узла ($n_i = 1$ – узел занят частицей, $n_i = 0$ – узел вакантен). Для термически активированных прыжков

$$w_{ij} = \nu\exp(\beta(u_j - \varepsilon_{ij})), \quad u_j = \sum_{k(j)} J_{jk} n_k. \qquad (3)$$

Суммирование в (3) выполняется по всем ближайшим соседям узла j; ν – частота, имеющая порядок частоты колебаний частицы вблизи узла решетки и определяющая временную шкалу диффузионных процессов; $\beta = 1/k_B T$; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; ε_{ij} – высота барьера между узлами i и j; $J_{jk} = J$ – энергия взаимодействия частиц на решетке (в ленгмюровской системе $J = 0$).

В мультипликативном приближении соотношение (2) может быть представлено как [4]:

$$w \approx c^{-1}\nu\left\langle\exp(-\beta\varepsilon_{ij})\right\rangle\left\langle\exp(\beta u_j) n_j (1-n_i)\right\rangle. \qquad (4)$$

Последний сомножитель, входящий в формулу (4), совпадает с аналогичным выражением для случая решеточного газа на упорядоченной решетке [9]:

$$\left\langle\exp(\beta u_j) n_j (1-n_i)\right\rangle = \exp(\beta\mu) P(0;0), \qquad (5)$$

где μ, c – равновесные значения химического потенциала системы и концентрации частиц соответственно; $P(0;0)$ – вероятность двум ближайшим узлам быть вакантными.

Первое усреднение в (4) при распределении вида (1) также может быть легко выполнено

$$\left\langle\exp(-\beta\varepsilon_{ij})\right\rangle = \int_0^\infty \exp(-\beta\varepsilon)\nu(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{1}{1+\varepsilon_0\beta}. \qquad (6)$$

Окончательно выражение для кинетического коэффициента диффузии принимает вид

$$D_J = D_0\frac{\exp(\beta\mu)}{c}P(0;0)\frac{1}{1+\beta\varepsilon_0}, \quad D_0 = \frac{za^2}{2d}\nu, \qquad (7)$$

где z – число ближайших соседей; a – расстояние между узлами решетки (длина прыжка частицы); d – размерность пространства.

Полученное соотношение (7) может быть рассмотрено как обобщение соотношения Жданова для кинетического коэффициента диффузии решеточного газа на упорядоченной решетке [10] на случай неупорядоченной системы и отличается от него наличием сомножителя вида (6). Входящие в него равновесные значения химического потенциала и функции вероятности могут быть вычислены с помощью диаграммного приближения [11].

2. Алгоритм моделирования. Наряду с аналитическим рассмотрением процесса диффузии может быть проведено его моделирование по методу Монте-Карло с помощью стандартного алгоритма Метрополиса [12]. В рамках этого алгоритма случайным образом

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

$$P_{ij} = P_0^{-1} \exp\left\{-\beta\left[\varepsilon_{ij} - Js\right]\right\}, \qquad (8)$$

где P_0 – нормировочный коэффициент, смысл которого состоит в том, чтобы наиболее энергетически выгодный переход частицы осуществлялся с вероятностью, равной 1; s – число ближайших соседей частицы, находящейся в исходном узле i. Очевидно, что в случае ленгмюровского решеточного газа и газа с притяжением ближайших соседей $P_0 = 1$, а для системы с отталкиванием – $P_0 = \exp[(z-1)\beta J]$.

В случае статически неупорядоченной системы случайная высота межузельного барьера ε_{ij} определяется в начале процедуры моделирования для каждой пары узлов, а для динамической неупорядоченности – непосредственно перед вычислением вероятности перехода. При этом следует отметить, что с помощью встроенных стандартных средств языков программирования можно, как правило, выбрать лишь псевдослучайное число из диапазона от 0 до 1. Переход к случайным числам, распределенным в соответствии с соотношением (1), может быть выполнен с помощью преобразования:

$$x = -\varepsilon_0 \ln y, \qquad (9)$$

где x – случайно распределенное, согласно (1), число; y – равномерно распределенная случайная величина из диапазона [0; 1].

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 $32\times32 = 1024$ решеточных узлов. Процедура моделирования состояла из 50 000 МКШ. Дополнительно первые 10 000 МКШ отводились на эквилибризацию системы и не учитывались в дальнейшем. Конечный результат получался путем усреднения по 1000 полученных таким образом траекторий.

При моделировании использовалась система единиц, в которой $k_B = 1$, а средняя высота межузельного барьера ε_0 принималась равной 0,5.

Сопоставление результатов аналитических расчетов и компьютерного моделирования показало, что, как и в случае равномерного распределения высот межузельных барьеров, соотношение (7) в сочетании с диаграммным приближением позволяет определять с высокой степенью точности диффузионные характеристики ленгмюровского решеточного газа в случае динамической неупорядоченности. Характерной особенностью таких систем является неарениусовский характер зависимости кинетического коэффициента диффузии от температуры, обусловленный наличием множителя (6).

Для статически неупорядоченных систем имеется существенное расхождение между результатами моделирования и аналитических расчетов. Это делает необходимым более детальное рассмотрение данного класса систем.

3. Случай статически неупорядоченной системы. На рис. 1 представлена зависимость кинетического коэффициента диффузии D_J от обратной температуры. Эта зависимость в логарифмическом масштабе является близкой к линейной, что говорит о незначительном отклонении от арениусовского поведения кинетического коэффициента диффузии в статически неупорядоченной системе в отличие от обсуждавшегося выше случая динамической неупорядоченности.

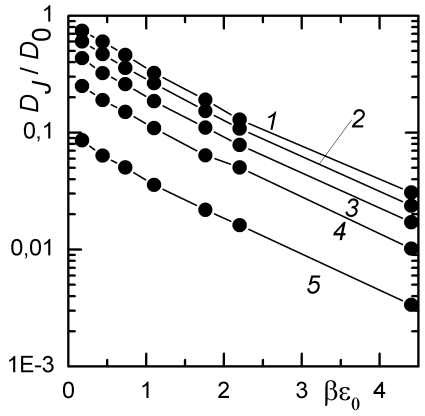


Рис. 1. Зависимость от обратной температуры кинетического коэффициента диффузии ленгмюровского решеточного газа на плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров: *1* – $c = 0{,}1$; *2* – $c = 0{,}3$; *3* – $c = 0{,}5$; *4* – $c = 0{,}7$; *5* – $c = 0{,}9$

Это позволяет оценить энергию активации кинетической диффузии. Ее зависимость от концентрации представлена на рис. 2, из которого следует, что, как и в случае статически неупорядоченных решеток с равномерным распределением барьеров [5], энергия активации кинетической диффузии незначительно флуктуирует вокруг среднего значения $U_J \approx 0{,}75\varepsilon_0$.

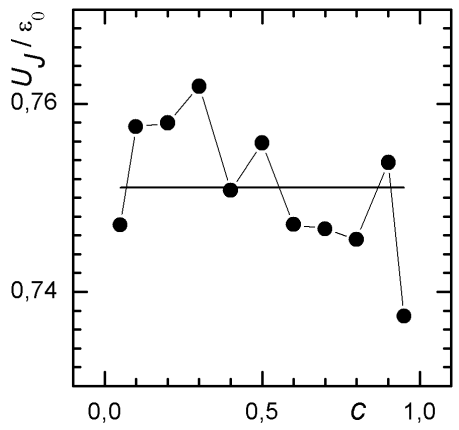


Рис. 2. Зависимость от концентрации средней энергии активации кинетической диффузии ленгмюровского решеточного газа на плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров

Полученное значение средней энергии активации кинетической диффузии может быть сопоставлено как со средней высотой межузельного барьера ε_0, так и с энергией перколяционного перехода ε_p, определяемой из соотношения

$$\int_0^{\varepsilon_p} \varepsilon \nu(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{2} \qquad (10)$$

и равной $\varepsilon_p = \varepsilon_0 \ln 2 \approx 0{,}69\varepsilon_0$. Также следует отметить, что отдельный анализ области высоких температур дает для средней энергии активации значение $U_J \approx 0{,}98\varepsilon_0$. Аналогично этому при низких температурах $U_J \approx \varepsilon_p$.

Вместе с тем полученные результаты позволяют достаточно обоснованно утверждать, что, как и для систем с равномерным распределением высот межузельных барьеров [7], при экспоненциальном распределении высот диффузия в различных температурных областях должна описываться в рамках различных подходов. Так, при высокой температуре влиянием неупорядоченности решетки на диффузию частиц можно пренебречь, рассматривая, тем самым, диффузию ленгмюровского решеточного газа на плоской квадратной решетке с высотой межузельного барьера, равной ε_0. В этом случае выражение для кинетического коэффициента диффузии может быть представлено в следующем виде:

$$D_J = D_0 \exp(-\beta\varepsilon_0) \frac{\exp(\beta\mu)}{c} P(0;0). \qquad (11)$$

Дальнейшее сопоставление результатов моделирования и аналитических расчетов показало, что переход к указанному высокотемпературному пределу происходит достаточно быстро и фактически уже при температуре $k_B T = 0{,}9\varepsilon_0$ может с успехом применяться выражение (11).

В противоположность этому низкотемпературный предел с $U_J \approx \varepsilon_p$ оказывается применимым лишь при предельно низких температурах. Сложность его использования обусловлена еще и тем, что при данных температурах необходим учет префактора C_p, отражающего происходящие в системе переходы частиц через барьеры с высотой большей ε_p.

Поэтому при температурах $k_B T < 0{,}9\varepsilon_0$ для кинетического коэффициента диффузии оказывается более удобным использование соотношения вида

$$D_J = D_0 \exp(-\beta U_J) \frac{\exp(\beta\mu)}{c} P(0;0), \qquad (12)$$

где энергия активации U_J определяется на основе интерполяционного выражения [7]

$$U_J = \eta(T)\varepsilon_p + (1-\eta(T))\varepsilon_0, \quad 0 \le \eta(T) \le 1, \qquad (13)$$

причем на входящую в последнее соотношение функцию $\eta(T)$ наложены следующие граничные условия:

$$\lim_{T\to 0} \eta(T) = 1, \quad \lim_{T\to\infty} \eta(T) = 0 \qquad (14)$$

Можно также отметить, что определенное ранее среднее по всему изученному интервалу значение энергии активации соответствует $\eta = 0{,}8$ в отличие от систем с равномерной неупорядоченностью, где $\eta = 0{,}5$.

На рис. 3 представлена зависимость кинетического коэффициента диффузии от концентрации и проведено сопоставление результатов компьютерного моделирования и аналитических расчетов.

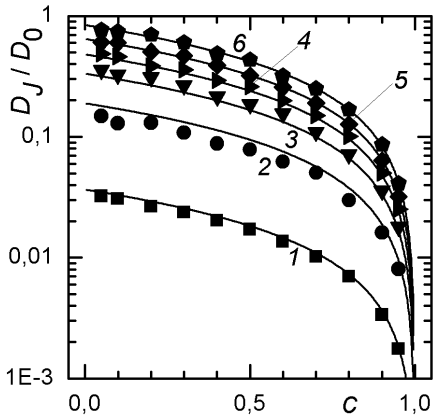


Рис. 3. Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии ленгмюровского решеточного газа на плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров. Точками представлены результаты МКМ, линиями – результаты использования соотношения (12): *1* – $T = 0{,}23$, $\eta = 0{,}8$; *2* – $T = 0{,}45$, $\eta = 0{,}8$; *3* – $T = 0{,}91$, $\eta = 0$; *4* – $T = 1{,}36$, $\eta = 0$; *5* – $T = 2{,}27$, $\eta = 0$; *6* – $T = 5{,}67$, $\eta = 0$

При этом следует отметить, что для температур $k_B T = 0{,}23\varepsilon_0$ и $k_B T = 0{,}45\varepsilon_0$ значение энергии активации принималось равным среднему значению $0{,}75\varepsilon_0$, что соответствует $\eta = 0{,}8$, а при более высоких температурах использовалось высокотемпературное приближение с $U_J \approx \varepsilon_0$ ($\eta = 0$). Из проведенного сопоставления видно, что предложенное соотношение (12) с выбранными значениями энергии активации позволяет определять коэффициент диффузии рассматриваемой системы с удовлетворительной точностью.

Что же касается приближения перколяционного пути, то оно, как было отмечено выше, оказывается справедливым при экстремально низких температурах, а в случае рассмотренных температур приводит к существенно завышенным по сравнению с данными моделирования значениям кинетического коэффициента диффузии.

Заключение. Подводя итог, можно сделать вывод, что, как и в случае равномерно неупорядоченных систем, при динамической неупорядоченности системы диффузионные свойства решеточного флюида могут быть изучены в мультипликативном приближении с помощью соотношения (7). Входящие в это выражение равновесные значения концентрации, химического потенциала и вероятности двум соседним узлам быть вакантными могут быть найдены, как уже было отмечено ранее, в рамках диаграммных подходов, разработанных для решеточных систем.

Что же касается статически неупорядоченной системы, то при высоких температурах она может рассматриваться как упорядоченная решетка с высотой барьера, равной средней высоте при заданном распределении. В низкотемпературном же пределе диффузионный процесс может быть описан в рамках приближения перколяционного пути, а в области средних температур наилучшие результаты достигаются при использовании интерполяционного соотношения вида (13). При этом выход на высокотемпературный предел происходит достаточно быстро, и при $k_B T > 0{,}5\varepsilon_0$ система может рассматриваться как упорядоченная решетка.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № 08М-29).

Литература

1. Avramov, I. Diffusion in a random medium: A Monte Carlo study / I. Avramov, A. Milchev, P. Argyrakis // Phys. Rev. E. – 1993. – Vol. 47, № 4. – P. 2303–2307.

2. Hörner, A. Role percolation in diffusion on random lattice / A. Hörner, A. Milchev, P. Argyrakis // Phys. Rev. E. – 1995. – Vol. 52, № 4. – P. 3570–3576.

3. Effect of temperature on biased random walks in disordered media / E. Arapaki [et al.] // Phys. Rev. E. – 1997. – Vol. 56, № 1. – P. R29–R31.

4. Грода, Я. Г. Диффузия невзаимодействующего решеточного газа на одномерной неупорядоченной решетке / Я. Г. Грода, В. С. Вихренко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2006. – Вып. XIV. – С. 21–25.

5. Аргиракис, П. Диффузия невзаимодействующего решеточного газа на двухмерной статически неупорядоченной решетке / П. Аргиракис, Е. Арапаки, Я. Г. Грода // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2006. – Вып. XIV. – С. 26–28.

6. Аргиракис, П. Влияние характера межчастичного взаимодействия на диффузионные свойства решеточного газа на плоской квадратной динамически неупорядоченной решетке / П. Аргиракис, Я. Г. Грода, С. В. Дубинин // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 33–37.

7. Diffusion characteristics of particles on energetically disordered lattices / P. Argyrakis [et al.] // Solid State Ionics. – 2008. – Vol. 179. – P. 143–147.

8. Dependence of the diffusion coefficient on the energy distribution of random barriers / P. Argyrakis [et al.] // Phys. Rev. E. – 1995. – Vol. 52, № 4. – P. 3623–3631.

9. The self-consistent diagram approximation for lattice systems: diffusion properties of interacting lattice gases / G. S. Bokun [et al.] // Physica A. – 2000. – Vol. 296, № 1/2. – P. 83–105.

10. Zhdanov, V. P. General equation for description of surface diffusion in the framework of the lattice gas model / V. P. Zhdanov // Surf. Sci. – 1985. – Vol. 149, № 1. – P. L13–L17.

11. Vikhrenko, V. S. The diagram approximation for lattice systems / V. S. Vikhrenko, Ya. G. Groda, G. S. Bokun // Phys. Let. A. – 2001. – Vol. 286, № 2/3. – P. 127–133.

12. Uebing, C. Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions / C. Uebing, R. Gomer // J. Chem. Phys. – 1991. – Vol. 95, № 10. – P. 7626–7652.

УДК 536.758

В. В. Белов, доцент

ЗАМКНУТЫЕ УРАВНЕНИЯ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ ЖИДКОСТИ

The configurationally integral of the system with arbitrary interaction is considered as functional of some external field. With help functional differentiation of configurationally integral over external field determine differential type correlation between distribution functions. The unification expressions for partial distribution function and direct correlation function give possible derive closed system of five integral equations.

Введение. Исследование равновесных свойств конденсированных систем с помощью частичных функций распределения связано, как известно, с необходимостью выполнения той или иной процедуры замыкания, первой из которых явилось суперпозиционное приближение Кирквуда [1]. Несколько позже была введена еще иерархия прямых корреляционных функций, на основе которой строились различные функциональные разложения, ограничение которых определенным количеством членов позволяло получать замкнутые уравнения [1]. В данной работе для получения замкнутых уравнений техника функционального дифференцирования используется в ином аспекте.

Основная часть. Будем считать, что система из N частиц занимает объем V и находится под действием некоторого внешнего поля u. В этом случае конфигурационный интеграл системы имеет вид

$$Q(N)=\int_V d1...\int_V dN\exp\left(-U_{12...N}-\sum_k u_k\right), \quad (1)$$

т. е. он и все связанные с ним величины являются функционалами от внешнего поля. Здесь и в дальнейшем цифрами обозначаются параметры, определяющие положения частиц, индексы указывают аргументы соответствующих функций, все энергетические величины являются безразмерными вследствие деления на $k_{\text{B}}T$, где k_{B} – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; U – потенциальная энергия взаимодействия, вид которой пока не конкретизируется.

С одной стороны, частичные функции распределения определяются интегрированием гиббсовского распределения по лишним переменным

$$F_{12...s}=$$
$$=Q^{-1}(N)\int_V d(s+1)...\int_V dN\exp\left(-U_{12...N}-\sum_k u_k\right),$$

так что функции соседних порядков связаны между собой интегральным соотношением

$$F_{12...s}=\int_V d(s+1)F_{12...ss+1}. \quad (2)$$

С другой – их можно найти путем функционального дифференцирования [2] конфигурационного интеграла (1) по внешнему полю u:

$$\frac{\delta\ln Q(N)}{\delta u_1}=-NF_1=-\rho_1, \quad (3)$$

$$\frac{\delta^2\ln Q(N)}{\delta u_1\delta u_2}=-\frac{\delta\rho_1}{\delta u_2}, \quad (4)$$

причем

$$\frac{\delta\rho_1}{\delta u_2}=-(\rho_{12}-\rho_1\rho_2+\delta_{12}\rho_1), \quad (5)$$

где $\rho_{12}=N(N-1)F_{12}$; δ_{12} – дельта-функция Дирака.

Таким же образом можно получить выражения для производных более высокого порядка.

Прямые корреляционные функции определяются рекуррентными соотношениями вида

$$c_{12...s+1}=\frac{\delta c_{12...s}}{\delta\rho_{s+1}} \quad (6)$$

и, следовательно, тоже являются функционалами от внешнего поля. Форма самой младшей из них c_1 выбирается из тех соображений, что при наличии внешнего поля одночастичная функция ρ_1 должна отличаться от средней плотности $\rho=N/V$, а при его отсутствии c_1 должна обращаться в нуль [3]. Тогда можно положить

$$c_1=u_1+\ln\frac{\rho_1}{\rho}. \quad (7)$$

Отсюда следует, что

$$c_{12}=\frac{\delta c_1}{\delta\rho_2}=\frac{\delta u_1}{\delta\rho_2}+\frac{\delta_{12}}{\rho_1}. \quad (8)$$

Входящая сюда производная от внешнего поля по одночастичной функции распределения обратна производной от одночастичной функции по внешнему полю, и поэтому они должны подчиняться условию [1]

$$\int d3\frac{\delta u_1}{\delta\rho_3}\frac{\delta\rho_3}{\delta u_2}=\delta_{12}. \quad (9)$$

Подставив сюда (5) и (8), получим

$$\int d3\left(\frac{\delta_{13}}{\rho_3}-c_{13}\right)(\delta_{23}\rho_3+\rho_{23}-\rho_2\rho_3)=\delta_{12},$$

или

$$\delta_{12}+\int d3\frac{\delta_{13}}{\rho_3}(\rho_{23}-\rho_2\rho_3)-\int d3\delta_{23}\rho_3c_{13}-$$

$$-\int d3c_{13}(\rho_{23}-\rho_2\rho_3)=\delta_{12},$$

т. е. сумма интегралов должна равняться нулю. Имея в виду свойства дельта-функции, это условие можно записать в виде

$$\frac{\rho_{12}-\rho_1\rho_2}{\rho_1}-\rho_2 c_{12}-\int d3c_{13}(\rho_{23}-\rho_2\rho_3)=0,$$

или

$$h_{12}=c_{12}+\int d3\rho_3 c_{13}h_{23}, \qquad (10)$$

где

$$h_{12}=\frac{\rho_{12}}{\rho_1\rho_2}-1. \qquad (11)$$

Выражение (11) – так называемая полная корреляционная функция, а тождество (10) – обобщенное уравнение Орнштейна – Цернике, которое содержит две неизвестные функции (в случае отсутствия внешнего поля). Можно показать, что в случае парного межчастичного взаимодействия разложение величины c_1, определяемой равенством (7), в функциональный ряд Тейлора по отклонениям от средней плотности в поле дополнительной частицы с учетом (10) и одного члена разложения приводит к уравнению гиперцепного приближения, а величины $\exp(c_1)$ – к уравнению Перкуса – Йевика. При учете следующих членов разложения возникают трехчастичные и более высокого порядка функции, а уравнения становятся незамкнутыми.

Из определения (2) следует, что двухчастичная функция распределения получается интегрированием трехчастичной:

$$F_{12}=\int_V d3F_{123}. \qquad (12)$$

Соотношение, содержащее трехчастичные функции, можно получить с использованием условия, которому должны удовлетворять вторые функциональные производные – от внешнего поля по одночастичной плотности и обратная ей производная от одночастичной плотности по внешнему полю [1]:

$$\frac{\delta^2 u_1}{\delta\rho_2\delta\rho_3}=-\int d4d5d6\frac{\delta^2\rho_4}{\delta u_5\delta u_6}\frac{\delta u_1}{\delta\rho_4}\frac{\delta u_5}{\delta\rho_2}\frac{\delta u_6}{\delta\rho_3}. \qquad (13)$$

Продифференцировав обе части (8), получим

$$\frac{\delta c_{12}}{\delta\rho_3}=\frac{\delta^2 u_1}{\delta\rho_2\delta\rho_3}-\frac{\delta_{12}\delta_{13}}{\rho_1^2},$$

откуда с учетом (6) при $s = 2$ следует

$$\frac{\delta^2 u_1}{\delta\rho_2\delta\rho_3}=c_{123}+\frac{\delta_{12}\delta_{13}}{\rho_1^2}. \qquad (14)$$

Теперь продифференцируем обе части равенства (5):

$$\frac{\delta^2\rho_1}{\delta u_2\delta u_3}=\frac{\delta\rho_1}{\delta u_3}\rho_2+\rho_1\frac{\delta\rho_2}{\delta u_3}-\delta_{12}\frac{\delta\rho_1}{\delta u_3}-\frac{\delta\rho_{12}}{\delta u_3}. \qquad (15)$$

Производные от одночастичной плотности по внешнему полю определяются выражением (5), а производная от двухчастичной плотности вычисляется с помощью (1), и она имеет вид

$$\frac{\delta\rho_{12}}{\delta u_3}=\rho_{12}\rho_3-\rho_{123}-\delta_{13}\rho_{23}-\delta_{23}\rho_{13}, \qquad (16)$$

где $\rho_{123}=N(N-1)(N-2)F_{123}$. Подставив (14)–(16), (5) и (8) в (13), будем иметь (весьма громоздкие выкладки опускаются)

$$\begin{aligned}c_{123}&=h_{123}-c_{12}c_{13}-c_{12}c_{23}-c_{13}c_{23}+\\&+\int d4\rho_4 c_{14}c_{24}c_{34}+\int d4d5d6\rho_4\rho_5\rho_6 h_{456}c_{14}c_{25}c_{36}-\\&-\int d4\rho_4(h_{124}c_{34}+h_{134}c_{24}+h_{234}c_{14})+\\&+\int d4d5\rho_4\rho_5\left(h_{145}c_{25}c_{34}+h_{245}c_{35}c_{14}+\right.\\&\left.+h_{345}c_{25}c_{14}\right)\end{aligned} \qquad (17)$$

где

$$h_{123}=\frac{\rho_{123}}{\rho_1\rho_2\rho_3}-h_{12}-h_{13}-h_{23}-1. \qquad (18)$$

Уравнение (17) содержит две трехчастичные функции – h_{123} и c_{123}. Еще одно уравнение, в которое входят трехчастичные функции, можно получить путем дифференцирования обеих частей уравнения (10):

$$\begin{aligned}\frac{\delta h_{12}}{\delta\rho_3}&=\frac{\delta c_{12}}{\delta\rho_3}+\\&+\int d4\left(\delta_{34}c_{14}h_{24}+\rho_4\frac{\delta c_{14}}{\delta\rho_3}h_{24}+\rho_4 c_{14}\frac{\delta h_{24}}{\delta\rho_3}\right).\end{aligned} \qquad (19)$$

Производную от полной корреляционной функции по одночастичной плотности можно вычислить с помощью соотношения [2]

$$\frac{\delta h_{12}}{\delta\rho_3}=\int d4\frac{\delta h_{12}}{\delta u_4}\frac{\delta u_4}{\delta\rho_3}, \qquad (20)$$

являющегося аналогом дифференцирования сложных функций в случае обычных производных. Подставив в последнее выражение (11) и (8), будем иметь

$$\begin{aligned}\frac{\delta h_{12}}{\delta\rho_3}&=\int d4\left[\frac{1}{\rho_1\rho_2}\frac{\delta\rho_{12}}{\delta u_4}-\right.\\&\left.-\frac{\rho_{12}}{\rho_1^2\rho_2^2}\left(\frac{\delta\rho_1}{\delta u_4}\rho_2+\rho_1\frac{\delta\rho_2}{\delta u_4}\right)\right]\left(c_{34}-\frac{\delta_{34}}{\rho_3}\right),\end{aligned} \qquad (21)$$

где производные от одночастичной и двухчастичной плотностей по u определяются равенствами (5) и (16) соответственно. Подстановка (21) и определения (6) при $s = 2$ в (19) приводит к

следующему соотношению (промежуточные громоздкие выкладки опускаются):

$$h_{123} = c_{123} + (h_{12} + h_{13})c_{23} + c_{12}c_{13} + \int d4\rho_4 h_{14} c_{234} + \\ + \int d4\rho_4 \left(c_{34}h_{124} + c_{24}h_{134} - h_{14}c_{24}c_{34}\right) - \\ - \int d4d5\rho_4\rho_5 c_{24}c_{35}h_{145}. \quad (22)$$

Из определения (2) при $s = 1$ следует

$$F_1 = \int_V d2F_{12}. \quad (23)$$

Таким образом, соотношения (23), (12), (10), (17) и (22) образуют замкнутую систему уравнений.

В работе [4] было показано, что в случае парного межчастичного взаимодействия и при отсутствии внешнего поля выражение (12) принимает вид

$$\omega_{12} = -\rho \int d3\left[(h_{13}h_{23} + h_{13} + h_{23} + 1)\exp(-\omega_{123}) + \\ + h_{13}h_{23}\right] \quad (24)$$

где ω_{12}, ω_{123} – неприводимые части двух- и трехчастичных потенциалов средних сил соответственно,

$$h_{12} = \exp\left[-(\Phi_{12} + \omega_{12})\right] - 1, \quad (25)$$

где Φ_{12} – потенциал парного взаимодействия. Трехчастичная часть функции h_{123} при этом имеет вид

$$\frac{\rho_{123}}{\rho_1\rho_2\rho_3} = \exp\left[-\left(\Phi_{12} + \Phi_{13} + \Phi_{23} + \\ + \omega_{12} + \omega_{13} + \omega_{23} + \omega_{123}\right)\right] \quad (26)$$

Уравнение (23) превращается в определение одночастичного потенциала средних сил, не зависящего от пространственных координат:

$$\varphi_1 = -\rho \int d2h_{12}, \quad (27)$$

через который, в свою очередь, выражается свободная энергия системы, поскольку [4]

$$Q(N) = \left\{\int_V d1\exp(-\varphi_1)\right\}^N = V^N \exp(-N\varphi_1). \quad (28)$$

Заключение. С помощью техники функционального дифференцирования без использования каких-либо приближений получена замкнутая система интегральных уравнений для функций распределения жидкости с произвольным взаимодействием между ее частицами.

Литература

1. Физика простых жидкостей / Г. Темперли [и др.]; под общ. ред. Г. Темперли. – М.: Мир, 1971. – 308 с.
2. Вольтерра, В. Теория функционалов, интегральных и интегро-дифференциальных уравнений / В. Вольтерра. – М.: Наука, 1982. – 302 с.
3. Роулинсон, Дж. Молекулярная теория капиллярности / Дж. Роулинсон, Б. Уидом. – М.: Мир, 1986. – 375 с.
4. Белов, В. В. Новые интегральные уравнения для простых жидкостей / В. В. Белов // ДАН БССР. – 1988. – Т. 32, № 2. – С. 116–119.

УДК 536.758

А. Н. Камлюк, доцент; С. А. Борисевич, ассистент

АНАЛИЗ УПАКОВЫВАЮЩЕЙ НАГРУЗКИ ПРИ НАВИВКЕ ДНК НА ГИСТОНЫ

In this paper kind and size of packing loads were considered. Four examples of packing load were suggested. For each example nonlinear differential equation for elastic line of a molecule was wrote. Then equation was solved and it was found numerical data for packing loads are needed for DNA coiling. DNA molecule was modeled as Kirchhoff rod and the proteins-DNA contact was ignored. Elastic lines of DNA molecule on kind and size of packing loads were obtained.

Введение. Выяснение молекулярных механизмов функционирования сложных клеточных структур является одним из наиболее актуальных аспектов активно развивающегося направления в современной биологии – клеточной инженерии [1, 2]. Среди исследуемых проблем одно из главных мест занимает проблема строения, организации и работы хромосомного аппарата. Решение данного вопроса позволило бы понять, каким образом происходит дифференцировка клеток, являющихся элементарными единицами организма, и привело бы к созданию общей теории регуляции работы генов высших организмов.

Анализ вида нагрузки при упаковке ДНК на гистоны. Для модели молекулы в виде стержня Кирхгофа необходимо получить сравнительную оценку величины упаковывающей нагрузки, необходимой для обеспечения начала процесса компактизации, при различных вариантах ее приложения. В отличие от работы [3], где рассматривалась подобная задача при малых деформациях оси стержня, здесь исследуются нелинейные деформации модели. На рис. 1 представлена одна из четырех схем приложения внешнего силового воздействия на ДНК, рассматриваемых в данной работе (вариант 1). Другие схемы отличаются от него следующим: вариант 2 содержит вместо сосредоточенной силы f вертикальную равномерно распределенную нагрузку с интенсивностью q, в варианте 3 сила f направлена по горизонтали, а вариант 4 имеет горизонтально распределенную нагрузку.

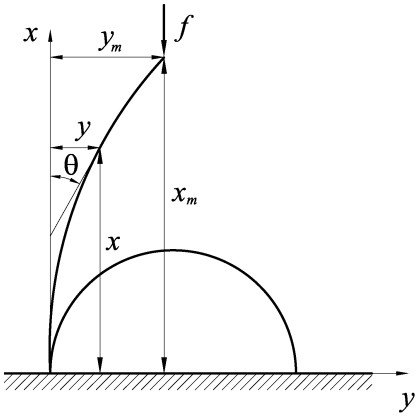


Рис. 1. Схема нагружения (y_m, x_m – координаты свободного конца молекулы)

Длина L молекулы выбрана такой, чтобы она смогла сделать полуоборот по поверхности гистонов радиусом R, т. е. $L = \pi R$. При этом анализ качества прилегания молекулы к поверхности гистонов будем проводить по следующему принципу. То решение, при котором большая часть молекулы имеет кривизну, равную R, под воздействием меньших силовых факторов будет выбрано оптимальным для данного варианта нагружения.

Рассмотрим вариант 1 схемы нагружения, показанный на рис. 1. Форму изогнутой оси стержня можно определить с помощью выражения

$$\rho^{-1} = M / EJ, \qquad (1)$$

где ρ^{-1} – кривизна упругой линии в произвольном поперечном сечении; M – изгибающий момент в том же сечении; EJ – жесткость на изгиб оси молекулы.

Кривизна упругой линии в системе координат x и y имеет вид

$$\rho^{-1} = \left(d^2 y / dx^2\right)\left(1 + \left(dy / dx\right)^2\right)^{-3/2}. \qquad (2)$$

Для анализа схем нагружения вариантов 1 и 3 удобно взять в качестве независимой переменной дуговую координату s, отсчитываемую от основания. В этом случае выражение для угла между касательной к упругой линии и вертикалью можно записать в форме $\theta = \arcsin(dy / ds)$.

Тогда соотношение для кривизны, определяемое формулой $1/\rho = d\theta / ds$, запишется как

$$\rho^{-1} = \left(d^2 y / ds^2\right)\left(1 - \left(dy / ds\right)^2\right)^{-1/2}, \qquad (3)$$

а нелинейное дифференциальное уравнение упругой линии (1) примет вид

$$d^2 y / ds^2 = \left(\sqrt{1 - \left(dy / ds\right)^2}\, M\right) / EJ. \qquad (4)$$

Изгибающий момент в произвольном сечении определим как (см. рис. 1)

$$M = f\,(y_m - y). \qquad (5)$$

В итоге уравнение прогибов можно представить в виде

$$d^2 y / ds^2 = \left(\sqrt{1 - \left(dy / ds\right)^2}\, f\left(y_m - y\right)\right) / EJ. \qquad (6)$$

Здесь и ниже учитываются только перемещения от изгибающего момента, так как перемещения от продольных сил пренебрежимо малы. Введем новые переменные: $S = s/L$, $Y = y/L$, $Y_m = y_m/L$, $F = fL^2/(EJ)$, где L – длина молекулы. Тогда формулу (6) в безразмерной форме записываем как

$$d^2Y/dS^2 = \sqrt{1-\left(dY/dS\right)^2}\,F\left(Y_m - Y\right). \qquad (7)$$

В выражение (7) входит неизвестная величина Y_m, зависящая от силы F. Чтобы решить дифференциальное уравнение (7), необходимо сначала найти зависимость максимального прогиба от силы $Y_m(F)$. Для поиска указанной зависимости использовался итерационный метод, результаты расчета по которому представлены на рис. 2.

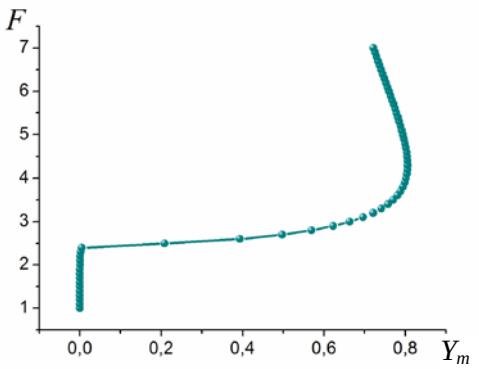


Рис. 2. Зависимость максимального горизонтального смещения от величины продольной силы

Теперь, когда известно значение максимальных прогибов, можем построить упругую линию оси при различных значениях нагрузки (рис. 3).

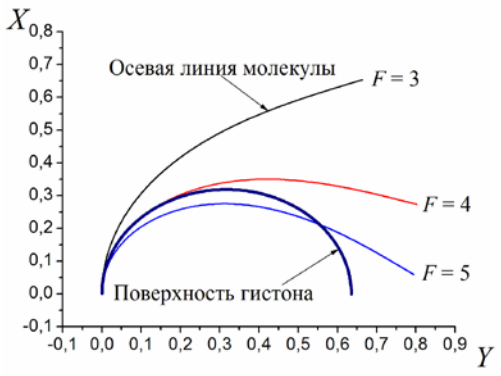


Рис. 3. Упругая линия оси молекулы при различных величинах продольной силы

Из графика видно, что прилегание молекулы к гистонам обеспечивается при наименьшей величине безразмерной силы $F = 4$. Перейдем от безразмерной величины к действительному значению силы:

$$f = FEJL^{-2} = FEJ(\pi R)^{-2}, \qquad (8)$$

где $EJ = 2{,}7\cdot 10^{-28}$ Нм^2 – жесткость молекулы на изгиб; $R = 3{,}5$ нм – радиус гистонового октамера. В итоге получаем $f = 8{,}94\cdot 10^{-12}$ Н.

Рассмотрим вариант 2 упаковывающей нагрузки. Уравнение прогибов в безразмерном виде для этого случая запишется как

$$d^2Y/dS^2 = \frac{1}{2}\sqrt{1-\left(dY/dS\right)^2}\,Q(Y_m - Y)^2, \qquad (9)$$

где $Q = qL^3/(EJ)$.

Аналогично предыдущим расчетам найдем зависимость $Y_m = Y_m(Q)$ (рис. 4).

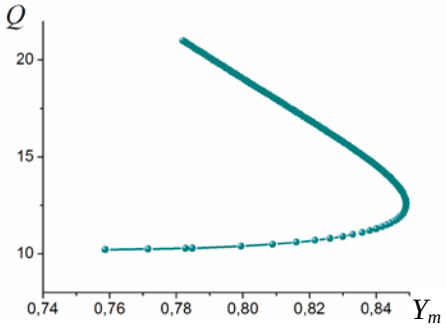


Рис. 4. Зависимость максимального горизонтального смещения от величины продольной распределенной силы

Молекула теряет устойчивость и начинает деформироваться при величине распределенной нагрузки $Q = 10$, тогда как в варианте 1 данный процесс наблюдается при $F = 2{,}4$.

Построим упругую линию оси при различных значениях нагрузки (рис. 5). Из графика видно, что прилегание молекулы к гистону обеспечивается при наименьшей величине безразмерной силы $Q = 10{,}4$, которая соответствует $q = 2{,}1\cdot 10^{-3}$ Н/м.

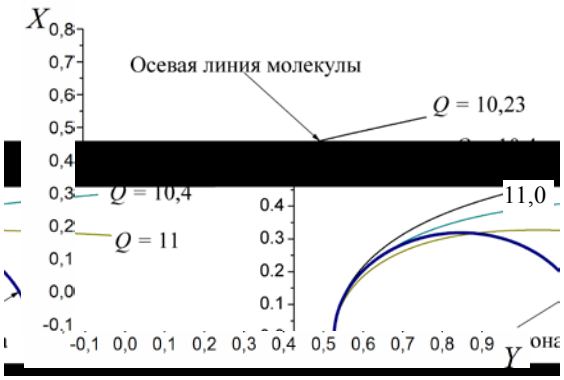


Рис. 5. Упругая линия оси молекулы при различных величинах продольной распределенной силы

Рассмотрим вариант 3 упаковывающей нагрузки. Кривизну упругой линии молекулы

запишем в системе координат y, x (см. формулу (2)) в безразмерном виде:

$$d^2Y/dX^2 = \left(1-\left(dY/dX\right)^2\right)^{3/2} F\left(X_m - X\right). \quad (10)$$

Найдем зависимость $X_m = X_m(F)$ (при расчете необходимо следить, чтобы $S=1$) (рис. 6).

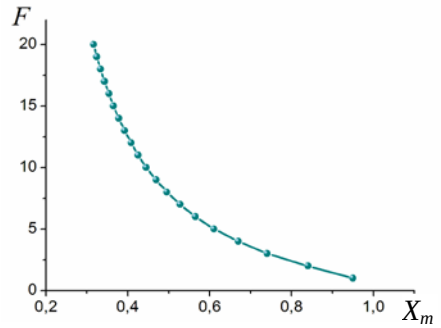


Рис. 6. Зависимость максимального вертикального смещения от величины горизонтальной силы

Построим упругую линию при данном типе нагрузки для разных величин силы (рис. 7). Из графика видно, что прилегание молекулы к гистону обеспечивается при наименьшей величине безразмерной силы $F=8$, которая соответствует $f = 17{,}9\cdot 10^{-12}$ Н.

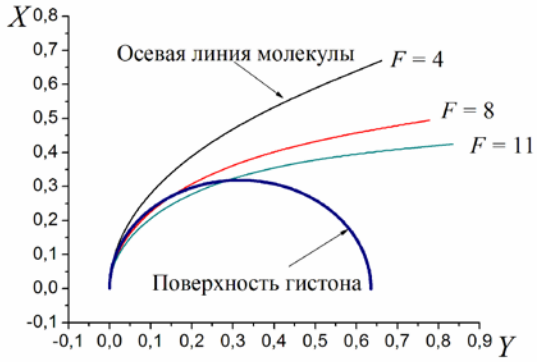


Рис. 7. Упругая линия оси молекулы при различных величинах горизонтальной силы

Рассмотрим последний вариант 4 упаковывающей нагрузки. Уравнение упругой линии молекулы в безразмерной форме будет иметь вид

$$d^2Y/dX^2 = 2^{-1}\left(1-\left(dY/dX\right)^2\right)^{3/2} Q\left(X_m - X\right)^2. \quad (11)$$

Вычислим зависимость $X_m = X_m(Q)$ (при расчете необходимо следить, чтобы $S=1$) (рис. 8) и построим упругую линию для разных величин распределенной нагрузки (рис. 9).

Из графика видно, что прилегание молекулы к гистону обеспечивается при наименьшей величине распределенной силы $Q=18$, которая соответствует $q = 3{,}66\cdot 10^{-3}$ Н/м.

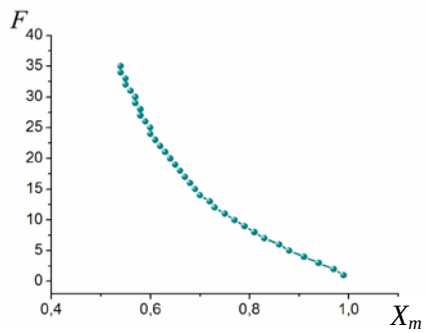


Рис. 8. Зависимость максимального вертикального смещения от величины горизонтальной распределенной силы

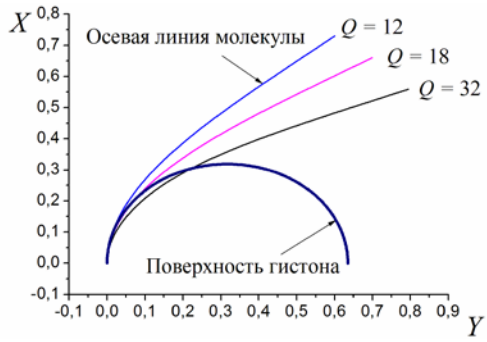


Рис. 9. Упругая линия оси молекулы при различных значениях горизонтальной распределенной силы

Заключение. В результате анализа схем нагружения установлено, что продольная сила (варианты 1 и 2) обеспечивает прилегание молекулы к гистону при меньших ее значениях по сравнению с другими вариантами упаковывающей нагрузки (варианты 3 и 4). Полученные значения сил будут полезны при планировании экспериментов, связанных с компактизацией ДНК. Таким образом, данная работа позволяет выбрать вариант нагружения, который приведет к навивке при минимальном значении силы. В дальнейшем представляется интересным исследовать, как меняется сила, необходимая для полной навивки молекулы на гистон. Эта задача предусматривает рассмотрение контакта между поверхностью гистона и молекулой и является более сложной.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ грант № Ф07М-024.

Литература

1. Эренпрейса, Е. А. Организация хроматина в ядре интерфазной клетки / Е. А. Эренпрейса. – Рига: Зинатне, 1990. – 120 с.

2. Bloomfield, V. A. DNA condensation by multivalent cations / V. A. Bloomfield // Biopolimers. – 1997. – Vol. 44. – P. 269–282.

3. Камлюк, А. Н. Компактизация ДНК на нуклеосомном уровне структурной организации хромосом / А. Н. Камлюк, В. Б. Немцов // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2001. – Вып. IX. – С. 52–60.

УДК 531.19

Г. С. Бокун, доцент; Р. Н. Ласовский, ассистент; В. С. Вихренко, профессор

КИНЕТИКА СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЕ

The local equilibrium distribution function is used for the statistical-mechanical description of structural transformation kinetics. The nonequilibrium state is determined by the value of the local chemical potential at lattice sites. Two sublattices are used for introduction of the structure parameter. The mean potentials method for designing the evolution equations is used. The structure parameter relaxation kinetics for ordered and disordered phases is investigated.

Введение. Проблема описания процессов зарождения новой фазы и структурных превращений является важной задачей статистической теории и приобретает особое значение при переходе к рассмотрению наноструктурированных систем. Изучению этой проблемы посвящены многочисленные оригинальные и обзорные работы [1–5]. Ряд интересных результатов получен при использовании упрощений, позволивших дать качественное описание отдельных сторон протекающих процессов [1, 2]. Изучение рассматриваемых явлений с учетом их взаимосвязи является важной задачей.

В настоящей работе развивается статистико-механическая теория, намечающая пути решения упомянутой задачи. На основе полученных ранее результатов [7–9] по расчету равновесных коррелятивных функций представляется возможным прийти к достаточно точному количественному описанию различных динамических процессов.

1. Уравнения эволюции плотностей в структурированной системе. Для рассмотрения структурных переходов используем сложную решетку, состоящую в простейшем варианте из двух простых квадратных подрешеток, образованных соответственно узлами двух типов a и b (рис. 1), где $\mathbf{r}_i^a$, $\mathbf{r}_i^b$ – радиусы-векторы, определяющие положения узлов; $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ $\mathbf{e}_4$ – векторы ближайших соседей на решетке.

Для сокращения записей для функций узловых переменных используем обозначения

$$f(\mathbf{r}_i^\alpha) = f_i^\alpha, \quad f(\mathbf{r}_i^\alpha + \mathbf{e}_j) = f_{i+e_j}^\alpha. \qquad (1)$$

Греческие индексы обозначают подрешетки, латинские – пространственные переменные, так что в определениях (1) $\alpha = a, b$.

Как и ранее [5], будем предполагать, что неравновесная функция распределения D_N системы частиц, распределенных по $N_a = N_b$ узлам подрешеток, зависит от времени только через неравновесные химические потенциалы μ_i^α. Задавая динамическое состояние системы набором чисел заполнения n_i^α, принимающих значения 0 или 1, запишем D_N в форме

$$D_N = \frac{1}{Z_N}\exp\left\{\beta\sum_{\alpha=a}^{b}\left(\sum_{i=1}^{N_\alpha}\left(\mu_i^\alpha n_i^\alpha - \frac{J}{2}\sum_{j=1}^{z} n_i^\alpha n_{i+e_j}^{\bar\alpha}\right)\right)\right\}, \qquad (2)$$

где Z_N – большая статистическая сумма, нормирующая функцию (2) на единицу; $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обратная температура; J – энергия взаимодействия частиц, расположенных в двух соседних узлах, принадлежащих разным подрешеткам; z – число ближайших соседей на решетке. Черта над греческим индексом используется для обозначения сопряженной подрешетки: если $\alpha = a$, то $\bar\alpha = b$, если $\alpha = b$, то $\bar\alpha = a$.

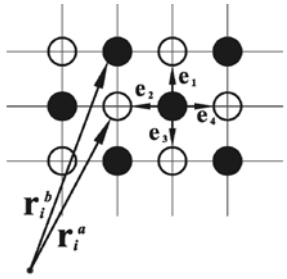


Рис. 1. Схема распределения узлов по подрешеткам

Основываясь [5] на выражении для микроскопического потока из занятого узла $\mathbf{r}_j^\alpha$ в свободный узел $\mathbf{r}_i^{\bar\alpha}$

$$\hat I_{ji} = w_0 e^{\beta\varepsilon_j^{\bar\alpha}} D_N(\ldots 1_j^{\bar\alpha},\ 0_i^\alpha \ldots), \quad \varepsilon_j^{\bar\alpha} = J\sum_{k=1}^{z} n_{j+e_k}^\alpha, \qquad (3)$$

для среднего потока в свободный узел $\mathbf{r}_i^\alpha$ через его общую границу с узлом $\mathbf{r}_j^\alpha$ получим

$$I_{ji}^{\bar\alpha\alpha} = \left(U_j^{\bar\alpha} - U_i^\alpha\right) F\left(0_j^{\bar\alpha},\ 0_i^\alpha\right). \qquad (4)$$

Здесь $F\left(0_i^\alpha,\ 0_j^{\bar\alpha}\right)$ – неравновесная функция распределения вакансий, равная вероятности двум узлам $\mathbf{r}_i^\alpha$ и $\mathbf{r}_j^{\bar\alpha}$ быть не занятыми частицами, и

$$U_i^\alpha = w_0 e^{\beta\mu_i^\alpha}. \qquad (5)$$

Скорость изменения средней плотности ρ_i^α частиц в узле $\mathbf{r}_i^\alpha$ определяется условием баланса

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_i^\alpha = \sum_{j=1}^{z} I_{ji}^{\bar\alpha\alpha}. \qquad (6)$$

В соответствии с выбором неравновесной функции распределения в форме (2) связь между вариацией средней плотности и вариацией химического потенциала имеет вид

$$\frac{\delta\rho_i^\alpha}{\delta\mu_j^\beta} = \langle \delta n_i^\alpha \delta n_j^\beta \rangle_{\text{eq}}, \qquad (7)$$

$$\delta n_i^\alpha = n_i^\alpha - \rho_i^\alpha, \qquad \mu_i^\alpha = \bar\mu + \delta\mu_i^\alpha, \qquad (8)$$

где $<\ldots>_{\text{eq}}$ – равновесное усреднение; $\bar{\mu}$ – равновесное значение химического потенциала (в состоянии равновесия химические потенциалы одинаковы в обеих подрешетках).

Соотношения (6) и (7) с учетом (2) образуют замкнутую систему уравнений, определяющую временную эволюцию различных величин в системе со сложной решеткой. Для реализации этой программы необходимо знание корреляционных функций неравновесных состояний, входящих в (4).

Рассмотрим сначала случай малых отклонений от состояния равновесия, когда можно ограничиться линейными слагаемыми по вариациям химического потенциала.

Раскладывая (4) и (5) по $\delta\mu_i^\alpha$, перепишем уравнение (6) в виде

$$\frac{\partial \rho_i^\alpha}{\partial t} = A\sum_{j=1}^{z}(\delta\mu_{lj+i}^{\bar{\alpha}} - \delta\mu_i^\alpha), \qquad (9)$$

где

$$A = w_0 F_{\text{eq}}(0,\,0)e^{\beta\bar{\mu}}. \qquad (10)$$

Здесь $F_{\text{eq}}(0,\,0)$ – вероятность того, что в однородной равновесной системе два соседних узла вакантны.

Введем представление о параметре порядка. С этой целью перейдем к новым переменным

$$c_i = \frac{\rho_i^\alpha + \rho_i^{\bar{\alpha}}}{2} \quad \delta_i = \frac{\rho_i^a - \rho_i^b}{2}, \qquad (11)$$

где c_i – средняя плотность системы; δ_i – параметр порядка.

Для перехода к c_i и δ_i вычтем и сложим уравнения (9) при $\alpha = a,\ b$. После несложных преобразований получим

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{A}{2}\sum_{\alpha=a}^{b}\sum_{j=1}^{z}\left(\mu_{i+e_j}^\alpha - \mu_i^\alpha\right), \qquad (12)$$

$$\frac{\partial \delta_i}{\partial t} = \frac{Az}{2}\left(\delta\mu_i^a - \delta\mu_i^b\right) + \frac{A}{2}\sum_j\left(\delta\mu_{i+e_j}^b - \delta\mu_i^b\right) - $$
$$- \frac{A}{2}\sum_j\left(\delta\mu_{i+e_j}^a - \delta\mu_i^a\right). \qquad (13)$$

Для малых отклонений от положения равновесия в уравнениях (12) и (13) возможен переход к континуальному представлению.

Учитывая, что

$$\sum_{j=1}^{z}\left(f_{i+e_j}^\alpha - f_i\right);\ \ h^2\nabla^2 f(\mathbf{r}), \qquad (14)$$

представим уравнения (12) и (13) в форме дифференциальных уравнений

$$\frac{\partial c(t,\mathbf{r})}{\partial t} = \frac{A}{2}\nabla^2\left(\mu_{\mathbf{r}}^a + \mu_{\mathbf{r}}^b\right), \qquad (15)$$

$$\frac{\partial \delta(t,\mathbf{r})}{\partial t} = -Az\left(\mu_{\mathbf{r}}^a - \mu_{\mathbf{r}}^b\right) - \frac{A}{2}\nabla^2\left(\mu_{\mathbf{r}}^a - \mu_{\mathbf{r}}^b\right). \qquad (16)$$

Здесь использован оператор градиента ∇.

Содержащиеся в правых частях уравнений (15) и (16) разность и сумму локальных неравновесных потенциалов $\mu_{\mathbf{r}}^a$ и $\mu_{\mathbf{r}}^b$ можно выразить через соответствующие производные от функционала свободной энергии системы $f = f(\rho_i^a, \rho_i^b)$, отнесенной к одному узлу решетки. Используя определения химических потенциалов

$$\mu_i^a = \frac{\partial f}{\partial \rho_i^a},\ \ \mu_i^b = \frac{\partial f}{\partial \rho_i^b}, \qquad (17)$$

после перехода к переменным, рассчитанным по уравнениям (11), получим

$$\mu_i^a = \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial c_i} + \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial \delta_i},\ \ \mu_i^b = \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial c_i} - \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial \delta_i}. \qquad (18)$$

Отсюда следует

$$\mu_i^a - \mu_i^b = \frac{\partial f}{\partial \delta_i}, \qquad \mu_i^a + \mu_i^b = \frac{\partial f}{\partial c_i}. \qquad (19)$$

Переходя в последних соотношениях к континуальному представлению, перепишем уравнения (15) и (16) в виде

$$\frac{\partial c(t,\mathbf{r})}{\partial t} = \frac{A}{2}\nabla^2\frac{\partial f}{\partial c}, \qquad (20)$$

$$\frac{\partial \delta(t,\mathbf{r})}{\partial t} = -Az\frac{\partial f}{\partial \delta} - \frac{A}{2}\nabla^2\left(\frac{\partial f}{\partial \delta}\right). \qquad (21)$$

Полученные соотношения являются обобщением уравнений Ландау – Гинзбурга [6] на случай пространственно неоднородных систем.

Если изучаемая система не находится в состоянии, предельно близком к состоянию равновесия, необходимо проводить вычисления, не опирающиеся на разложения в ряды с точностью до линейных слагаемых. В этом случае для расчета коррелятивных функций и локальных химических потенциалов может быть использован метод средних потенциалов [7–9].

2. Применение метода средних потенциалов. Для решения поставленной задачи необходимо обобщить процедуры, изложенные в работах [5, 7–9], на случай наличия двух подрешеток. Унарные функции распределения каждой из подрешеток представим в виде

$$\rho_{n_i}^\alpha = \frac{1}{Q_i^\alpha}M_{n_i}^\alpha\prod_{j\neq i}^{z}\chi_j^{\bar{\alpha}\alpha}(n_i), \qquad (22)$$

$$\chi_j^{\bar{\alpha}\alpha}(n_i) = e^{-\beta\varphi_j^{\bar{\alpha}}(n_i^\alpha)},\ \ M_{n_i}^\alpha = e^{\beta\mu_i^\alpha n_i}, \qquad (23)$$

$$Q_i^\alpha = \sum_{n_i=0}^{1}M_{n_i}^\alpha\prod_{j\neq i}^{z}\chi_j^{\bar{\alpha}\alpha}(n_i), \qquad (24)$$

где $\varphi_j^{\bar{\alpha}}(n_i^\alpha)$ – средний потенциал частицы, фиксированной в узле i подрешетки α в поле частицы, расположенной в узле j подрешетки $\bar{\alpha}$.

Соответственно, для бинарной функции распределения запишем

$$F(n_i^\alpha n_j^{\bar\alpha}) = \frac{1}{Q_i^\alpha Q_j^{\bar\alpha}} M_{n_i}^\alpha M_{n_j}^{\bar\alpha} \exp\left(-\beta J n_i^\alpha n_j^{\bar\alpha}\right) \times$$

$$\times \prod_{k\neq i,j}^{z} \chi_k^{\bar\alpha}(n_i^\alpha) \prod_{k\neq i,j}^{z} \chi_k^\alpha(n_j^{\bar\alpha}). \qquad (25)$$

Соотношения (22)–(25) применимы к системе с взаимодействием ближайших соседей. В этом случае, с учетом определения (22), выражение для бинарной функции упрощается и принимает вид

$$F(n_i^\alpha n_j^{\bar\alpha}) = \frac{\exp\left(-\beta J n_i^\alpha n_j^{\bar\alpha}\right) \rho_{n_i}^\alpha \rho_{n_j}^{\bar\alpha} M_{n_i}^\alpha M_{n_j}^{\bar\alpha}}{\chi_j^{\bar\alpha}(n_i^\alpha)\chi_i^\alpha(n_j^{\bar\alpha})}. \qquad (26)$$

Для определения функций $\chi_j^{\bar\alpha}(n_i^\alpha)$ используем условия

$$\rho_{n_i}^\alpha = \sum_{n_j^{\bar\alpha}=0}^{1} F(n_i^\alpha, n_j^{\bar\alpha}) \qquad (27)$$

и в результате получим

$$\chi_j^{\bar\alpha}(n_i^\alpha) = \sum_{n_j^{\bar\alpha}=0}^{1} \exp\left(-\beta J n_i^\alpha n_j^{\bar\alpha}\right) \rho_{n_j}^{\bar\alpha} / \chi_i^\alpha(n_j^{\bar\alpha}). \qquad (28)$$

Перейдем к новым функциям

$$\eta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}(n_i) = \frac{\chi_j^{\bar\alpha}(n_i^{\bar\alpha})}{\chi_j^{\bar\alpha}(0_i^{\bar\alpha})}, \quad K_{ij}^{\alpha\bar\alpha} = \chi_j^{\bar\alpha}(0_i^\alpha)\chi_i^\alpha(0_j^{\bar\alpha}) \qquad (29)$$

и преобразуем соотношение (28) к форме

$$K_{ij}^{\alpha\bar\alpha}\eta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}(n_i) = \sum_{n_j^{\bar\alpha}=0}^{1} \frac{\rho_{n_j}^{\bar\alpha}}{\eta_{ij}^{\alpha\bar\alpha}(n_j)} W_{(n_i n_j)}^{\alpha\bar\alpha}, \qquad (30)$$

где

$$W_{(n_i n_j)}^{\alpha\bar\alpha} = \exp\left(-\beta J n_i^\alpha n_j^{\bar\alpha}\right). \qquad (31)$$

Для сокращения обозначений учтем, что

$$\eta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}(0_i) = 1, \qquad (32)$$

и обозначим

$$\eta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}(1_i) = \zeta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}, \quad W = \exp(-\beta J). \qquad (33)$$

В принятых обозначениях запишем следствие из системы уравнений (30):

$$K_{ij}^{\alpha\bar\alpha} = \rho_{0_j}^{\bar\alpha} + \frac{\rho_{1_j}^{\bar\alpha}}{\zeta_{ij}^{\alpha\bar\alpha}}, \quad K_{ji}^{\bar\alpha\alpha} = \rho_{0_i}^\alpha + \frac{\rho_{1_i}^\alpha}{\zeta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}} \qquad (34)$$

и отметим, что

$$K_{ij}^{\alpha\bar\alpha} = K_{ji}^{\bar\alpha\alpha} = K. \qquad (35)$$

В результате приходим к системе уравнений, определяющих функции $\zeta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}$ и $\zeta_{ij}^{\alpha\bar\alpha}$:

$$K\zeta_{ji}^{\bar\alpha\alpha} = \rho_{0_j}^{\bar\alpha} + \frac{W\rho_{1_j}^{\bar\alpha}}{\eta_{ij}^{\alpha\bar\alpha}},$$
$$K\zeta_{ij} = \rho_{0_i}^\alpha + \frac{W\rho_{1_i}^\alpha}{\zeta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}}. \qquad (36)$$

Система уравнений (36) допускает преобразование к двум независимым уравнениям относительно искомых величин:

$$\rho_{0_i}^\alpha \left(\zeta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}\right)^2 + \zeta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}\left(\rho_{1_i}^\alpha - \rho_{0_j}^{\bar\alpha} - W\left(\rho_{1_j}^{\bar\alpha} - \rho_{1_i}^\alpha\right)\right) -$$
$$- W\rho_{1_i}^\alpha = 0, \qquad (37)$$

$$\rho_{0_j}^{\bar\alpha} \left(\zeta_{ij}^{\alpha\bar\alpha}\right)^2 + \zeta_{ij}^{\alpha\bar\alpha}\left(\rho_{1_j}^{\bar\alpha} - \rho_{0_i}^\alpha - W\left(\rho_{1_i}^\alpha - \rho_{1_j}^{\bar\alpha}\right)\right) -$$
$$- W\rho_{1_j}^{\bar\alpha} = 0. \qquad (38)$$

Решая уравнения (37), (38) относительно величин $\zeta_{ij}^{\alpha\bar\alpha}$, находим

$$e^{\beta\mu_i^\alpha} = \frac{\rho_{1_i}^\alpha / \rho_{0_i}^\alpha}{\prod_{j\neq i}^{z} \zeta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}}, \qquad (39)$$

$$F(n_i^\alpha, n_j^{\bar\alpha}) = \frac{W_{(n_i n_j)}^{\alpha\bar\alpha} \rho_{n_i}^\alpha \rho_{n_j}^{\bar\alpha} M_{n_i}^\alpha M_{n_j}^{\bar\alpha}}{\eta_{ji}^{\bar\alpha\alpha}(n_i)\eta_{ij}^{\alpha\bar\alpha}(n_j) K_{ji}^{\bar\alpha\alpha}}. \qquad (40)$$

Используя (37)–(40), вычисляем величины, определяющие потоки (4), позволяющие, согласно (6), найти изменения плотностей в каждом узле подрешеток *a* и *b* исходной решетки. Это и дает возможность исследовать процессы эволюции в рассматриваемой системе.

3. Эволюция параметра порядка в однородной системе. Рассмотрим релаксацию параметра порядка в однородной системе. При этом плотности чисел частиц одинаковы на всех узлах каждой из подрешеток и, согласно (11), равны

$$\rho_a = c + \delta, \quad \rho_b = c - \delta. \qquad (41)$$

В соответствии с соотношением (39):

$$e^{\beta\mu^a} = \frac{c+\delta}{1-c-\delta}\left(\zeta^{ba}\right)^{-z}, \qquad (42)$$

$$e^{\beta\mu^b} = \frac{c-\delta}{1-c+\delta}\left(\zeta^{ab}\right)^{-z}. \qquad (43)$$

Согласно соотношению (37):

$$\left(\zeta^{ba}\right)^2 + \zeta^{ba}\frac{2c-1+2W\delta}{1-(c+\delta)} -$$
$$- W\frac{c+\delta}{1-(c+\delta)} = 0 \qquad (44)$$

Уравнение для ζ^{ab} получается из (44) после замены на противоположные знаков перед слагаемыми, содержащими δ. Соответственно, функция (40), содержащаяся в выражении (4) для потока, принимает вид

$$F(0,0) = \frac{(1-(c+\delta))(1-(c-\delta))}{K}, \qquad (45)$$

$$K = (1-(c+\delta)) + \frac{c+\delta}{\zeta^{ba}} =$$
$$= (1-(c-\delta)) + \frac{(c-\delta)}{\zeta^{ab}}. \qquad (46)$$

Далее вычитая потоки в (6) при $\alpha = a$, b и учитывая (4) и (11), находим

$$\frac{d\delta}{dt} = w_0 F(0,\ 0) z(e^{\beta\mu^b} - e^{\beta\mu^a}). \qquad (47)$$

Уравнение (47) с учетом уравнений (42)–(46) позволяет рассмотреть эволюцию параметра порядка при различных условиях.

На рис. 2 и 3 представлены результаты численного решения уравнения (47) по алгоритму Эйлера. Релаксационные кривые отражают изменение с течением времени параметра порядка в упорядоченной и неупорядоченной фазах.

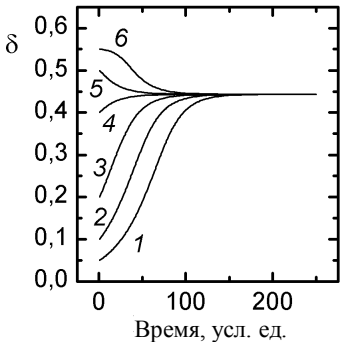


Рис. 2. Релаксация параметра порядка в упорядоченной фазе при температуре $t = 0{,}95$ и средней концентрации $c = 0{,}45$. Начальное значение параметра порядка 0,05 (кривая *1*); 0,1 (*2*); 0,2 (*3*); 0,4 (*4*); 0,5 (*5*); 0,55 (*6*)

Параметр порядка, независимо от начального его значения, с течением времени выходит на равновесное значение (рис. 2). Следует отметить, что начальные значения параметра порядка на кривых *5* и *6* не обладают физическим смыслом, поскольку соответствуют отрицательной концентрации на одной из подрешеток.

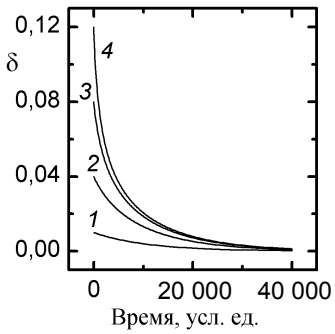


Рис. 3. Релаксация параметра порядка в неупорядоченной фазе при температуре $t = 0{,}95$ и средней концентрации $c = 0{,}14$. Начальное значение параметра порядка 0,01 (кривая *1*); 0,04 (*2*); 0,08 (*3*); 0,12 (*4*)

В неупорядоченной фазе (рис. 3) параметр порядка стремится к равновесному нулевому значению практически экспоненциально, причем время релаксации примерно на два порядка величины превышает таковое в упорядоченной фазе.

Заключение. Таким образом, использование локально-равновесного распределения на основе локальных химических потенциалов и разбиение решетки на две подрешетки позволили сформулировать уравнения типа уравнений Ландау – Гинзбурга для описания эволюции средней плотности и параметра порядка.

Рассмотрен также более общий случай, когда отклонение от равновесия не считается малым. Метод средних потенциалов позволил сформулировать систему нелинейных уравнений для средней плотности и параметра порядка.

Литература

1. Plapp, M. Dendritic growth in a mean-field lattice gas model / M. Plapp, J.-F. Gouyet // Phys. Rev. E. – 1997. – Vol. 65, № 1. – P. 45–57.
2. Ionic diffusion on a lattice: Effects of the order-disorder transition on the dynamics of non-equilibrium systems / R. Nassif [et al.] // Eur. Phys. J. B. – 1998. – Vol. 1. – P. 453–464.
3. Chen, L.-Q. Phase-field models for microstructure evolution / L.-Q. Chen // Annu. Rev. Mater. Res. – 2002. – Vol. 32. – P. 113–140.
4. Electrochemical modeling of intercalation processes with phase field models / B. C. Han [et al.] // Electrochimica Acta. – 2004. – Vol. 49, № 26. – P. 4691.
5. Бокун, Г. С. Статистико-механическое описание эволюции межфазной границы в решеточной системе / Г. С. Бокун, Р. Н. Ласовский // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 53–56.
6. Лифшиц, Е. М. Физическая кинетика / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – М.: Наука, 1979. – 527 с.
7. Vikhrenko, V. S. The diagram approximation for lattice systems / V. S. Vikhrenko, Ya. G. Groda, G. S. Bokun // Phys. Let. A. – 2001. – Vol. 286, № 2/3. – P. 127–133.
8. Ротт, Л. А. Статистическая теория молекулярных систем / Л. А. Ротт. – М.: Наука, 1979. – 280 с.
9. Narkevich, I. I. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in density fluctuation theory / I. I. Narkevich // Physica A. – 1982. – Vol. 112. – P. 167−192.

УДК 531.19

Р. Н. Ласовский, ассистент; Г. С. Бокун, доцент

ЭВОЛЮЦИЯ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЫ В ПРИБЛИЖЕНИЯХ СРЕДНЕГО ПОЛЯ И КВАЗИХИМИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

The continuity equation is used for deriving the equation for the particle distribution profile evolution in the transition region from the condensed phase to the rarefied one. The solutions of this equation are obtained in the framework of the mean field and the quasichemical approximations. The density profile in the rarefied phase is approximately linear that allows us to calculate the chemical diffusion coefficient that is in a satisfactory agreement with the Zhdanov's expression.

Введение. Моделирование по методу Монте-Карло разряда интеркаляционного источника тока [1] показало, что в профиле концентрации частиц интеркалянта присутствует переходной слой. Исследованию распределения плотности в переходной области посвящены многочисленные работы, в которых для получения результатов часто прибегают к различным упрощениям [2].

В работе [3] разработана методика исследования эволюции неравновесной неоднородной решеточной системы при наличии фазового перехода конденсированная – разреженная фаза. Ниже сформулирована замкнутая система уравнений, описывающая изменение плотности, и изучена кинетика решеточного флюида с притяжением ближайших соседей в приближениях среднего поля и квазихимическом.

1. Квазихимическое приближение. Изменение плотности частиц интеркалянта подчиняется уравнению неразрывности

$$\frac{\partial \rho_{1i}}{\partial t} = \sum_{j \neq i}^{Z} < I_{ij} >, \qquad (1)$$

где суммирование ведется по всем узлам, являющимся первыми соседями узла i.

Микроскопический поток через границу между узлами i и j определяется выражением [3]

$$I_{ij} = w_0 F(0_i, 0_j)(e^{\beta\mu_j} - e^{\beta\mu_i}), \qquad (2)$$

где w_0 – частота перескоков частицы в пределе низких концентраций; $F(0_i, 0_j)$ – неравновесная бинарная функция распределения, определяющая вероятность того, что ближайшие соседние узлы i и j вакантны; $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обратная температура; k_B – постоянная Больцмана; μ_i – локальное значение химического потенциала, отнесенное к узлу i.

С помощью приближения средних потенциалов бинарную функцию распределения можно записать в виде [3]

$$F(n_i, n_j) = (Q_i Q_j)^{-1} M_{n_i} M_{n_j} \exp\left(-\beta J n_i n_j\right) \times \\ \times \prod_{k \neq i,j} \chi_k(n_i) \prod_{k \neq j,i} \chi_k(n_j), \qquad (3)$$

где n_i – число заполнения i-й ячейки, принимающее значение 0 (если узел занят частицей) или 1 (в случае свободного узла),

$$Q_{n_i} = \sum_{n_i=0}^{1} M_{n_i} \prod_{j \neq i} \chi_j(n_i), \qquad (4)$$

$$M_{n_i} = e^{\beta\mu_i n_i}, \quad \chi_j(n_i) = e^{-\beta\varphi_j(n_i)}, \qquad (5)$$

J – энергия взаимодействия ближайших соседей; $\varphi_j(n_i)$ – средние потенциалы взаимодействия вакансии ($n_i = 0$) или частицы ($n_i = 1$) с ближайшим соседним узлом j.

Условие нормировки бинарной функции распределения записывается в виде

$$\rho_{n_i} = \sum_{n_j=0}^{1} F(n_i, n_j), \qquad (6)$$

где ρ_{n_i} – унарная функция распределения (концентрация частиц при $n_i = 1$ или вакансий при $n_i = 0$), для которой справедливо выражение

$$\rho_{n_i} = (Q_i)^{-1} M_{n_i} \prod_{j \neq i} \chi_j(n_i). \qquad (7)$$

Используя соотношения (3)–(5) при выполнении условия (6), можно записать систему уравнений, с помощью которых вычисляются функции $\chi_j(n_i)$:

$$\chi_j(n_i) = \sum_{n_j} \frac{\rho_{n_j}}{\chi_i(n_j)} \exp(-\beta J n_i n_j), \\ \chi_i(n_j) = \sum_{n_i} \frac{\rho_{n_i}}{\chi_j(n_i)} \exp(-\beta J n_i n_j). \qquad (8)$$

Следует отметить, что эта система не имеет явного решения относительно $\chi_j(n_i)$. Однако при подстановке соотношений (4) и (5) в выражение (3) функция распределения $F(0_i, 0_j)$ приобретает вид

$$F(0_i, 0_j) = \frac{\rho_{0i}\rho_{0j}}{\chi_j(0_i)\chi_j(0_i)}. \qquad (9)$$

Это выражение содержит только произведение $\chi_j(0_i)\chi_j(0_i)$. Введя обозначения

$$K = \chi_j(0_i)\chi_j(0_i), \qquad (10)$$

$$\eta_{ij} = \frac{\chi_i(1_j)}{\chi_i(0_j)}, \quad \eta_{ji} = \frac{\chi_j(1_i)}{\chi_j(0_i)}, \qquad (11)$$

перепишем систему уравнений (8) в виде

$$K = \rho_{0j} + \frac{\rho_{1j}}{\eta_{ij}}, \quad K = \rho_{0i} + \frac{\rho_{1i}}{\eta_{ji}}, \qquad (12)$$

$$K\eta_{ji} = \rho_{0j} + \frac{W\rho_{1j}}{\eta_{ij}},\ K\eta_{ij} = \rho_{0i} + \frac{W\rho_{1i}}{\eta_{ji}}, \quad (13)$$

$$W = \exp(-\beta J). \quad (14)$$

Решая совместно системы уравнений (12) и (13), приходим к квадратному уравнению, определяющему η_{ij}:

$$\eta_{ij}^2 + \eta_{ij}\frac{\rho_{1j} - \rho_{0i} - W(\rho_{1i} - \rho_{1j})}{\rho_{0j}} - \frac{W\rho_{1j}}{\rho_{0j}} = 0. \quad (15)$$

Для нахождения η_{ji} в последнем уравнении необходимо поменять индексы местами.

Чтобы удовлетворить соотношениям (5) и (11), из двух корней уравнения (15) необходимо выбрать положительный.

Для заданного начального распределения плотности частиц ρ_{n_i} по уравнениям (15), (12) и (9) определяется неравновесная бинарная функция распределения, а затем с помощью выражения (7) вычисляется химический потенциал в произвольном узле i:

$$e^{\beta\mu_i} = \frac{\rho_{1i}}{\rho_{0_i}}\prod_{j\neq i}^{z}\eta_{ji}. \quad (16)$$

Далее рассчитывается поток (2) между узлами и с помощью уравнения неразрывности (1) производная плотности числа частиц по времени. Последующее использование схемы Эйлера позволяет проинтегрировать дифференциальное уравнение (1) и исследовать эволюцию распределения плотности системы при различных условиях.

2. Приближение среднего поля. Хорошо известно, что в приближении среднего поля бинарная функция распределения находится произведением унарных

$$F(0_i, 0_j) = \rho_{0i}\rho_{0j}. \quad (17)$$

Для определения $e^{\beta\mu_i}$, входящего в уравнение (2), запишем выражение для свободной энергии равновесной системы в рассматриваемом приближении

$$F = k_B T\left(\rho\ln\rho + (1-\rho)\ln(1-\rho)\right) + \frac{z}{2}J\rho^2, \quad (18)$$

где ρ – концентрация частиц; z – число ближайших соседей.

Теперь вычислив производную от свободной энергии по концентрации, получим выражение для химического потенциала

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial\rho} = k_B T\left(\ln\frac{\rho}{1-\rho}\right) + zJ\rho, \quad (19)$$

или, обобщая полученное выражение на неоднородную неравновесную систему и предполагая, что неоднородность существует лишь вдоль направления, перпендикулярного выбранным слоям, для слоя i запишем

$$\beta\mu_i = \ln\frac{\rho_i}{1-\rho_i} + J\left(\rho_{i-1} + 2\rho_i + \rho_{i+1}\right). \quad (20)$$

Просуммировав элементарные потоки в правой части уравнения (1), получим

$$I_{i,i+1} = W_0\left[\rho_{i+1}(1-\rho_i)\exp[J(\rho_i + 2\rho_{i+1} + \rho_{i+2})] - \right.$$
$$\left. - \rho_i(1-\rho_{i+1})\exp[J(\rho_{i-1} + 2\rho_i + \rho_{i+1})]\right]. \quad (21)$$

Задавая начальное распределение плотности частиц и интегрируя численно по схеме Эйлера уравнение (1), можно исследовать кинетику решеточной системы.

3. Результаты вычислений и их обсуждение. Результаты численного интегрирования уравнения неразрывности (1) в приближениях среднего поля и квазихимическом показаны на рис. 1 и 2 соответственно.

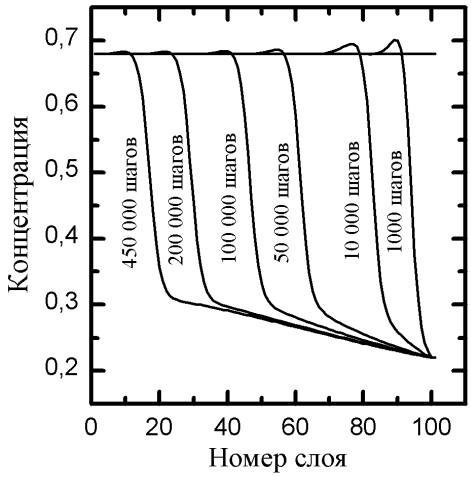


Рис. 1. Эволюция межфазной границы в приближении среднего поля

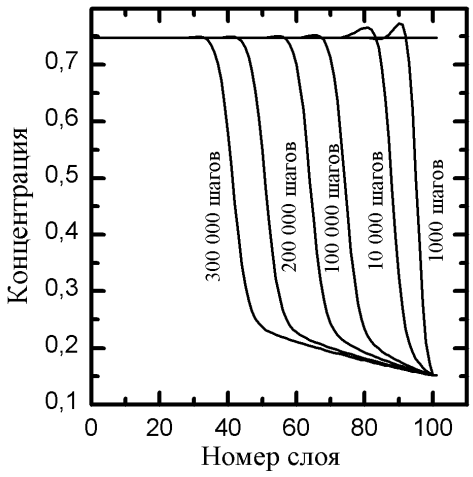


Рис. 2. Эволюция межфазной границы в квазихимическом приближении

На рисунках отражено изменение профилей поля плотности с течением времени при условии, что в начальный момент концентрация частиц во всей системе была постоянной и рав-

ной равновесной концентрации конденсированной фазы, и лишь на левой границе концентрация поддерживалась на уровне несколько ниже равновесной концентрации разреженной фазы. Тем самым имитировались условия разряда интеркаляционного источника тока.

Как видно из приведенных рисунков, переходной слой имеет явно выраженный «горб», который уменьшается со временем. Подобная картина наблюдается при моделировании разряда интеркаляционной батареи по методу Монте-Карло [1]. Наличие «горба» может быть обусловлено фрактальной структурой [4] границы раздела фаз и межчастичным притяжением ближайших соседей. Подвижность частиц интеркалянта, находящихся в переходной области, сильно зависит от концентрации в их ближайшем окружении. Частицы в области меньших плотностей ввиду меньшего количества ближайших соседей имеют более высокую подвижность и поэтому чаще способны перескакивать в область больших плотностей, чем частицы из более плотной части в разреженную. Однако суммарный поток регулируется также наличием вакансий, которых в плотной области меньше. Конкуренция этих двух факторов и приводит к появлению отмеченного выше «горба».

Необходимо отметить, что процесс разряда системы в квазихимическом приближении длится примерно в полтора раза дольше по сравнению с приближением среднего поля.

В разреженной фазе профиль плотности практически линейно зависит от координаты, что является следствием слабой зависимости химического коэффициента диффузии от концентрации в этой области концентраций.

Коэффициент диффузии в разреженной области можно рассчитать по закону Фика

$$I = -D_{ch}\nabla\rho, \qquad (22)$$

где ∇ – оператор градиента.

Поток числа частиц определялся по соотношению

$$I = \frac{\Delta N}{\Delta t}, \qquad (23)$$

где ΔN – количество частиц, пресекших некоторую поверхность в системе за время Δt, определяемое по балансу числа частиц в соответствующей области системы:

$$\Delta N = \sum_{i=0}^{k}\rho_i(t) - \sum_{i=0}^{k}\rho_i(t+\Delta t). \qquad (24)$$

Здесь суммирование ведется до k-го слоя, через границу которого рассчитывается поток.

Для определения градиента концентрации, входящего в (22), профиль концентрации в разреженной области аппроксимировался прямой линией, тангенс угла наклона которой (искомый градиент) составил 0,00149.

Заключение. В результате использования соотношения (23) химический коэффициент диффузии получился равным 0,025. Коэффициент диффузии, рассчитанный в квазихимическом приближении по формуле Жданова [5], оказался равным 0,018. Некоторое различие в полученных значениях объясняется зависимостью коэффициента диффузии от концентрации и отклонениями профиля плотности от линейной зависимости.

Литература

1. Ласовский, Р. Н. Моделирование по методу Монте-Карло разряда источника тока / Р. Н. Ласовский // Труды БГТУ. Сер. IV, Физ.-мат. науки и информ. – 2005. – Вып. XIII. – С. 49–52.

2. Electrochemical modeling of intercalation processes with phase field models / B. C. Han [et al.] // Electrochimica Acta. – 2004. – Vol. 49, № 26. – P. 4691.

3. Бокун, Г. С. Статистико-механическое описание эволюции межфазной границы в решеточной системе / Г. С. Бокун, Р. Н. Ласовский // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 53–56.

4. Ласовский, Р. Н. Структурные характеристики и натяжение межфазного слоя двухмерной решеточной модели / Р. Н. Ласовский, В. С. Вихренко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2003. – Вып. XI. – С. 78–84.

5. Ласовский, Р. Н. Диффузионные характеристики низкоразмерных систем / Р. Н. Ласовский // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2006. – Вып. XIV. – С. 71–73.

УДК 531.19+539.219.3

Д. В. Гапанюк, ассистент

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФФУЗИИ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ СООТНОШЕНИЙ

Computer simulations are used for investigating equilibrium and diffusion characteristics of two-component systems of attractively interacting particles on a square lattice. The Monte-Carlo simulation algorithms are adjusted for peculiarities of the systems considered. The equations connecting the component kinetic diffusion coefficients and equilibrium lattice fluid characteristics are derived. The analytical calculations and Monte-Carlo simulation results are in a satisfactory agreement.

Введение. Исследованию равновесных характеристик и неравновесных процессов в однокомпонентных решеточных системах посвящена обширная литература (см. [1–4] и имеющиеся там ссылки). Более сложные двухкомпонентные системы изучены мало. Можно отметить работу [5], в которой рассмотрена диффузия по вакансионному механизму при малых (до 0,05) концентрациях вакансий, а также ряд работ по исследованию некоторых особенностей многокомпонентных систем [6–8]. Согласно феноменологической теории необратимых процессов [9], потоки компонентов пропорциональны градиентам соответствующих химических потенциалов с коэффициентами пропорциональности, называемыми кинетическими коэффициентами диффузии. С другой стороны, согласно закону Фика, потоки компонентов пропорциональны градиентам концентрации, и в эти выражения входят коэффициенты химической диффузии. Перерасчет коэффициентов диффузии осуществляется с помощью производных химических потенциалов по концентрациям компонентов.

Целью данной работы является сопоставление результатов моделирования коэффициентов диффузии двухкомпонентного решеточного флюида по методу Монте-Карло с аналитическими соотношениями.

1. Моделирование равновесных свойств двухкомпонентных систем. Как и в случае однокомпонентного решеточного флюида, моделирование двухкомпонентного флюида по методу Монте-Карло может быть проведено в каноническом и в большом каноническом ансамблях. При изучении равновесных свойств системы с целью экономии машинного времени более предпочтительным оказывается моделирование в большом каноническом ансамбле, поскольку в этом случае выход на равновесное состояние происходит по экспоненциальному закону [10], в то время как в каноническом ансамбле – по степенному [11]. Независимыми параметрами, определяющими свойства модели, являются температура и химический потенциал каждого из компонентов, а число частиц на решетке изменяется в процессе эволюции системы из некоторого произвольного состояния в равновесное гиббсовское состояние.

Исходным состоянием может служить любое распределение частиц по решеточным узлам. Выбрав случайным образом i-й узел решетки, находящийся в одном из трех состояний (вакансия либо частица сорта A или B), необходимо изменить его состояние и определить соответствующее изменение энергии системы δH. В отличие от однокомпонентного флюида, где переход между различными состояниями решеточного узла мог быть осуществлен единственным способом (вакансия (частица) $\rightarrow$ частица (вакансия)), в двухкомпонентном флюиде он может быть реализован двумя различными способами.

Перед изменением состояния решеточного узла необходимо произвести выбор направления этого перехода. В предлагаемом алгоритме выбор направления перехода производится случайным образом – состояние решеточного узла изменяется на одно из оставшихся двух возможных с вероятностью 1/2, т. е. в вакантный узел помещается частица одного из сортов, а в узел, уже занятый частицей, либо помещается частица другого сорта, либо извлекается находившаяся в нем. Если изменение состояния решеточного узла приводит к понижению энергии системы, то оно принимается, если же энергия возрастает, то оно принимается с вероятностью $\exp(-\beta\delta H)$, где $\beta = 1 / k_B T$ – обратная температура. Повторение указанной процедуры n раз, где n – суммарное число частиц в системе, формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

После эквилибризации системы посредством выполнения заданного количества МКШ ($\sim 10^4$) искомая макроскопическая характеристика находится усреднением соответствующей микроскопической величины по реализациям системы в процессе моделирования. При этом начальное число МКШ, отводимое на процесс эквилибризации системы, не учитывается при усреднении.

Для верификации предложенного алгоритма было проведено моделирование двухкомпонентного невзаимодействующего решеточного флюида, результаты которого представлены на рис. 1.

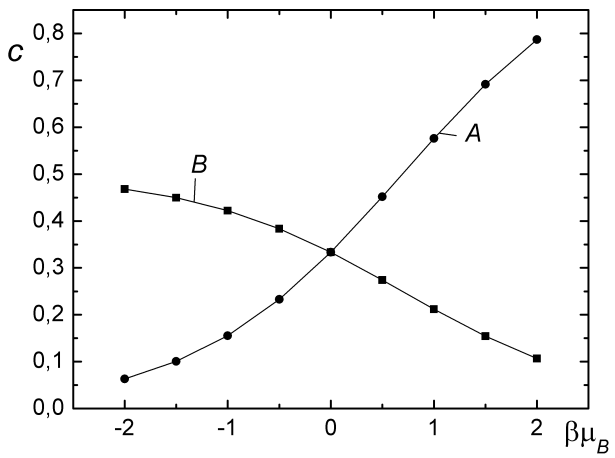


Рис. 1. Зависимость концентрации компонентов невзаимодействующего бинарного решеточного флюида от химического потенциала второго компонента при $\beta\mu_A = 0$. Точки – результаты моделирования; линии – теоретические значения, согласно уравнениям (1) и (2)

Рисунок демонстрирует, что значения равновесных концентраций, полученные в результате моделирования (отображены символами), полностью соответствуют теоретическим значениям (сплошные линии), определяемым уравнениями через химические потенциалы частиц соответствующего сорта $\mu_{A(B)}$

$$c_A = \frac{\exp(\beta\mu_A)}{1+\exp(\beta\mu_A)+\exp(\beta\mu_B)}, \qquad (1)$$

$$c_B = \frac{\exp(\beta\mu_B)}{1+\exp(\beta\mu_A)+\exp(\beta\mu_B)}, \qquad (2)$$

что подтверждает работоспособность предложенного алгоритма.

2. Диффузионные характеристики двухкомпонентных систем. В работах [12, 13] рассмотрена диффузия в двухкомпонентных системах на основе квазиравновесного распределения. Более полный статистико-механический анализ этого явления при произвольном числе компонентов может быть выполнен на основе метода неравновесных статистических ансамблей [14, 15].

Аналитические выражения для кинетических коэффициентов диффузии бинарного решеточного флюида, состоящего из частиц сортов A и B, имеют вид

$$D_{JA} = D_{0A} c_A^{-1} \exp(\beta\mu_A) F(0,0), \qquad (3)$$

$$D_{JB} = D_{0B} c_B^{-1} \exp(\beta\mu_B) F(0,0), \qquad (4)$$

где $D_{0A(B)}$ – коэффициент диффузии невзаимодействующего решеточного газа; $c_{A(B)}$ – концентрация; $\mu_{A(B)}$ – химический потенциал частиц соответствующего сорта; $F(0, 0)$ – вероятность двум соседним узлам решетки быть вакантными.

Для определения концентраций компонентов и вероятностей двум соседним узлам быть вакантными, входящих в выражения (3) и (4), было проведено моделирование равновесных свойств по методу Монте-Карло, алгоритм которого описан выше.

Рассматривалась система частиц сортов A и B на периодической двухмерной решетке размером $L\times L$ ($L = 32$) узлов при заданных температуре $T = 2T_c$ и химических потенциалах. Потенциалы взаимодействия между частицами соответствующих сортов, являющихся ближайшими соседями, определялись величинами $J_{AA} = -J$, $J_{BB} = I_B J_{AA}$, $J_{AB} = I_{AB} J_{AA}$. Для частиц сорта B, характеризующихся более интенсивным межчастичным взаимодействием, $I_{AB} > 1$, $I_B > 1$ (при межчастичном притяжении энергии взаимодействия отрицательны, но здесь указаны их значения в единицах $J > 0$).

На рис. 2 представлены результаты моделирования зависимости концентраций компонентов от химического потенциала компонента B при постоянном значении химического потенциала компонента A.

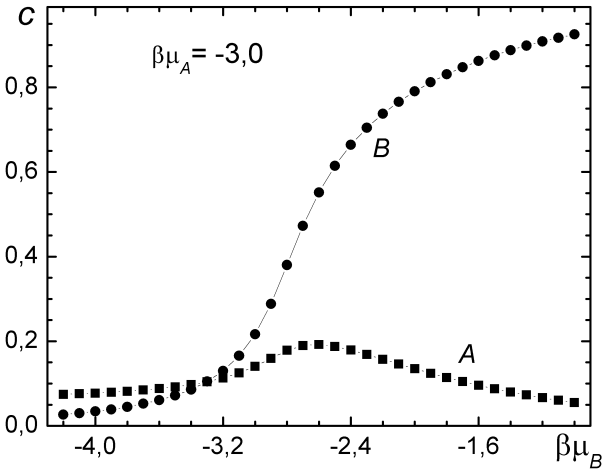


Рис. 2. Зависимость концентрации компонентов бинарного решеточного флюида от химического потенциала второго компонента при $t = 2$

Для найденных концентраций компонентов выполнено моделирование диффузии (при условии $D_{0A} = D_{0B} = D_0$) и найдены кинетические коэффициенты диффузии (рис. 3) [13].

Для оценки вклада эффектов памяти в коэффициент диффузии были сопоставлены значения, даваемые выражениями (3) и (4), с результатами моделирования. Как и следовало ожидать, вклад эффектов памяти оказался значительным, и данные выражения обеспечивают лишь полуколичественное соответствие с данными моделирования.

Как известно, коэффициенты диффузии меченых частиц в однокомпонентных системах отличаются от кинетических коэффици-

ентов диффузии корреляционным фактором. При вычислении коэффициента диффузии меченых частиц в однокомпонентной системе последнюю можно рассматривать как бесконечно разбавленную двухкомпонентную с одинаковыми потенциалами взаимодействия частиц обоих сортов. Тогда кинетический коэффициент диффузии частиц разбавленного компонента будет равным коэффициенту диффузии меченой частицы исходной системы, т. е. кинетическому коэффициенту диффузии, умноженному на корреляционный фактор. Следовательно, для реальной двухкомпонентной системы также следует учесть соответствующим корреляционным фактором взаимное влияние компонентов, обусловленное наличием корреляций в движении частиц разных сортов, не учитываемым соотношениями (3) и (4).

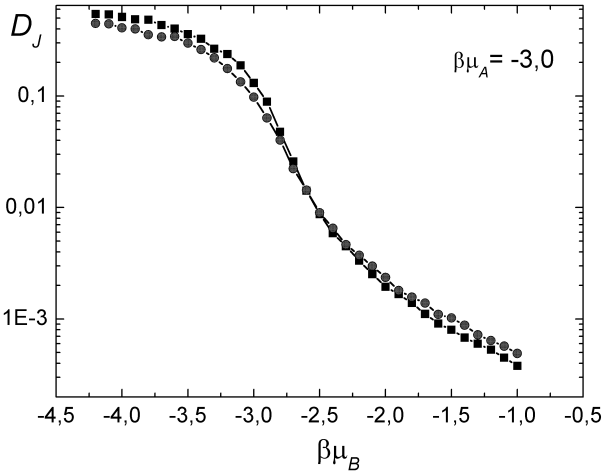


Рис. 3. Зависимость кинетических коэффициентов диффузии компонента *B* от химического потенциала второго компонента при $\beta\mu_A = -3{,}0$: ■ – D_{JA}; ● – D_{JB} (Линии, соединяющие точки, проведены для наглядности.)

Для невзаимодействующих частиц корреляционный фактор как функция концентрации определяется выражением [4]

$$f_t(c) = 1 - \frac{2c}{6 - c - \xi(2 - c)}, \qquad (5)$$

где $\xi \cong 1{,}1056$.

В многокомпонентной системе в качестве концентрации в корреляционном факторе следует принять сумму концентраций всех компонентов за исключением рассматриваемого в ближайшем окружении частицы этого компонента. В результате для бинарной системы корреляционные факторы следует записать в виде

$$f_{A(B)} = 1 - \frac{2F_{AB}/c_{A(B)}}{6 - F_{AB}/c_{A(B)} - \xi(2 - F_{AB}/c_{A(B)})}. \qquad (6)$$

Помимо этого, из представленных на рис. 3 результатов моделирования следует, что менее подвижные частицы компонента *B* существенно затрудняют движение частиц более подвижного компонента *A*. Влияние замедления может быть учтено дополнительным множителем

$$f_{sl} = \exp\left[\frac{-2\beta F_{AB}F_{BB}(J_{BB} - J_{AA})}{c_A c_B}\right] \times$$
$$\times \exp\left[\frac{-2\beta F_{AB}F_{BA}(J_{AB} - J_{AA})}{c_A c_B}\right], \qquad (7)$$

который определяется отношением подвижностей частиц компонента *B* в окружении таких же частиц и частиц компонента *A*. При конструировании этого выражения вычислены в суперпозиционном приближении трехузловые функции F_{ABB} и F_{ABA} и определены вероятности того, что при условии нахождения частицы сорта *B* вблизи рассматриваемой частицы сорта *A* еще один ближайший узел к частице *B* занят частицей сорта *A* или *B* соответственно.

В результате соотношения для кинетических коэффициентов диффузии приобретают вид

$$D_{JA} = D_{0A} f_A f_{sl} \frac{e^{\beta\mu_A}}{c_A} F(0,0), \qquad (8)$$

$$D_{JB} = D_{0B} f_B \frac{e^{\beta\mu_B}}{c_B} F(0,0). \qquad (9)$$

Сопоставление значений, полученных по аналитическим соотношениям (8) и (9), и результатов моделирования представлено на рис. 4 и 5. Можно отметить хорошее соответствие для кинетического коэффициента диффузии менее подвижного компонента *B* и вполне удовлетворительные результаты для компонента *A* (рис. 4, кривая *3*).

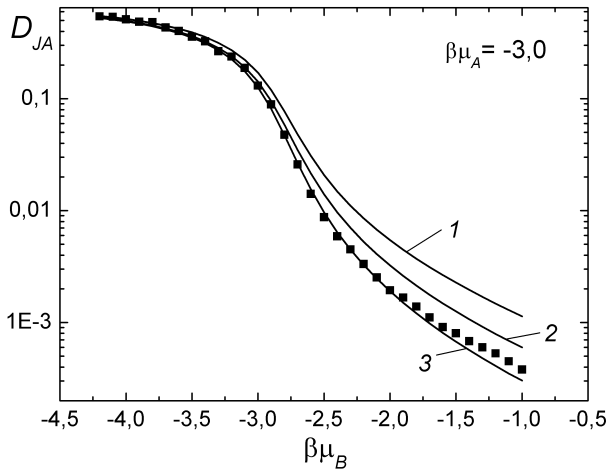


Рис. 4. Зависимость кинетического коэффициента диффузии компонента *A* от химического потенциала второго компонента при $\beta\mu_A = -3{,}0$. Результаты моделирования: ■ – D_{JA}; теоретические значения: *1* – по выражению (3); *2* – по выражению (8) (без учета дополнительного множителя f_{sl}); *3* – с учетом f_{sl}

Анализируя данные, представленные на рис. 5, можно также сделать вывод, что более

легкий компонент сорта *A* не оказывает существенного влияния (за исключением влияния через корреляционный фактор) на значения кинетических коэффициентов диффузии более тяжелого компонента сорта *B*, который, в свою очередь, и определяет динамику рассматриваемой системы.

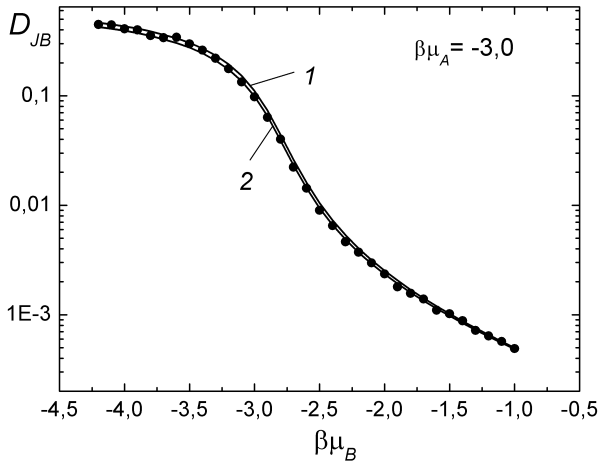


Рис. 5. Зависимость кинетического коэффициента диффузии компонента *B* от химического потенциала второго компонента при $\beta\mu_A = -3{,}0$. Результаты моделирования: ● – D_{JB}; теоретические значения: *1* – по выражению (4); *2* – по выражению (9)

Заключение. В работе описана методика моделирования равновесных свойств двухкомпонентной решеточной системы, результаты которого дают возможность определения кинетических коэффициентов диффузии по аналитическим соотношениям (3) и (4). Введены корреляционные факторы, учитывающие взаимное воздействие частиц разных сортов, а также дополнительный множитель, учитывающий влияние замедления менее подвижного компонента на диффузию более подвижного. Проведено моделирование диффузии по методу Монте-Карло, в результате которого определены кинетические коэффициенты диффузии. Результаты вычислений по аналитическим выражениям (8) и (9) находятся в удовлетворительном соответствии с данными метода Монте-Карло.

Литература

1. Surface diffusion: atomistic and collective processes / eds.: M. C. Tringides. – NATO-ASI Series. – New York: Plenum Press, 1997. – 736 p.

2. Collective diffusion on surfaces: correlation effects and adatom interaction / eds.: M. C. Tringides, Z. Choj // NATO Science Series. – 2001. – Vol. 29. – 350 p.

3. The self-consistent diagram approximation for lattice systems: diffusion properties of interacting lattice gases / G. S. Bokun [et al.] // Physica A. – 2000. – Vol. 296, № 1/2. – P. 83–105.

4. Lattice-gas theory of collective diffusion in adsorbed layers / A. Danani [et al.] // Int. J. Mod. Phys. B. – 1997. – Vol. 11, № 19. – P. 2217–2279.

5. Tafa, K. Kinetics of phase separation in ternary mixtures / K. Tafa, S. Puri, D. Kumar // Phys. Rev. E. – 2001. – Vol. 64. – P. 056139.

6. Гапанюк, Д. В. Моделирование диффузии в двухкомпонентных решеточных системах при различающихся энергиях связи с подложкой / Д. В. Гапанюк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2004. – Вып. XII. – С. 32–36.

7. Kehr, K. W. Mobility, interdiffusion and tracer diffusion in lattice-gas models of two-component alloys / K. W. Kehr, K. Binder, S. M. Reulein // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 39. – P. 4891.

8. Monte Carlo simulation of diffusion in a B2-ordered model alloy / R. Weinkamer [et al.] // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 58. – P. 3082.

9. Гроот, С. Р. Неравновесная термодинамика / С. Р. де Гроот, П. Мазур. – М.: Мир, 1964. – 456 с.

10. Time evolution of quenched binary alloy – computer simulation of a 2-dimensional model system / A. B. Bortz [et al.] // Phys. Rev. B. – 1974. – Vol. 10, № 2. – P. 535–541.

11. Binder, K. Multicritical phenomena at surface / K. Binder, D. P. Landau // Surf. Sci. – 1976. – Vol. 61, № 2. – P. 577–602.

12. Statistical mechanical description and Monte Carlo simulation of diffusion in two-component lattice systems / G. S. Bokun [et al.] // Electrochimica Acta. – 2005 – Vol. 50, № 8. – P. 1725–1731.

13. Бокун, Г. С. Статистико-механическое описание и компьютерное моделирование диффузии в двухкомпонентных решеточных системах / Г. С. Бокун, В. С. Вихренко, Д. В. Гапанюк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2003. – Вып. XI. – С. 63–68.

14. Зубарев, Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика / Д. Н. Зубарев. – М.: Наука, 1971. – 416 с.

15. Zubarev, D. Statistical mechanics of nonequilibrium processes: in 2 vol. / D. Zubarev, V. Morozov, G. Repke. – Berlin: Akademic Verlag, 1997. – Vol. 2. – 375 p.

УДК 539.12

Д. В. Кленицкий, ст. преподаватель; В. Н. Чайчиц, студент

ОГРАНИЧЕНИЯ НА ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ РАЗМЕР КВАРК-ГЛЮОННОЙ ПЛАЗМЫ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

We study the limitations on the spatial size of quark-gluon plasma which is probably produced in high energy heavy ion collisions at the AGS, SPS, RHIC and LHC colliders. The plasma size depends from the size of hadron phase and collision energy. The estimation of the plasma size shows that the finite volume effects are need to consider at AGS and SPS energies and these effects can be neglected at RHIC and LHS energies.

Введение. Термин «кварк-глюонная плазма» был введен в конце 70-х гг. прошлого столетия. По сути, это понятие означает существование макроскопического ансамбля слабовзаимодействующих кварков и глюонов при температуре T в некоторой пространственной области, сравнимой с размерами адрона. Данное состояние является экстремальным состоянием ядерной материи, которое образуется лишь пр и достаточно высокой плотности энергии (при высокой температуре и/или большой плотности барионного заряда).

Первоначально интерес к возможным экстремальным (субадронным) состояниям ядерного вещества возник в связи с проблемами космологии и астрофизики. Лишь в далекие времена Большого Взрыва, а также в глубоких недрах нейтронных звезд при сильном гравитационном сжатии можно было представить существование условий, характерных для состояния кварк-глюонной плазмы. Позже была осознана экспериментальная возможность создания экстремальных условий существования ядерной материи путем отбора особых событий (центральных столкновений с малым прицельным параметром) в соударениях адронов и, особенно, тяжелых ионов высоких энергий. На начальной стадии центрального столкновения тяжелых ядер нуклоны каждого из них вынуждены проходить «сквозь строй» встречных нуклонов. Части из них удается избежать катастрофического разрушения. Остальные (те, которые полностью разрушились) порождают неупорядоченные цветные частицы (кварки и глюоны), которые не могут покинуть ограниченную область пространства без рекомбинации в устойчивые состояния (наблюдаемые адроны). А это требует определенного времени, достаточно длительного по сравнению со временем «прямого» взаимодействия. Поэтому они тормозятся и растрачивают свою энергию на рождение большого количества новых цветных частиц и разогрев (термализацию) всей этой массы. При условии, что превышена критическая плотность энергии (>2 ГэВ/фм^3) или, другими словами, превышена критическая температура (200 МэВ), происходит фазовый переход в кварк-глюонную плазму. Затем образовавшийся сгусток материи (файрбол) начинает расширяться и охлаждаться. При понижении температуры до критической T_c происходит переход из кварк-глюонной плазмы в обычную адронную материю. Дальнейшая эволюция системы заканчивается, когда все взаимодействия прекращаются, характеристики адронов больше не меняются (состояние системы «замораживается»). Начинается разлет адронов, часть из них или продукты их распадов попадают на детекторы. На основе экспериментальных данных физики пытаются восстановить картину процесса.

Экспериментальная база для формирования кварк-глюонной плазмы в земных условиях – это четыре ускорителя в мире. Три уже существуют: ускоритель AGS/BNL (Alternating Gradient Synchrotron/Brookhaven National Laboratory), на котором ядерная программа начала выполняться в 1992 г.; ускоритель SPS/CERN (Super Proton Synchrotron/the European Organization for Nuclear Research), на котором ядерная программа началась с 1994 г.; ускоритель RHIC/BNL (Relativistic Heavy Ion Collider), запущенный в 2003 г. Ускоритель LHC/CERN (Large Hadron Collider) должен быть запущен в 2008 г. В ускорителях AGS и SPS мишень фиксирована, ускорители RHIC и LHC являются коллайдерами. На AGS и SPS энергия столкновения ядер в системе центра масс равна соответственна 5 и 17 ГэВ на нуклонную пару. На коллайдере RHIC энергия пучков достигает 100 ГэВ на нуклон, при столкновении в системе центра масс получается 200 ГэВ на пару нуклонов, в LHC энергия пучков – 2750 ГэВ/нуклон, что соответствует 5500 ГэВ на пару нуклонов в системе центра масс. Разнообразные оценки показывают, что энергии ускорителя SPS, вероятно, уже вполне достаточно для того, чтобы в столкновении была создана кварк-глюонная плазма, и

уж тем более это так при энергиях заработавшего четыре года назад ускорителя RHIC и строящегося ускорителя LHC. Менее ясен ответ на вопрос: что происходит при энергии ускорителя AGS?

Таким образом, есть определенные основания думать, что в соответствующих экспериментах на короткое время удается получить кварк-глюонную плазму, хотя надежных доказательств того, что это реально имеет место, еще нет. Все эти эксперименты очень дорогие, проводятся на уникальных ускорителях только в рамках крупных международных проектов, в которых участвуют российские и белорусские ученые.

Возможность регистрации кварк-глюонной плазмы в столкновении тяжелых ионов предполагает измерение геометрического размера области, в которой материя находится в данной фазе. Размер фазы кварк-глюонной плазмы может значительно влиять на вид распределения вторичных частиц в фазовом пространстве. Цель данной работы заключалась в том, чтобы получить ограничения на возможный размер кварк-глюонной плазмы, следующие из второго начала термодинамики, в современных экспериментах на RHIC и LHC, а также в экспериментах на ускорителях AGS и SPS.

Основная часть. Второе начало термодинамики относится к фундаментальным законам физики макросистем. Данный закон является результатом обобщения очень большого экспериментального материала. Одной из формулировок второго начала термодинамики является принцип возрастания энтропии: энтропия замкнутой макросистемы не уменьшается – она либо возрастает, либо остается постоянной

$$\Delta S \geq 0, \qquad (1)$$

где $\Delta S = S_2 - S_1$ – изменение энтропии системы при ее переходе из одного состояния в другое.

Таким образом, если система находится в каком-либо макросостоянии с данной энтропией S_1, то с подавляющей вероятностью следует ожидать, что она перейдет в состояние с энтропией S_2, где $S_2 \geq S_1$. При фазовом переходе «кварк-глюонная плазма – адроны» начальная энтропия системы равна энтропии образовавшейся в столкновении кварк-глюонной плазмы $S_{1\text{кгп}} = S$; энтропия конечного состояния является энтропией образовавшихся после фазового перехода адронов $S_{2\text{а}} = S$. Тогда из второго начала термодинамики (1) следует, что $S_{\text{кгп}} \leq S_{\text{а}}$. Представляя энтропию системы S через объемную плотность энтропии s: $S = sV$, где V – объем системы, из данного неравенства мы найдем

$$V_{\text{кгп}} \leq \frac{s_{\text{а}}}{s_{\text{кгп}}} V_{\text{а}}, \qquad (2)$$

где $V_{\text{кгп}}$, $V_{\text{а}}$ и $s_{\text{кгп}}$, $s_{\text{а}}$ – соответственно объемы и плотности энтропии кварк-глюонной плазмы и адронов.

Уравнение (2) представляет собой ограничение на объем кварк-глюонной плазмы, который может быть образован в столкновении. Данное ограничение зависит от объема адронной фазы.

Объемная плотность энтропии s системы связана с плотностью потенциала свободной энергии F соотношением

$$s = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V . \qquad (3)$$

Более 90% образовавшихся адронов в столкновении являются π-мезонами. Для газа невзаимодействующих π-мезонов плотность потенциала свободной энергии имеет вид [1]

$$F_\pi = -\frac{\pi^2}{30} T^4, \qquad (4)$$

где T – температура газа адронов. В квантовой хромодинамике – теории, описывающей взаимодействие кварков, потенциал свободной энергии в случае, когда кварки находятся на малом расстоянии друг от друга, имеет вид [2]

$$F_{\text{кхд}} \approx -\frac{8\pi^2}{45} T^4 F_0, \qquad (5)$$

где $F_0 = 1 + 21/32 n_f$, n_f – число ароматов (типов кварков) в кварк-глюонной плазме.

В случае кварк-глюонной плазмы решающую роль играют легкие *u*- и *d*-кварки, которые присутствуют в «обычных» адронах, а также более тяжелый странный *s*-кварк, так как энергии покоя более тяжелых кварков *c*, *b* и *t* намного превышают типичные энергии, характерные для фазового перехода. Поэтому считаем, что кварк-глюонная плазма состоит из *u*- и *d*-кварков, либо *u*-, *d*- и *s*-кварков, так что $n_f = 2$, или $n_f = 3$.

Используя (3)–(5), найдем объемные плотности энтропии для адронной фазы и кварк-глюонной плазмы

$$s_{\text{а}} = \frac{2\pi^2}{15} T^3, \quad s_{\text{кгп}} = \frac{32\pi^2}{45} F_0 T^3. \qquad (6)$$

Подставляя (6) в (2), вычислим

$$V_{\text{кгп}} \leq \frac{3}{16\left(1 + \frac{21}{32} n_f\right)} V_{\text{а}}. \qquad (7)$$

Предполагая, что образовавшиеся объемы кварк-глюонной плазмы и фазы адронов имеют сферическую форму, найдем ограничение на радиус кварк-глюонной плазмы

$$R_{\text{кгп}} \leq \sqrt[3]{\frac{3}{16\left(1 + \frac{21}{32} n_f\right)}} R_{\text{а}}, \qquad (8)$$

где $R_{\text{а}}$ – радиус адронной фазы.

Таблица

Параметры ускорителей и радиусы кварк-глюонной плазмы

Ускоритель	Тип ускорителя	Год запуска	Пучок ядер	$\sqrt{s}$, ГэВ	$R_{\text{кгп}}$, фм
AGS/BNL	Фиксированная мишень	1992	^{197}Au	5	4
SPS/CERN	Фиксированная мишень	1994	^{208}Pb	17,5	6,5
RHIC/BNL	Коллайдер	2003	^{197}Au	200	9
LHC/CERN	Коллайдер	2008	^{208}Pb	5500	12

Полагая в (8) $n_f = 2$, определим

$$R_{\text{кгп}} \le 0,43 R_{\text{а}}. \qquad (9)$$

Радиус адронного источника $R_{\text{а}}$ может быть найден по данным адронной интерферометрии, основанной на изучении двухчастичных корреляций наблюдаемых адронов [3]. Для столкновения ядер

$$R_{\text{а}} = 0,7\left(A\ln\left(\frac{\sqrt{s}}{2m}\right)\right)^{1/2}, \qquad (10)$$

где $R_{\text{а}}$ выражено в ферми (1фм = 10^{-13} см), A – массовое число сталкивающихся ядер; $\sqrt{s}$ – энергия столкновения ядер в системе центра масс сталкивающихся ядер; m – масса протона.

Таким образом, используя формулы (9) и (10), получим

$$R_{\text{кгп}} \le 0,3\left(A\ln\left(\frac{\sqrt{s}}{2m}\right)\right)^{1/2}, \qquad (11)$$

где $R_{\text{кгп}}$ выражено в ферми.

Параметры коллайдеров AGS, SPS, RHIC и LHC, а также результаты вычисления радиуса кварк-глюонной плазмы по формуле (11) приведены в таблице.

Заключение. Мы нашли ограничение на размер кварк-глюонной плазмы, вытекающее из второго начала термодинамики для экспериментов AGS, SPS, RHIC и LHC. Размер кварк-глюонной плазмы зависит от размера адронной фазы, созданной в столкновении ядер при высоких энергиях, и увеличивается с энергией столкновения. В работе [4] было показано, что если размер кварк-глюонной плазмы меньше 6 фм, то требуется учитывать влияние эффектов, связанных с малым размером плазмы на наблюдаемые характеристики частиц, рожденных в столкновении. Например, из-за соотношения неопределенностей Гейзенберга частицы в малом объеме будут иметь более широкое распределение в импульсном пространстве. Оценка размера кварк-глюонной плазмы в этой работе показывает, что в экспериментах на RHIC и LHC этим влиянием можно пренебречь. Если кварк-глюонная плазма была образована на ускорителях AGS и SPS, то требуется рассматривать эффекты, связанные с малым объемом этого состояния.

Литература

1. Letessier, J. QCD equations of state and the QGP liquid model / J. Letessier, J. Rafelski // Phys. Lett. – 1998. – Vol. B168, № 3. – P. 117.

2. Nieto, A. Perturbative QCD at high temperature / A. Nieto // OHSTPY–HEP–T–96–019. – 1996. – P. 25.

3. Wiedemann, U. Hanbury Brown-Twiss interferometry / U. Wiedemann, U. Heinz // Phys. Rep. – 1999. – Vol. 319. – P. 201–206.

4. Finite size effects on pion spectra in relativistic heavy-ion collisions / A. Ayala [et al.] // Phys. Lett. – 2006. – Vol. B346. – P. 6.

УДК 621.373.8

К. И. Рудик, доцент

СВЕТОВОЕ ТУШЕНИЕ СПОНТАННОГО И ВЫНУЖДЕННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ РАСТВОРОВ СЛОЖНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

The radiation quenching efficiency in dye lasers depending on the mutual spectral position on the generation band and the quenching radiation wavelength is ivestigated. The laser radiation polarization degree under the light quenching according to the electrical vector orientation on quenching and exciting light waves is considered the results obtained are indicative of the radiation quenching spatail selectivity in dye lasers of complex compounds.

Введение. Взаимодействие мощного излучения оптических квантовых генераторов (ОКГ) с флуоресцирующими растворами сложных органических соединений приводит к изменению ряда характеристик спонтанного и вынужденного излучения. Наблюдаемое при этом световое тушение обусловлено взаимодействием нерезонансного интенсивного лазерного излучения с молекулами раствора, находящимися в возбужденном состоянии.

Исследование светового тушения весьма актуально для систем, используемых для лазеров на растворах и фототропных затворов. Влияние мощного лазерного излучения, не поглощаемого активным веществом, на люминесцентные характеристики растворов органических соединений исследовано в работах [1, 2], результаты которых дают ценную информацию об оптических свойствах возбужденных молекул, о поведении и устойчивости их в сильных световых полях. Необходимо отметить, что воздействие тушащего излучения на характеристики вынужденного излучения до настоящего времени исследовано недостаточно.

Основная часть. Настоящая работа посвящена комплексному изучению характеристик спонтанного и вынужденного излучения при световом тушении растворов фталимидов. Тушение флуоресценции осуществлялось излучением основной частоты рубинового лазера, а возбуждение проводилось по однофотонному механизму излучением второй гармоники этого лазера, работающего в моноимпульсном режиме с длительностью импульса около 30 нс. Плотность возбуждающего излучения составляла 30 Мвт/см^2, тушащего при фокусировке – 500 Мвт/см^2.

В работе использовался поперечный вариант возбуждения. Принципиальная схема экспериментальной установки приведена на рис. 1.

Излучение рубинового лазера *1* (длиной волны 694 нм) проходило через нелинейный кристалл КДР *2*, в котором порядка 8% генерировалась вторая гармоника с длиной волны 347 нм. Первая призма *3* пространственно разделяла эти лучи, что позволяло изменять их поляризацию и интенсивность излучения в отдельности. Возбуждение вынужденного излучения проводилось также при помощи излучения второй гармоники рубинового лазера, работающего в моноимпульсном режиме с длительностью импульса около 30 нс.

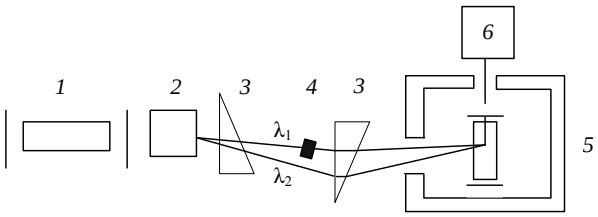


Рис. 1. Принципиальная схема экспериментальной установки

Взаимная ориентация электрического вектора тушащего излучения с длиной волны λ_1 и возбуждающего излучения с длиной волны λ_2 осуществлялась при помощи кварцевой пластинки *4*, установленной на пути тушащей радиации. Вторая призма *3* сводила указанные излучения на объект исследования. Кювета с раствором помещалась в камеру *5*, охлаждаемую до нужной температуры парами жидкого азота.

Контроль и измерение температуры осуществлялись при помощи термопары. При исследовании характеристик спонтанного излучения измерителем *6* служил спектрограф ИСП-51, а при изучении излучения лазеров на красителях – призма Глана и фотоэлектрически е датчики.

В качестве объектов исследования были выбраны 3,6-диаминофталимид (I), 4-аминофталимид (II) и 3-аминофталимид (III) в изопропиловом спирте с максимумами спектров излучения, соответственно равными 540, 515 и 496 нм. Такой выбор объектов исследования обусловлен различным положением спектров флуоресценции, а значит, и спектров лазерного излучения по отношению к тушащему свету.

На рис. 2 приведены результаты эффективности светового тушения спонтанного излучения исследованных соединений в зависимости от температуры растворов. В общем случае эффективность тушения флуоресценции определяется как отношение интенсивности излучения до тушения к интенсивности флуоресцен-

ции при тушении ($K = I_0 / I_т$). Как видно из приведенных данных, максимальная эффективность тушения имеет место для соединения I, а минимальная − для соединения III, что обусловлено различным положением спектров флуоресценции этих соединений относительно тушащего излучения и находит полное соответствие с теоретическими выводами работы [3]. Некоторое уменьшение эффективности тушения соединений II и III с понижением температуры растворов связано с коротковолновым смещением спектров флуоресценции в этом случае при охлаждении раствора.

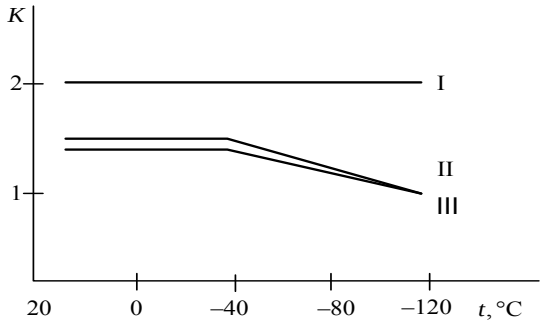


Рис. 2. Температурная зависимость эффективности тушения исследуемых соединений

При возбуждении люминесценции или генерации растворов линейно поляризованным светом распределение ориентаций осцилляторов возбужденных молекул является анизотропным. Если тушение в такой системе осуществляется также поляризованным излучением, то испытывать дезактивацию возбужденных уровней будут преимущественно те молекулы, у которых дипольный момент перехода, ответственного за тушение, составляет небольшой угол с электрическим вектором тушащего света.

Проведенный эксперимент показал, что эффективность тушения K зависит от взаимной ориентации электрического вектора возбуждающего и тушащего излучения. С другой стороны, селективность тушения, которая зависит от взаимной ориентации осцилляторов возбужденных молекул и электрического вектора тушащей световой волны, приводила к изменению степени поляризации флуоресценции при световом тушении. Выполненные измерения степени поляризации в этом случае полностью согласуются с результатами работы [4].

Во второй части работы проведены исследования энергетических и поляризационных характеристик излучения лазеров указанных растворов при световом тушении. Эффективность светового тушения в этом случае определялась как отношение пороговой плотности энергии накачки при световом тушении к пороговой плотности накачки в отсутствии тушащего излучения ($g = U_т / U_0$). Пороговое значение плотности энергии накачки достигалось ослаблением излучения нейтральными светофильтрами.

На рис. 3 представлена указанная зависимость при параллельной ориентации электрического вектора возбуждающего и ту-шащего излучения. Кроме того, для соединения I имеет место срыв генерации при плотности энергии тушащего излучения, равной 10^4 эрг · см$^{-3}$.

Анализ полученных результатов показывает, что по мере приближения частоты тушащего излучения к спектру излучения ОКГ на растворах красителей эффективность тушения возрастает. Различное значение эффективности тушения обусловлено различным значением коэффициента Эйнштейна $B_{21}(\nu_g)$ для исследованных соединений на частоте рубинового лазера.

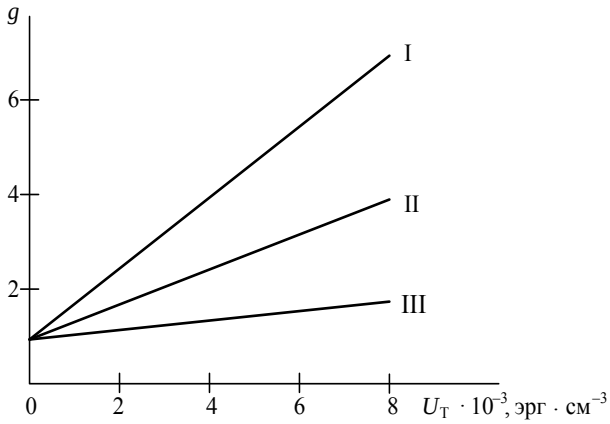


Рис. 3. Зависимость эффективности тушения вынужденного излучения от плотности энергии тушащего излучения

Поскольку спектры флуоресценции исследуемых в работе соединений лежат далеко от основной частоты излучения рубинового лазера, то непосредственное измерение на этой частоте интенсивности флуоресценции и определение коэффициента Эйнштейна B_{21} затруднены. Полученный экспериментальный материал позволяет рассчитать этот параметр исследуемых систем. На основании уравнений баланса частиц для пороговой плотности накачки без дополнительного облучения и при световом тушении можно получить следующее выражение:

$$g = 1 + \tau B_{12}(\nu_g) U_T,$$

τ – время возбужденного состояния активных молекул; U_T – плотность энергии тушащего излучения.

Приведенное соотношение можно использовать для различных соединений при определении коэффициента B_{21} генерирующей системы на частоте тушащего излучения. Расширить пределы применения приведенного соотношения можно, используя различные частоты тушащего излучения.

Селективность светового тушения влияет на степень поляризации генерируемого излучения. На рис. 4 приведена зависимость этой величины от плотности энергии тушащего излучения при различных ориентациях электрического вектора возбуждающего и тушащего излучения. Отметим, что для этих соединений при отсутствии дополнительного облучения уже имеется частичная поляризация излучения генерации.

Из приведенных результатов видно, что для исследованных соединений при взаимно перпендикулярной ориентации электрических векторов возбуждающего и тушащего излучения (кривые *1* и *2*) степень поляризации генерируемого излучения возрастает с увеличением плотности энергии тушащей радиации. Наблюдаемое явление объясняется изменением анизотропии распределения возбужденных молекул, которое проявляется в том, что при данных условиях эксперимента происходит обеднение тех центров, которые ответственны за горизонтальную компоненту излучения. В результате этого относительная доля центров, ответственных за вертикальную составляющую генерируемого излучения, возрастает, что в итоге приводит к увеличению степени поляризации излучения.

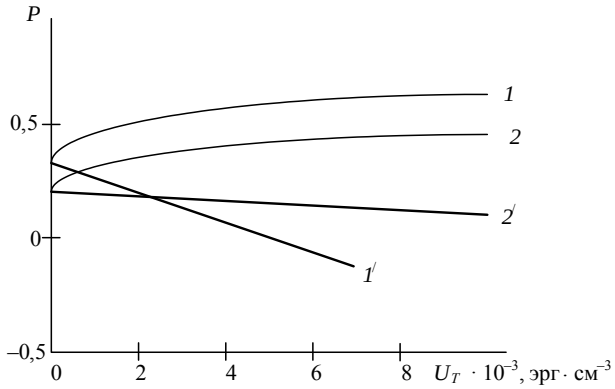


Рис. 4. Зависимость степени поляризации вынужденного излучения от плотности энергии тушащей радиации для соединений I (*1*, *1′*) и III (*2*, *2′*). Электрические векторы возбуждающего и тушащего излучения: *1*, *2* – взаимно перпендикулярные; *1′*, *2′* – параллельные

При параллельной ориентации электрических векторов тушащего и возбуждающего излучения степень поляризации с увеличением плотности энергии тушащей радиации практически остается постоянной для системы III и значительно уменьшается для системы I. Объяснение полученных результатов сводится к следующему. Для соединения III длина волны возбуждения попадает в длинноволновую полосу поглощения и при накачке излучением, линейно поляризованным по вертикальной оси, молекулы в возбужденном состоянии имеют анизотропное распределение по ориентациям осцилляторов испускания. В этом случае тушение линейно поляризованным излучением с той же ориентацией поляризации не приводит к изменению анизотропии распределения возбужденных молекул.

Иные зависимости наблюдаются для системы I. Для этого соединения длина волны возбуждения попадает в область перекрытия двух электронных полос поглощения. В этом случае осуществляется возбуждение двух электронных состояний с взаимно перпендикулярными осцилляторами. При параллельной ориентации электрических векторов возбуждающего и тушащего излучения будет происходить преимущественное обеднение возбужденных центров, ответственных за вертикальную составляющую излучения генерации, при неизменности компоненты горизонтальной составляющей. В результате этого может реализоваться случай, когда при определенных уровнях плотности энергии тушащей радиации степень поляризации генерируемого излучения принимает отрицательное значение.

Заключение. Таким образом, световое тушение обусловлено вынужденными переходами с возбужденных уровней S^* на высокие колебательные уровни S^0 основного состояния, а степень поляризации лазерного излучения определяется анизотропным распределением возбужденных молекул, вызванным поляризацией возбуждающего и тушащего излучения.

Литература

1. Wieder, I. Quenching of laser dye fluorescence by absorption from an Exited singlet state / I. Wieder // Appl. Phys. Let. – 1972. – Vol. 21, № 7. – P. 318–320.

2. Буров, Л. И. Поляризация флуоресценции при различных мощностях возбуждения с учетом светового тушения / Л. И. Буров, А. М. Саржевский, А. Н. Севченко // ЖПС. – 1975. – Т. 23. – Вып. 1. – С. 64 – 71.

3. Степанов, Б. И. Введение в теорию люминесценции / Б. И. Степанов, В. П. Грибковский. – Минск: Изд-во АН БССР, 1963. – 384 с.

4. Воропай, Е. С. Поляризация нелинейной люминесценции / Е. С. Воропай, В. А. Гайсенок, И. И. Жолнеревич // Спектроскопия и люминесценция молекулярных систем. – Минск: БГУ, 2002. – 399 с.

УДК 531.19; 539.382

А. В. Жаркевич, ст. преподаватель; И. И. Наркевич, профессор;
Е. В. Фарафонтова, мл. науч. сотрудник

СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЛОСКОНАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ ТОНКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПЛЕНОК

Early the two level statistical model of the deformed crystalline film with point defects of vacancies type was proposed. The system of two integral equations for potentials of average forces was made for a homogeneous strain state of a lattice. It was decided in a Gauss approximation. In result, the system of nonlinear algebraically an equation for transformation coefficients of potentials of average forces was obtained. Potentials of average forces determine correlative functions of particle distribution near of knots of a deformed two dimension lattice. It is necessary for a statistical calculation of thermodynamics potentials of a molecular system. The expression for a free energy of the deformed crystalline molecular film with point defects of vacancies type is obtained in this article. The general functional statistical expression for a free energy of a inhomogeneous multycomponent system of molecules was used. Potentials of average forces, which get into this expression was transformed into series for this.

Введение. Применение двухуровневого молекулярно-статистического описания свойств неоднородных конденсированных сред [1, 2] позволило разработать одномерную статистическую модель молекулярного кристалла [3–8]. В связи с этим появилась возможность приступить к разработке двумерной статистической модели деформированного кристалла с точечными дефектами типа вакансий. Предложенная статистическая модель деформирования тонких молекулярных пленок [9] позволила на основе двухуровневого молекулярно-статистического описания конденсированных систем получить систему нелинейных уравнений для коэффициентов разложения потенциалов средних сил. Эта система уравнений необходима для статистического расчета свободной энергии и других термодинамических потенциалов.

Основная часть. Для определения свободной энергии деформированной тонкой молекулярной пленки воспользуемся общим функциональным статистическим выражением для свободной энергии [1, 7] неоднородной двухкомпонентной системы, состоящей из частиц сорта *а* (молекул) и квазичастиц сорта *в* (вакансий кристалла):

$$F\left(\left\{n_p^a\right\},\left\{\lambda_p^{ij}\right\}\right)=\theta\sum_{l=1}^{M}\left[\sum_{\mu=a,в} n_l^{\mu}\ln n_l^{\mu}+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2}\sum_{\nu=a,в}\sum_{m\neq l}^{M} n_{lm}^{\mu\nu}\ln\left(\frac{n_{lm}^{\mu\nu}}{n_l^{\mu}n_m^{\nu}}\right)\right]-$$

$$-\theta\sum_{l=1}^{M}\left[n_l^a\ln Q_l-\frac{1}{2}\sum_{m\neq l}^{M}\left(n_l^a+n_m^a-n_{lm}^{aa}\right)\times\right.$$

$$\left.\times\ln\left\langle f_{lm}\right\rangle_l'\right];\quad \mu,\nu=a,в;\quad i,j=1,2,3;$$

$$M=N_a+N_b;\quad p,l,m=1,2,\ldots,M, \qquad (1)$$

$$Q_l=\int_{\omega_l}\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\sum_{k\neq l}^{M}\varphi_{lk}\left(q_l\right)\right\}dq_l, \qquad (2)$$

$$\left\langle f_{lm}\right\rangle_l'=\int_{\omega_l}\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\varphi_{lm}\left(q_l\right)\right\}\widehat{F}_{11}^{*}\left(q_l\right)dq_l, \qquad (3)$$

$$n_{lm}^{aв}=\frac{1}{2z_{lm}}\left[-1+\sqrt{1+4n_l^a n_m^в z_{lm}}\right], \qquad (4)$$

$$n_l^{aв}+n_l=1,\quad n_l^a=n_{lm}^{aa}+n_{lm}^a,\quad n_l^в=n_{lm}^{вa}+n_{lm}^{вв}. \qquad (5)$$

Здесь $\varphi_{lm}\left(q_l\right)$ и $\varphi_{lk}\left(q_l\right)$ – потенциалы средних сил взаимодействия молекул, которые зависят от поля компонент λ_p^{ij} тензора микродеформации $\widehat{\lambda}_p$ и поля концентраций n_p^a частиц в ячейках объемом ω_p.

Функционал Q_l является нормировкой одночастичной функции распределения частиц:

$$\widehat{F}_{11}\left(q_l\right)=\frac{1}{Q_l}\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\sum_{k\neq l}^{M}\varphi_{lk}\left(q_l\right)\right\}.$$

Выражение (1) содержит две суммы по индексу $l=1, 2, ..., M$. Поскольку $F=U-\theta S$, то первое слагаемое первой суммы представляет собой известное выражение для комбинаторной части энтропии, связанной с одноячеечными числами заполнения n_l^{μ} ячеек. Второе слагаемое имеет ту же структуру, что и первое, однако содержит уже двухячеечные числа заполнения $n_{lm}^{\mu\nu}$ и поэтому является дополнительным, т. е. корреляционным вкладом в комбинаторную часть энтропии молекулярной системы, косвенно связанным с взаимодействием ее частиц.

Вторая сумма содержит функционалы Q_l и $\left\langle f_{lm}\right\rangle_l'$, которые выражаются через потенциалы средних сил, непосредственно связанные с двухчастичной коррелятивной функцией. Поэтому она представляет собой вклад в свободную энергию от парного взаимодействия молекул системы с учетом их корреляции как внутри ячеек, так и при их распределении по всевозможным комбинациям пар ячеек.

Взаимодействие молекул исследуемой системы описывается с помощью парного межмолекулярного потенциала Леннард-Джонса.

Применим выражение (1) к разрабатываемой двумерной статистической модели однородно деформированной пленки с точечными дефектами типа вакансий. Ячейки плоской квадратной решетки, состоящей из M одинаковых ячеек, с вероятностью $n^a = N_a / M$ заняты молекулами (частицами сорта a). Вакантные ячейки рассматриваются как ячейки, занятые с вероятностью $n^в = 1 - n^a$ невзаимодействующими квазичастицами сорта $\mu = в$.

В однородном плосконапряженном состоянии относительные деформации λ_1 и λ_2 ячеек в направлении осей OX и OY различны, но постоянны ($\lambda_l = \lambda = \text{const}$). Поэтому функционал свободной энергии превращается в функцию трех внутренних параметров статистической модели (концентрации $n = n^a$ и деформаций λ_1 и λ_2), подлежащих определению путем варьирования свободной энергии при фиксированном значении общего числа молекул.

Для однородно деформированной пленки первое слагаемое комбинаторной части энтропии преобразуем к следующему виду:

$$S_1 = -\sum_{l=1}^{M} \sum_{\mu=a,в} n_l^\mu \ln n_l^\mu =$$

$$= -M\left(n_l^a \ln n_l^a + n_l^в \ln n_l^в\right) =$$

$$= -M\left[n \ln n + (1-n)\ln(1-n)\right]. \qquad (6)$$

Корреляционный вклад S_2 в комбинаторную часть энтропии запишем следующим образом:

$$S_2 = -\frac{1}{2}\sum_{l=1}^{M} \sum_{\mu,\nu=a,в} \sum_{m\neq l}^{M} n_{lm}^{\mu\nu} \ln\left(\frac{n_{lm}^{\mu\nu}}{n_l^\mu n_m^\nu}\right) =$$

$$= -\frac{M}{2}\sum_{m\neq l}^{M}\left[n_{lm}^{aa} \ln\left(\frac{n_{lm}^{aa}}{n_l^a n_m^a}\right) + \right.$$

$$\left. + 2n_{lm}^{aв} \ln\left(\frac{n_{lm}^{aв}}{n_l^a n_m^в}\right) + n_{lm}^{вв} \ln\left(\frac{n_{lm}^{вв}}{n_l^в n_m^в}\right)\right]. \qquad (7)$$

Учитывая то, что концентрация вакансий $c = (1-n)$ в кристаллической пленке мала, разложим выражение для двухячеечных чисел заполнения (4) в ряд по малому параметру $x = 4n(1-n)z_{lm}$:

$$n_{lm}^{aв} = n_{lm}^{вa} \approx n(1-n)\left[1 - n(1-n)z_{lm}\right]. \qquad (8)$$

Тогда с учетом условия нормировки (5)

$$n_{lm}^{aa} \approx n^2\left[1 + (1-n)^2 z_{lm}\right],$$
$$n_{lm}^{вв} \approx (1-n)^2\left(1 + n^2 z_{lm}\right). \qquad (9)$$

После подстановки выражений (8) и (9) в формулу (7) получим

$$S_2;\ -\frac{M}{2}\sum_{m\neq l}^{M}\left[n^2\left(1 + (1-n)^2 z_{lm}\right)\times\right.$$

$$\times\ln\left(1 + (1-n)^2 z_{lm}\right) + (1-n)^2\left(1 + n^2 z_{lm}\right)\times$$

$$\times\ln\left(1 + n^2 z_{lm}\right) + 2n(1-n)\times$$

$$\left.\times\left(1 - n(1-n)z_{lm}\right)\ln\left(1 - n(1-n)z_{lm}\right)\right] \qquad (10)$$

Разложим логарифмы в (10) по малому параметру в ряд $\left(\ln(1 \pm x) \approx \pm x\right)$ и после соответствующих преобразований запишем окончательное выражение для корреляционного вклада в энтропию

$$S_2 \cong -\frac{M}{2}\sum_{m\neq l}^{M}\left[n^2(1-n)^2 z_{lm}^2\right].$$

Тогда комбинаторную часть энтропии двумерной молекулярной модели запишем в виде

$$S = S_1 + S_2 \cong -M\left[n \ln n + \right.$$

$$\left. + (1-n)\ln(1-n) + \frac{1}{2}n^2(1-n)^2\sum_{m\neq l}^{M} z_{lm}^2\right]. \qquad (11)$$

В состоянии однородного продольного и поперечного деформирования с относительными деформациями λ_1 и λ_2 ячеек соответственно и свойств симметрии [9] система интегральных выражений для функционала $\langle f_{lm}\rangle'_l$ (3) состоит из двух выражений, если ограничиться приближением взаимодействия ближайших соседей $\left(\langle f_{lm}\rangle'_l \Rightarrow \{f_{xx}, f_{yy}\}\right)$. Выражения f_{xx} и f_{yy} относятся к парам соседних ячеек ω_l и ω_m, центры которых лежат на линиях, параллельных оси OX или OY соответственно. В свою очередь эти функционалы и функционал Q_l содержат потенциалы средних сил двух типов (φ_1 и φ_2). Потенциалы φ_1 и φ_2 описывают взаимодействие молекул в двух ячейках, центры которых расположены на линиях, параллельных оси OX или OY соответственно.

Для расчета функционалов (2) и (3) потенциалы средних сил обоих типов разложим в ряд по отклонениям молекул от центров своих ячеек. Парный межмолекулярный потенциал Леннард-Джонса разложим в ряд по взаимных отклонениям молекул, находящихся в соседних ячейках. Ограничившись первыми членами разложений, решим задачу в приближении Гаусса. После соответствующих преобразований с учетом табличного интеграла вида [10]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\left(qt + pt^2\right)\right\} dt = \sqrt{\frac{\pi}{p}}\exp\left\{\frac{q^2}{4p}\right\},\ p > 0 \qquad (12)$$

для функционалов (2) и (3) получены следующие

выражения:

$$Q_l = \exp\left[-2\left(\varphi_{01}+\varphi_{02}\right)\right]\times$$
$$\times\frac{\pi}{2\sqrt{\left(\beta_{11}+\beta_{21}\right)\left(\beta_{12}+\beta_{22}\right)}}, \qquad (13)$$

$$\left\langle f_{xx}\right\rangle'_l = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\left(\beta_{11}+2\beta_{21}\right)\left(\beta_{12}+2\beta_{22}\right)}{\left(\beta_{11}+\beta_{21}\right)\left(\beta_{12}+\beta_{22}\right)}}\times$$
$$\times\exp\left\{-\left[\varphi_{01}+\frac{\alpha_1^2}{4\left(\beta_{11}+2\beta_{21}\right)}\right]\right\}, \qquad (14)$$

$$\left\langle f_{yy}\right\rangle'_l = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\left(2\beta_{11}+\beta_{21}\right)\left(2\beta_{12}+\beta_{22}\right)}{\left(\beta_{11}+\beta_{21}\right)\left(\beta_{12}+\beta_{22}\right)}}\times$$
$$\times\exp\left\{-\left[\varphi_{02}+\frac{\alpha_2^2}{4\left(\beta_{22}+2\beta_{12}\right)}\right]\right\}. \qquad (15)$$

Здесь φ_{0i}, β_{ij} – коэффициенты разложения потенциалов средних сил φ_i, которые зависят от коэффициентов разложения парного межмолекулярного потенциала Леннард-Джонса ($i, j = 1, 2$).

Заключение. С помощью общего статистического уравнения для функционала свободной энергии неоднородной деформированной молекулярной среды получено приближенное аналитическое выражение для свободной энергии статистической модели тонкой пленки. Для этого использовалась ранее полученная система нелинейных уравнений для коэффициентов разложения потенциалов средних сил, определяющих младшие коррелятивные функции распределения частиц (молекул) в конденсированной среде.

Литература

1. Наркевич, И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. … д-ра физ.-мат. наук / И. И. Наркевич. − СПб., 1993. − 242 л.
2. Ротт, Л. А. Статистическая теория молекулярных систем / Л. А. Ротт. − М.: Наука, 1979. − 280 с.
3. Наркевич, И. И. Исследование структуры одномерной статистической модели одноосного деформирования молекулярного кристалла / И. И. Наркевич, А. В. Жаркевич, П. П. Казаков // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. − 2000. − Вып. IX. − С. 65−71.
4. Наркевич, И. И. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 1. Постановка задачи и метод ее решения / И. И. Наркевич, А. В. Жаркевич // Инженерно-физический журнал. − 2000. − Т. 73, № 6. − С. 1313−1319.
5. Исследование свойств равновесных и неравновесных конденсированных систем: отчет о НИР (промежуточ.) / Бел. гос. технол. ун-т (БГТУ); рук. темы И. И. Наркевич. − Минск, 2001. − 48 с. − № ГР 20011612.
6. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 2. Расчет функций распределения молекул и вакансий в одномерной однородно деформированной статистической модели растяжения − сжатия / И. И. Наркевич [и др.] // Инженерно-физический журнал. − 2002. − Т. 75, № 4. − С. 170−176.
7. Жаркевич, А. В. Термодинамические и структурные характеристики конденсированных систем на основе взаимосвязного микро- и макроскопического представления: дис. … канд. физ.-мат. наук / А. В. Жаркевич. – Минск, 2005. – 131 с.
8. Жаркевич, А. В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 3. Расчет диаграммы растяжения – сжатия одномерной статистической модели деформирования молекулярного кристалла / А. В. Жаркевич // Инженерно-физический журнал. – 2004. – Т. 77, № 4. – С. 144–149.
9. Жаркевич, А. В. Статистическая модель плосконапряженного состояния тонких молекулярных пленок / А. В. Жаркевич, И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтова // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. − 2007. − Вып. XV. − С. 66−70.
10. Градштейн, И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. − М.: Наука, 1971. − 1108 с.

УДК 537.633.2

В. Р. Мадьяров, ст. преподаватель

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ НА ХОЛЛОВСКОЕ ПОЛЕ В СОБСТВЕННОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Net carrier charge density and electrical field strength distributions were calculated for Hall infinite semiconductor sample taking into account surface recombination. The surface charge was shown to decrease as surface recombination rate is increased. Transverse electrical field strength is changed in the near-surface region that has thickness comparable to a value determined by Debye length and ambipolar diffusion length, with the field strength tends to the strength defined by known formula as surface recombination rate is increased.

Введение. Повышение чувствительности магнитоуправляемых полупроводниковых приборов на основе датчиков Холла связано с уменьшением их размеров. Традиционным способом увеличения чувствительности датчиков Холла является снижение их толщины. Наряду с этим, образцы для холловских измерений различных полупроводниковых соединений обычно целесообразно приготавливать в виде тонких слоев, осаждаемых на подложках [1, 2]. С уменьшением размеров в полупроводниках с биполярной проводимостью существенную роль приобретают рекомбинационные процессы, происходящие на поверхности.

Поскольку на поверхности образца существует рекомбинация, то концентрация избыточного заряда вблизи поверхности уменьшается по сравнению с концентрацией в объеме полупроводника. Под действием магнитного поля возникает область накопления нескомпенсированного заряда вблизи боковой грани образца, вследствие чего электрическое поле становится неоднородным, а холловская разность потенциалов будет заметно отличаться от вычисляемой по традиционной формуле $U = ARIB / d$.

В данной работе предлагается модель, на основании которой оценивается поперечное распределение нескомпенсированного заряда электронов и дырок в полупроводниковом образце с проводимостью, близкой к собственной, определяется характерный размер приповерхностных областей накопления заряда и неоднородности холловского поля.

Основная часть. В основу модели положены кинетические выражения для плотности тока электронов и дырок в постоянном магнитном поле с учетом диффузионной составляющей, обусловленной приповерхностным градиентом концентрации. Расчеты выполнялись для длинного ($a >> b$, d) изотропного полупроводникового образца, ограниченного по осям y ($0 < y < 2b$) и z ($0 < z < 2d$), электрический ток в котором течет вдоль оси x, внешнее магнитное поле с индукцией B совпадает с осью z, а холловское поле направлено вдоль оси y (рис. 1). Для указанного образца можно пренебречь влиянием токовых контактов и считать концентрацию носителей заряда и напряженность электрического поля E_0 постоянными вдоль оси x.

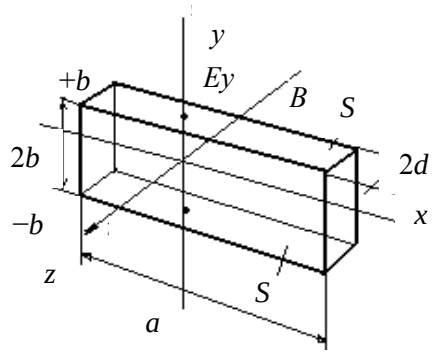


Рис. 1. Анализируемый образец. На верхней и нижней гранях происходит рекомбинация со скоростью S

Неравновесные носители создаются равномерно по объему под действием внешнего источника. В приближении слабых полей $\mu_{n,p}B << 1$ избыточная концентрация мала по сравнению с равновесной. Для протяженного по оси x образца можно пренебречь градиентом концентрации вдоль этой оси. Будем полагать, что рекомбинация происходит только на поверхностях $y = \pm b$. Тогда кинетические выражения для плотности электронного (j_p) и дырочного (j_p) токов вдоль осей x и y можно представить в виде

(1)

$$\begin{cases} j_{xp} = k_{11p}E_x - k_{12p}E_yB - eD_p\theta\ \dfrac{dp}{dy}, \\ j_{yp} = k_{11p}E_y + k_{12p}E_xB, \\ k_{11p} = e\mu_p p_0,\ \ k_{12p} = e\mu_p{}^2 p_0,\ \ \theta_p = \mu_p B. \end{cases} \quad (2)$$

В уравнениях (1) и (2) $\mu_{n,p}$ и $D_{n,p}$ – коэффициенты подвижности и диффузии электронов и дырок соответственно; $n = n_1 - n_0$ и $p = p_1 - p_0$ – приращения неравновесных концентраций электронов и дырок соответственно, время рекомбинации которых составляют τ_n и τ_p; n_0 и p_0 – равновесные концентрации электронов и дырок ($n_0 = p_0 = n_i$).

Уравнения непрерывности для приращений n и p имеют вид

$$\frac{1}{e} div\vec{j}_n = \frac{n}{\tau_n} + G,$$
$$\frac{1}{e} div\vec{j}_p = -\frac{p}{\tau_p} + G, \qquad (3)$$

где G – коэффициент рекомбинации в объеме образца. Уравнения (1) и (2) дополняются уравнением для напряженности электрического поля внутри образца:

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} = \frac{p-n}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad E_x = E_0, \quad E_y(\pm b) = 0. \qquad (4)$$

Граничные условия в (4) определяются равенством нулю напряженности E_y на боковых гранях. Подстановка соотношений (1) и (2) в уравнения (3) приводит к системе дифференциальных уравнений

(5)

где $l_D = (\varphi_T \varepsilon\varepsilon_0 / en_i)^{1/2}$ – дебаевская длина экранирования; $l_2^{-2} = L_p^{-2} - l_D^{-2}$, $L_{n,p} = \left(\tau_{n,p} D_{n,p}\right)^{1/2}$ – диффузионная длина для электронов и дырок соответственно; $\varphi_T = kT / e$ – коэффициент, определяемый соотношением Эйнштейна $D = \mu\varphi_T$.

Граничные условия задаются приравниванием нормальных к поверхности образца составляющих плотности токов электронов и дырок к скорости поверхностной рекомбинации. Суммарная плотность тока в направлении y равна нулю. Граничные условия для плотности токов на поверхности образца определяются диффузионным током:

$$eD_n \left.\frac{dn}{dy}\right|_{y=b} = -en(b)S,$$
$$eD_p \left.\frac{dp}{dy}\right|_{y=b} = ep(b)S, \qquad (6)$$
$$eD_n \left.\frac{dn}{dy}\right|_{y=-b} = -en(-b)S,$$
$$eD_p \left.\frac{dp}{dy}\right|_{y=-b} = ep(-b)S,$$

где S – скорость поверхностной рекомбинации, м/с.

На рис. 2 представлены распределения приращения концентраций нескомпенсированного заряда неравновесных электронов и дырок, полученные путем решения уравнений (5) с граничными условиями (6) для кремниевого образца собственной проводимости при T = 300 К, B = 0,2 Тл, $2d$ = 0,1 мм, $2b$ = 1 мм. Этой температуре соответствует равновесная концентрация собственных носителей $n_i = 10^{16}$ м$^{-3}$. Разность приращений концентраций отнесена к равновесной концентрации собственных носителей. Параметром для этих кривых является скорость поверхностной рекомбинации S. Для расчетов использовались значения S, D, τ_n и τ_p, полученные для кремния в [3–5].

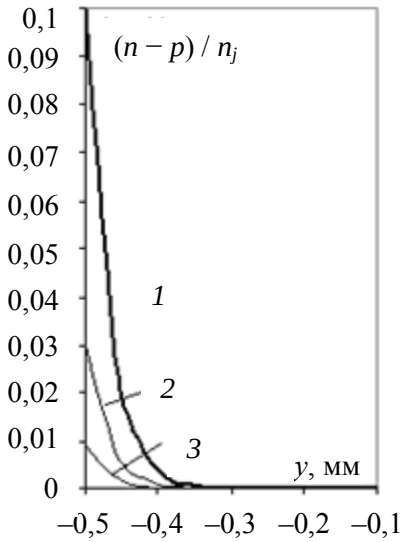


Рис. 2. Распределение концентрации нескомпенсированного заряда неравновесных электронов и дырок в направлении y, в плоскости x = 0: *1* – S = 1 м/с; *2* – S = 10 м/с; *3* – $S = 10^2$ м/с

Скорость уменьшения концентрации неравновесных носителей в области накопления заметно снижается с ростом S. Ширина области накопления сравнима с длиной l_1, которая определяется как диффузионной длиной, так и дебаевской длиной экранирования (значения l_D, L_n и L_p согласно оценкам, проведенным для рассматриваемых условий, составляют соответственно $l_D \sim 3 \cdot 10^{-5}$ м, $L_{n,p} \sim 10^{-4}$ м). С увеличением скорости рекомбинации концентрация носителей нескомпенсированного заряда на поверхности образца уменьшается и стремится к нулю с ростом S.

На рис. 3 представлены распределения напряженности поперечного электрического поля E_y, приведенного к холловской напряженности $\theta_{n,p}E_0 = (\mu_n - \mu_p)BE_0$ при различных значениях S. Значение $\theta_{n,p}E_0$ соответствует напряженности холловского поля при бесконечно высокой скорости рекомбинации. Ширина области изменения E_y вблизи граней образца не зависит от S

при фиксированных значениях l_D и $L_{n,p}$.

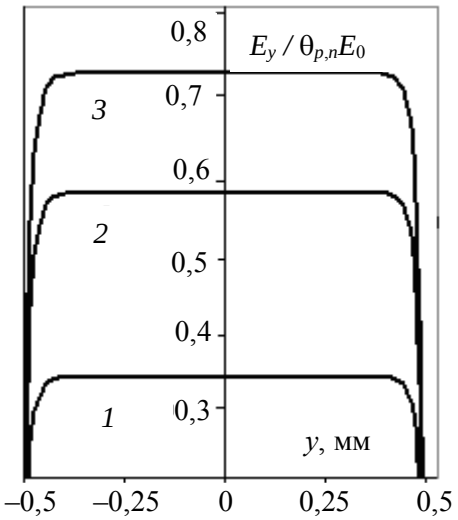


Рис. 3. Распределение приведенной напряженности электрического поля в направлении y в сечении образца $x = 0$: *1* – $S = 1$ м/с; *2* – $S = 10$ м/с; *3* – $S = 10^2$ м/с

На рис. 4 сопоставляются зависимости напряженности поперечного электрического поля от скорости поверхностной рекомбинации при различных отношениях b / l_1. С ростом S напряженность поля в объеме образца увеличивается и приближается к значению, соответствующему бесконечной скорости рекомбинации.

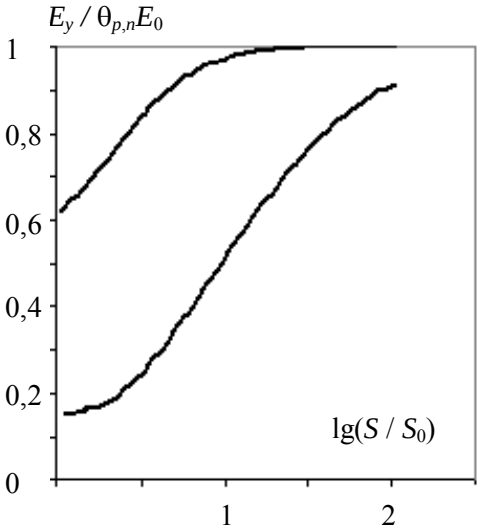


Рис. 4. Зависимость поперечного поля в образце от скорости рекомбинации при $x = 0$, $S_0 = 1$ м/с (верхняя кривая соответствует отношению $2b / l_1 = 1{,}5$, нижняя – $2b / l_1 = 0{,}3$)

Наблюдаемые зависимости обусловлены тем, что неравновесный заряд накапливается вблизи боковых граней на расстоянии, которое сравнимо с диффузионной длиной. С уменьшением ширины образца $2b$ до размеров, которые сравнимы с протяженностью областей накопления, заряды противоположных граней, имеющие разный знак, начинают частично компенсировать друг друга, в результате напряженность поперечного поля E_y снижается.

Заключение. Расчеты, выполненные для бесконечного полупроводникового образца с собственной проводимостью, показывают, что напряженность холловского поля снижается с уменьшением скорости поверхностной рекомбинации S. С ростом S ширина областей накопления неравновесного заряда сокращается и увеличивается напряженность холловского поля в образцах, геометрические размеры которых сравнимы с диффузионной длиной. В образцах, поперечные размеры которых составляют ~0,1 мм и менее, поверхностная рекомбинация может заметно снизить напряженность холловского поля. Полученные результаты следует учитывать при проектировании тонких высокочувствительных датчиков магнитного поля, в которых сравнимы концентрации электронов и дырок.

Литература

1. Residual donors and compensation in metalorganic c hemical vapor de position a s-grown n-GaN / Xu Xiaoliang [et a l.] // J. Appl. P hys. – 2001. – Vol. 90, № 12. – P. 6130–6134.

2. Pophristic, M. High-conductivity n -AlGaN with high Al mole fraction grown by metalorganic vapor ph ase de position / M. Pophristic, S. P. Guo, B. Peres // Appl. Phys. Lett. – 2003. – Vol. 82, № 24. – P. 4289–4291.

3. Non-radiative r ecombination a t reconstructed Si surfaces / T. Dittrich [et a l.] // S olid-State E lectron. – 2002. – Vol. 46, № 11. – P. 1863–1872.

4. P alais, O. C ontactless measurement of bu lk lifetime and surface recombination velocity in silicon wafers / O. Palais, A. Arcari // J. Appl. Phys. – 2003. – Vol. 93, № 8. – P. 4686–4690.

5. Исследования СВЧ-метода измерения времени жизни неравновесных носителей заряда в слитках слаболегированного кремния / П. А. Бородовский [и др.] // Микроэлектроника. – 2005. – Т. 34, № 5. – С. 375–384.

УДК 674.055:621.934(043.3)

А. А. Гришкевич, доцент; В. В. Чаевский, ассистент; В. В. Углов, профессор (БГУ);
А. К. Кулешов, ст. науч. сотрудник (БГУ)

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ TiN-, ZrN-, Ti – Zr – N- И Ti-ПОКРЫТИЙ НА ТВЕРДОСПЛАВНЫХ РЕЗЦАХ ПРИ ОБРАБОТКЕ ЛАМИНИРОВАННЫХ ДРЕВЕСНО-СТРУЖЕЧНЫХ ПЛИТ КОНЦЕВЫМИ ФРЕЗАМИ

The TiN, ZrN, Ti – Zr – N and Ti coatings were formed by the method of condensation from a plasma phase in a vacuum with ion bombardment of surfaces tools. The element and phase composition coatings and tools, the surface morphology of cutting tools were studied by X – ray microanalysis, X – ray diffraction and transmission electron microscopy. The conducted investigations of hard-alloy inserts with the TiN coatings for milling special woods growth of wear resistance 1,8–2,0 times in comparison with non-coating inserts. It is obtained the different mechanism of wear coatings and cutting inserts.

Введение. Твердосплавные концевые фрезы позволяют эффективно осуществлять высококачественную обработку различных материалов, в том числе и древесных композиционных материалов. Демонстрируемая износостойкость твердосплавных фрез не является достаточной для более широкого применения данного инструмента, так как в определенные периоды эксплуатации наблюдается хрупкое разрушение рабочих поверхностей [1]. Повышение износостойкости резцов путем улучшения их геометрических параметров уже не приносит значительных результатов, поэтому поиск, исследование и внедрение новых технологий, направленных на повышение надежности режущего инструмента является актуальной и важной задачей. Решение указанной проблемы достигается путем нанесения различных износостойких покрытий. Для твердосплавного инструмента наибольшее распространение получил метод конденсации вещества из плазменной фазы в вакууме с ионной бомбардировкой поверхности инструмента (КИБ) [1, 2].

Целью данной работы было исследование износостойкости ионно-плазменных TiN-, ZrN-, Ti – Zr – N- и Ti-покрытий с учетом их фазового и элементного состава на твердосплавных резцах концевых фрез.

Экспериментальная часть. Покрытия TiN, ZrN, Ti – Zr – N и Ti осаждались на неперетачиваемые твердосплавные пластины (производство – Германия) методом конденсации с ионной бомбардировкой на установке типа «Булат».

Проводилась предварительная обработка ионами титана или хрома в вакууме 10^{-3} Па при отрицательном потенциале подложки –1 кВ. Покрытия наносились при опорном напряжении $U_{оп}$ = 120 В в атмосфере азота при давлении 10^{-1} Па. Температура при осаждении соответствовала 400–450°С. Толщина покрытий составляла 2–3 мкм.

Морфология сформированных покрытий и элементный состав покрытий и резцов определялся методами рентгеноспектрального микроанализа (РСМА) и растровой электронной микроскопии (РЭМ) с помощью сканирующего электронного микроскопа LEO 1455VP. Фазовый состав полученных покрытий исследовался методом рентгеноструктурного анализа (РСА) при помощи дифрактометра ДРОН-3.0. Измерения микротвердости покрытий выполнялись посредством прибора ПМТ-3.0 методом Виккерса.

В качестве режущего инструмента использовалась сборная концевая фреза D = 21 мм. Износостойкость режущего инструмента исследовалась на обрабатывающем центре ROVER B4.35 – универсальном многооперационном обрабатывающем центре.

Результаты и их обсуждение. Согласно фазовой диаграмме (рис. 1), TiN-покрытие имеет ОЦК структуру с преимущественной ориентацией (111), что свидетельствует о столбчатой структуре покрытий.

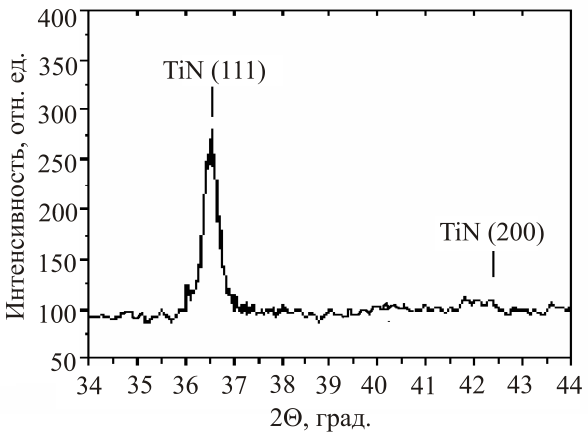


Рис. 1. Рентгенограмма TiN-покрытий

Представленная на рис. 2 типичная РЭМ – микрофотография скола TiN-покрытия подтверждает вывод о столбчатом строении сформированной системы. Аналогичной структурой обладают ZrN-покрытия. РЭМ – изображение режущей кромки инструмента с ZrN-покрытием показывает, что осажденный мононитрид ZrN имеет также столбчатое строение.

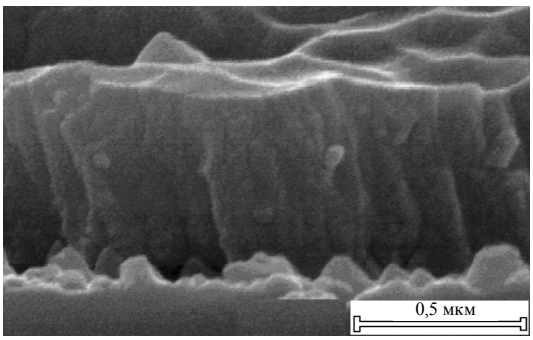


Рис. 2. Микрофотография скола TiN-покрытия (РЭМ)

Установлено, что покрытия Ti – Zr – N, полученные на твердых сплавах Т15К6, образуют твердый раствор $Ti_xZr_{x-1}N$ с ГЦК структурой типа NaCl и имеют такую же преимущественную ориентацию (111) роста кристаллов, как и для системы TiN [3]. При этом максимум твердости покрытия $Ti_xZr_{x-1}N$ наблюдается для $x = 0,66$ и составляет 26 ГПа.

Микротвердость TiN- и ZrN-покрытий на испытуемом резце составила 31,5 и 38,3 ГПа соответственно.

Методом РСМА был установлен неизвестный состав испытуемых резцов: WC – 97%, Co – 3%, что соответствует твердому сплаву отечественной марки ВК-3.

Для определения влияния покрытий на износостойкость и изучения механизмов износа режущих пластин концевой фрезы обрабатывалась древесно-стружечная плита (ДСтП) толщиной 25 мм с двусторонней отделкой пластей. Тип обработки – раскрой ДСтП. Режим резания составлял: частота вращения фрезы – 16 000 мин$^{-1}$; скорость подачи – 4 м/мин. Критерием потери режущей способности резца являлось появление сколов отделки плиты.

Полученные результаты резания плиты (таблица) показывают, что наибольшей стойкостью среди четырех видов сформированных покрытий обладают резцы с покрытием TiN, наименьшей – с ZrN. Указанные покрытия на резцах увеличивают их ресурс работы на 14,8 и 10,4% соответственно по сравнению с наилучшим среди двух видов испытуемых резцов без покрытия.

Как показывают данные РЭМ (рис. 3), рабочая поверхность твердосплавных ножей без покрытия подвержена хрупкому разрушению в виде скалывания и выкрашивания в процессе эксплуатации.

Осаждение покрытия на поверхность резца изменяет характер износа режущей кромки инструмента: наблюдается сглаживание образующихся в процессе износа трещин поверхности материала (рис. 4, 5).

Как уже установлено, при резании ДСтП и ДВП имеет место абразивный износ [4].

Поэтому ZrN-покрытие, обладая более высокой микротвердостью по сравнению с TiN-покрытием, но имея такую же столбчатую структуру, характеризуется меньшей износостойкостью, по-видимому, за счет более интенсивного диспергирования в контактную область взаимодействия с обрабатываемым материалом. Проведенные в ЗАО «Пинскдрев» (г. Пинск) производственные испытания концевых фрез с TiN-покрытиями увеличили стойкость инструмента в 1,8–2,0 раза, подтвердив их высокую износостойкость по сравнению с фрезами без покрытия.

Таблица

Результаты резания ДСтП

Полученное значение параметра	Резец без покрытия (Германия)		Резец с покрытием			
	№ 1	№ 2	TiN	(Ti, Zr) N	Ti	ZrN
Значение длины пути резца в обрабатываемом материале до потери стойкости, м	1310,3	1392,8	1504,0	1488,5	1470,1	1446,9
Увеличение значения длины пути резца в обрабатываемом материале по сравнению с наименее стойким резцом без покрытия, м	–	81,5	193,7	178,2	159,8	136,6
Увеличение значения длины пути резца в обрабатываемом материале по сравнению с наименее стойким резцом без покрытия, %	–	6,3	14,8	13,6	12,2	10,4

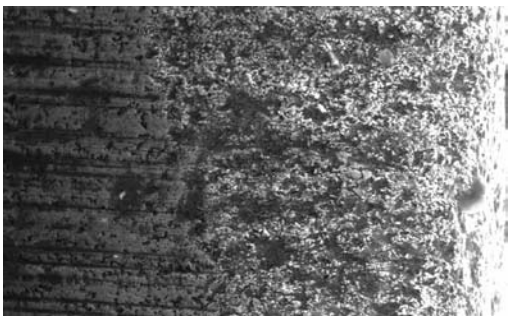


Рис. 3. Изображение поверхности режущей кромки инструмента без покрытия после деревообработки (РЭМ)

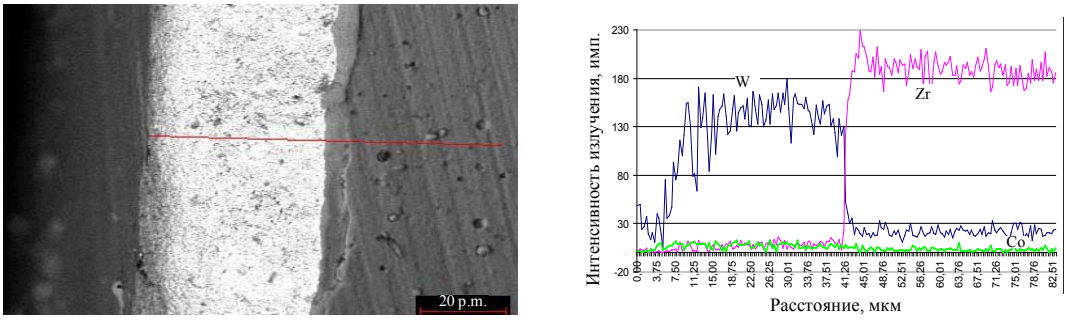


Рис. 4. Изображение с распределением характеристического излучения поверхности режущей кромки инструмента с ZrN-покрытием после деревообработки (РЭМ)

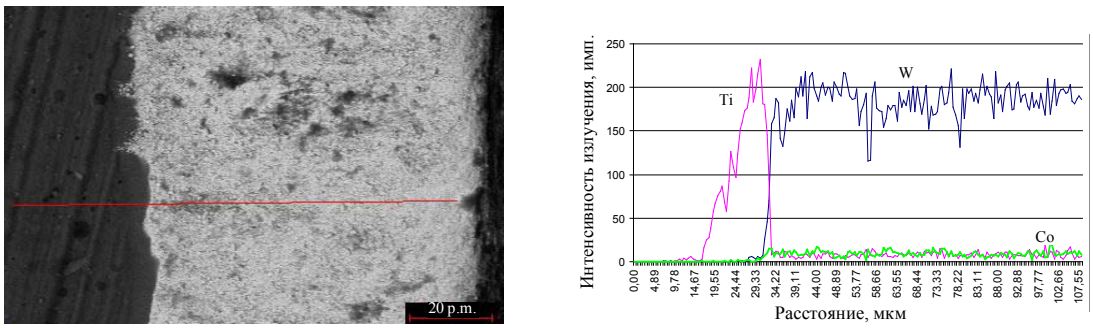


Рис. 5. Изображение с распределением характеристического излучения поверхности режущей кромки инструмента с TiN-покрытием после деревообработки (РЭМ)

Заключение. Таким образом, осажденные методом КИБ покрытия на твердосплавные пластины концевых фрез обеспечивают при обработке материалов из ДСтП повышение износостойкости инструмента. При этом наиболее эффективным является покрытие TiN. Сформированные покрытия изменяют характер износа режущей кромки инструмента.

Опытно-промышленными испытаниями, проведенными в условиях производства ЗАО «Пинскдрев», подтверждена высокая эффективность TiN-покрытий, которые позволили увеличить стойкость сборных концевых фрез в 1,8–2,0 раза при обработке материалов из ДСтП по сравнению с импортным инструментом без покрытия.

Литература

1 . Майснер , Д. А. Анализ существующих твердых сплавов в деревообработке и способ повышения их износостойкости / Д. А. Майснер , В. В. Огурцов, В. К. Косарев // Вестник СибГТУ. – 2003. – № 1. – С. 55–57.

2. Табаков, В. П. Многослойное покрытие для твердосплавного режущего инструмента для торцового фрезерования / В. П. Табаков, А. В. Циркин // Инновации в машиностроении: материалы Всероссийской НТК. – Пенза, 2002. – С. 80–82.

3. Злоцкий, С. В. Структура и механические свойства нитридных систем Ti – Zr – N, сформированных при совмещении плазменных потоков различной плотности / С. В. Злоцкий, В. В. Чаевский // Материалы 6-й Международной конференции «ВИТТ-2005», Минск, 28–30 сент. 2005 г. / БГУ. – Минск, 2005. – С. 170–172.

4. Моисеев, А. В. Контактные явления в микрообласти лезвия при резании древесины и их влияние на природу затупления инструмента: автореф. дис. … д-ра техн. наук / А. В. Моисеев. – М., 1983. – С. 15–16.

УДК 539.213.2

А. В. Мисевич, доцент; И. П. Ильюшонок, доцент; А. Е. Почтенный, вед. науч. сотрудник

ФОТОПРОВОДИМОСТЬ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПЕРИЛЕНОВЫХ ПИГМЕНТОВ

The photoconductivity of nanocomposite thin films of perylenetetracarboxylic dianhydride – polystyrene (PTCDA – PS) and N,N'-bismetyl-perylenetetracarboxylic diimide – lead phthalocyanine (Me-PTCDI – PbPc) was investigated. The experimental data is compared with data of Kelvin force microscopy, optical and dark electrical measurements. PTCDA photoconductivity measurements show that the decreasing of PTCDA concentration in composite below the percolation threshold decreases the relative photoresponse. The photoconductivity of Me-PTCDI – PbPc composite films was exited by light wavelengths from absorption areas of both components. It is causes possible due to charge carriers injection from low-conducted Me-PTCDI component into the more conductive PbPc component as well as due to photoexcitation of infinite cluster of light absorbed component.

Введение. Тонкие пленки периленовых пигментов используются в таких элементах органической электроники, как светоизлучающие диоды и солнечные батареи [1]. Недостаточная эффективность подобных устройств требует поиска путей для улучшения свойств входящих в эти устройства активных слоев [2]. Одним из таких путей может служить формирование тонкопленочных нанокомпозитных слоев на основе периленовых пигментов.

Цель данной работы – изучить явление фотопроводимости в двухкомпонентных тонкопленочных нанокомпозитных структурах: диангидрид перилентетракарбоновой кислоты – полистирол (PTCDA – PS) и N,N'-диметилдиимид перилентетракарбоновой кислоты – фталоцианин свинца (Me-PTCDI – PbPc); сопоставить полученные результаты с результатами исследования поверхности этих пленок методом Кельвина в условиях фотовозбуждения, а также с результатами исследования оптических и темновых электрофизических свойств.

Экспериментальная часть. Композитные пленки PTCDA – PS и Me-PTCDI – PbPc толщиной 50 нм были получены методом лазерного распыления в вакууме [3]. При получении пленок PTCDA – PS массовая доля PTCDA в распыляемой мишени составляла 20, 10 и 5%, а при получении пленок Me-PTCDI – PbPc массовые доли компонентов в распыляемой мишени были одинаковыми. Для исследования поверхности методом Кельвина пленки осаждались на стеклянные подложки, покрытые слоем проводящего оксида олова и индия, а для исследования электрофизических свойств – на подложки из полированного поликора с предварительно сформированной на них системой встречно-штыревых никелевых электродов.

Спектры поглощения пленок в видимой области спектра измерялись спектрофотометром SPECORD M40 (Carl Zeiss Jena, Германия).

Локальный поверхностный потенциал пленок на основе PTCDA измерялся методом Кельвина с помощью атомно-силового микроскопа Solver PRO (НТ-МДТ, Россия) с использованием проводящего зонда в условиях прерывистого освещения зеленым светодиодом с максимумом спектральной плотности энергетической светимости на длине волны 524 нм, что соответствует области собственного поглощения PTCDA. Свет включался и выключался непосредственно в процессе сканирования поверхности.

Для исследования электрофизических свойств пленок на основе PTCDA применялся метод циклической термодесорбции [4]. В результате были получены температурные зависимости проводимости при различных концентрациях адсорбированных примесей.

Фотопроводимость композитных пленок измерялась в воздухе при комнатной температуре на постоянном токе при напряженности электрического поля 10^5 В/м. Пленки освещались светодиодами, спектральная плотность энергетической светимости которых имеет максимумы при длинах волн: 524 нм – для зеленого светодиода и 660 нм – для красного светодиода. Спектр излучения зеленого светодиода лежит в области собственного поглощения PTCDA и Me-PTCDI, а спектр излучения красного светодиода – в области собственного поглощения PbPc. Энергетическая освещенность пленок при номинальных режимах светодиодов составляла 80 Вт/м^2 для зеленого светодиода и 400 Вт/м^2 для красного светодиода. Относительная освещенность поверхности (отношение действительной освещенности к номинальной) определялась по калибровочному графику, исходя из значений силы тока в светодиодах.

Результаты и их обсуждение. Оптические спектры показывают, что формирование композитных пленок PTCDA – PS и Me-PTCDI – PbPc методом лазерного распыления существенно не изменяет энергию межмолекулярного взаимодействия в этих пленках по сравнению с однокомпонентными. Это означает, что пигменты диспергированы в композитной пленке в виде кластеров, сохраняющих оптические свойства конденсированной фазы.

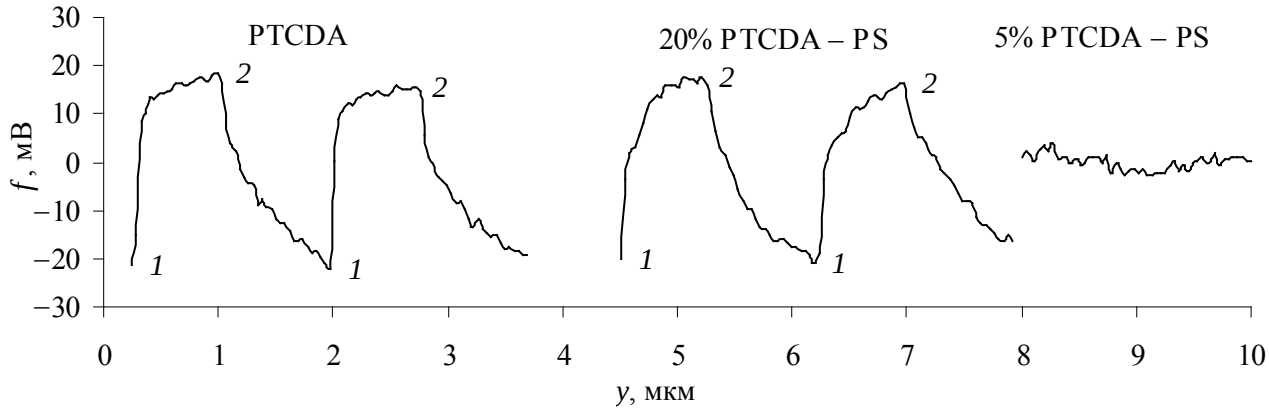


Рис. 1. Профили поверхностного потенциала пленок PTCDA и его композитов с полистиролом. По горизонтальной оси – координата вдоль поверхности, по вертикальной – отклонение поверхностного потенциала от среднего значения. Свет включался в точках *1* и выключался в точках *2*

На рис. 1 показаны приведенные к среднему значению, равному нулю, профили поверхностного потенциала пленок PTCDA и его композитов с полистиролом. Эти профили показывают, что если в пленках PTCDA и композита 20% PTCDA – PS наблюдается фотоотклик поверхностного потенциала, то в пленке 5% PTCDA – PS такой фотоотклик отсутствует. Учитывая, что теоретическое значение порога протекания (объемной доли проводящего компонента) для статистических композитов со сферическими частицами равно 0,17, можно предположить, что пленки композита 20% PTCDA – PS содержат бесконечный кластер частиц PTCDA, а в пленках 5% PTCDA – PS такой кластер отсутствует, и их проводимость определяется уже не свойствами кластера PTCDA, а свойствами полимерной матрицы. Увеличение поверхностного потенциала при освещении свидетельствует о том, что поглощение света вызывает опускание уровня Ферми по шкале энергии, следовательно, проводимость пленок на основе PTCDA является проводимостью *n*-типа.

На рис. 2 представлена полученная методом циклической термодесорбции взаимосвязь между предэкспоненциальным множителем температурной зависимости проводимости G_0 и энергией активации проводимости $E_а$ для пленок PTCDA и композитных пленок PTCDA – PS. Точки *1* соответствуют наибольшим концентрациям адсорбированных примесей, а точки *2* – наименьшим. При десорбции примесей происходит одновременное снижение энергии активации проводимости $E_а$ и предэкспоненциального множителя G_0. Согласно модели прыжковой проводимости [5], которая достаточно хорошо описывает электрофизические свойства тонких пленок перилеиовых пигментов [4], уменьшение G_0 обусловлено снижением концентрации центров локализации, по которым происходит электроперенос. При десорбции примесей уменьшается концентрация примесных состояний и, следовательно, электроперенос в пленках PTCDA и PTCDA – PS идет по примесным центрам локализации.

По мере сокращения содержания в композитной пленке пигмента PTCDA зависимости на рис. 2 опускаются ниже по шкале $\ln G_0$, что объясняется уменьшением объемной доли проводящей фазы композита. При этом наклон зависимостей для пленки PTCDA и пленки 20% PTCDA – PS примерно одинаков, что подтверждает наличие в композитной пленке бесконечного кластера PTCDA. Отсутствие бесконечного кластера PTCDA в композитных пленках 10% PTCDA – PS и 5% PTCDA – PS подтверждается тем, что наклон зависимостей $\ln G_0 - E_а$ для этих пленок примерно в 2 раза меньше, чем для пленок PTCDA и композитных пленок 20% PTCDA – PS.

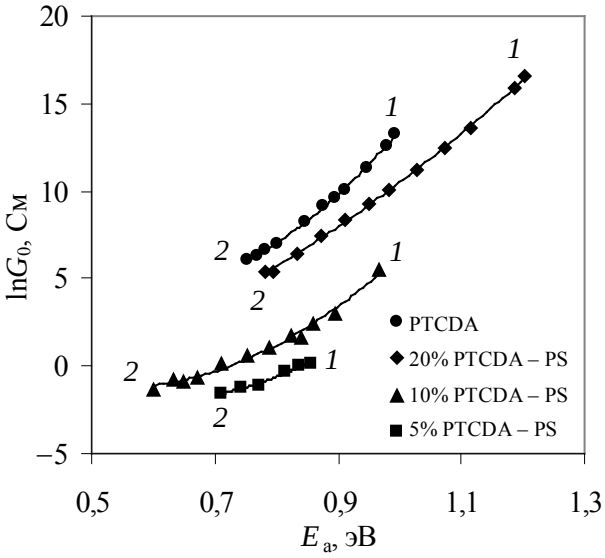


Рис. 2. Зависимость между предэкспоненциальным множителем G_0 и энергией активации $E_а$ для пленок PTCDA и пленок PTCDA – PS

В таблице приведены значения относительного фотоотклика R_f для исследуемых композитных пленок на освещение зеленым и красным светодиодами. Возбуждение фотопроводимости в пленках композита PTCDA – PS при освещении зеленым светодиодом обусловлено генерацией носителей заряда в кластерах PTCDA. При этом в композитных пленках 20% PTCDA – PS фотопроводимость происходит по бесконечному кластеру PTCDA, а в композитных пленках 10% PTCDA – PS и 5% PTCDA – PS фотопроводимость контролируется полимерной матрицей, в которую носители заряда инжектируются из кластеров PTCDA. Уменьшение относительного фотоотклика на зеленый свет при снижении содержания PTCDA в композитной пленке связано с разрушением бесконечного фотопроводящего кластера PTCDA.

Таблица

Относительный фотоотклик R_f при освещении пленок зеленым и красным светодиодами

Материал пленки	R_f	
	Зеленый светодиод	Красный светодиод
PTCDA	655,0	16,7
20% PTCDA – PS	137,5	6,4
5% PTCDA – PS	17,6	–
Me-PTCDI – PbPc	102,2	23,5

В пленках композита Me-PTCDI – PbPc, выдержанных в воздухе при комнатной температуре, т. е. при высокой концентрации адсорбированных примесей, фотопроводимость возбуждается как красным, так и зеленым светодиодом. Исследования методом циклической термодесорбции композитных пленок Me-PTCDI – PbPc, выполненные нами ранее [4], показали, что без фотовозбуждения в пленках композита Me-PTCDI – PbPc при высоких концентрациях адсорбированных примесей проводящей фазой является бесконечный кластер фталоцианина свинца. Следовательно, возбуждение фотопроводимости красным светодиодом в пленках композита Me-PTCDI – PbPc обусловлено наличием непрерывного кластера частиц PbPc. При освещении зеленым светодиодом фотопроводимость возникает либо непосредственно в бесконечном кластере Me-PTCDI, который без фотовозбуждения при данных условиях не является проводящим, либо инжекцией носителей заряда, генерируемых в Me-PTCDI, в проводящий кластер PbPc.

Заключение. В композитных пленках PTCDA – PS и Me-PTCDI – PbPc пигменты диспергированы не на молекулярном уровне, а в виде кластеров, сохраняющих оптические свойства конденсированной фазы.

Измерения поверхностного потенциала методом сканирующей микроскопии Кельвина показали, что пленки PTCDA и 20% PTCDA – PS имеют проводимость *n*-типа, и частицы PTCDA образуют бесконечный кластер. В пленках 5% PTCDA – PS бесконечный кластер не образуется.

Измерения темновых электрофизических свойств композитных пленок на основе PTCDA показали, что в пленках 20% PTCDA – PS реализуется прыжковая проводимость по примесным состояниям бесконечного кластера PTCDA, а в пленках 10% PTCDA – PS и 5% PTCDA – PS прыжковая проводимость обусловлена примесными состояниями слабопроводящей полимерной матрицы.

Исследование фотопроводимости пленок на основе PTCDA показало, что при уменьшении содержания PTCDA в композитной пленке относительный фотоотклик на зеленый свет снижается, что связано с уменьшением объема бесконечного фотопроводящего кластера PTCDA, а при снижении содержания PTCDA ниже порога протекания – с разрушением бесконечного фотопроводящего кластера PTCDA.

В пленках композита Me-PTCDI – PbPc фотопроводимость возбуждается светом с длинами волн, соответствующими области поглощения обеих компонент. Это может быть связано как с фотовозбуждением бесконечного кластера поглощающей свет компоненты, так и с инжекцией носителей заряда из менее проводящей компоненты Me-PTCDI в более проводящую копмоненту PbPc.

Полученные результаты показывают перспективность применения композитных пленок на основе периленовых пигментов в таких элементах органической электроники, как светоизлучающие диоды и солнечные батареи.

Литература

1. Forrest, S. R. Ultrathin organic films grown by organic molecular beam deposition and related techniques / S. R. Forrest // Chem. Rev. – 1997. – Vol. 97. – P. 1793–1896.

2. Shaw, J. M. Organic electronics: Introduction / J. M. Shaw, P. F. Seidler // IBM J. Res. & Dev. – 2001. – Vol. 45, № 1. – P. 3–9.

3. Laser beam synthesis of copper phthalocyanine based films with low dimensional structuring / A. V. Misevich [et al.] // Interaction of Radiation with Solids: Proc. 4th Int. Conf., Minsk, Belarus, 3–5 October 2001 / Belarussian State University. – Minsk, 2001. – P. 360–362.

4. Мисевич, А. В. Адсорбционно-резистивные свойства композитных пленок на основе периленовых пигментов / А. В. Мисевич, А. Е. Почтенный, А. Н. Лаппо // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 75–78.

5. Шкловский, Б. И. Электронные свойства легированных полупроводников / Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос. – М.: Наука, 1979. – 416 с.

УДК 535.373.2

В. В. Сапунов, ассистент

О МЕХАНИЗМЕ ТУШЕНИЯ ТРИПЛЕТНОГО СОСТОЯНИЯ Mg-ФТАЛОЦИАНИНА КОМПЛЕКСАМИ ПОРФИРИНОВ С СЕРЕБРОМ, НИКЕЛЕМ И ЖЕЛЕЗОМ

Kinetics of triplet state quenching of Mg phthalocyanine by porphyrin complexes of Ag, Ni and Fe were studied using flash photolysis technique. It is established that Mg phthalocyanine triplet state decay was nonexponential. Dependences of the characteristic parameter of the triplet state decay, on its concentration and time were nonlinear. These unusual dependences were explained in terms of mechanism of excited complexes formation from Mg phthalocyanine triplet state molecules and molecules of quenchers. Rate constants for processes of this mechanism were determined by computer fitting.

Введение. Среди тетрапиррольных соединений значительный интерес представляют их комплексы с магнием и переходными металлами. Mg-фталоцианин (Mg-ФЦ) неоднократно рассматривался как модельное соединение для хлорофиллов, в молекулах которых присутствует ион Mg^{2+}.

Изучение комплексов порфиринов с переходными металлами необходимо для понимания биологических процессов с участием таких соединений и роли в них ионов переходных металлов. Тушение триплетного состояния (ТС) ряда тетрапиррольных молекул комплексами порфиринов с Ag, Ni, и Fe изучено в ряде работ [1]. В данной работе получены новые данные о механизме такого процесса.

Эксперимент и анализ. Рассматривали влияние на кинетику дезактивации ТС Mg-ФЦ добавок Ni(II)-мезо-тетрафенилпорфина (Ni-ТФП), N i(II)-этиопорфирина I (Ni-ЭП), Ag(II)-ЭП и Fe(III)Cl-октаэтилпорфина (Fe-ОЭП). Регистрировали кинетику ослабления триплет-три-плетного (*TT*) поглощения Mg-ФЦ. Измерения проводили на установке импульсного лампового фотолиза (длительность импульса света $\tau_{1/2} \approx 20$ мкс, энергия разряда ≈200 Дж) с фотоэлектрической регистрацией. Обработку кинетик выполняли как по стандартной методике [2], так и с применением компьютера путем оцифровки кинетических зависимостей. Результаты, полученные при использовании двух методов, достаточно хорошо соответствуют друг другу. На рис. 1–2 даны зависимости, полученные с применением второго из этих методов. Исследованные растворы были обезгажены по стандартной методике откачивания под вакуумом.

Большинство полученных зависимостей $\ln\Delta D$ от времени t (ΔD – уменьшение оптической плотности наведенного поглощения) при небольших концентрациях тушителей ($[Q] \le 4 \cdot 10^{-6}$ моль/л) и при их отсутствии являлись нелинейными. Следовательно, дезактивация ТС осуществлялась в целом по неэкспоненциальному закону. Конечные участки зависимостей $\ln\Delta D(t)$ близки к линейным зависимостям. Для зависимостей $\ln\Delta D(t)$ отклонения от линейности наибольшие – при наибольших концентрациях Mg-ФЦ в ТС ($[T]$). Такие отклонения максимальны для растворов, где были наибольшие $[T]$. Эти данные свидетельствуют в пользу того, что неэкспоненциальность для зависимости $\ln\Delta D(t)$ обусловлена влиянием триплет-триплетной аннигиляции (ТТА). При увеличении $[Q]$ эта неэкспоненциальность постепенно уменьшалась, дезактивация ТС происходила по закону, достаточно близкому к экспоненциальному. Это можно объяснить уменьшением $[T]$ (в результате тушения ТС) и влиянием ТТА.

Определяли зависимости $k([T])$, где k – параметр, характеризующий скорость неэкспоненциальной дезактивации ТС. Значения k вычисляли по формуле $k = d / dt[\ln(\Delta D_0 / \Delta D)]$ [2]. На рис. 1 приведен ряд зависимостей $k([T])$. Установлено, что такие графики являются нелинейными, и их вид зависит от $[Q]$. Ход зависимостей $k([T])$ типа кривой *1* на рис. 1 (т. е. в отсутствие тушителей) ранее [3] был объяснен на основе ТТА через образование комплексов (*TT*) по схеме

$$
\begin{array}{ccccccc}
 & & & k_1 & & k_3 & \\
T & + & T & \Leftrightarrow & (TT) & \rightarrow & 2S \\
 & & & k_2 & & & \\
k_0\downarrow & & k_0\downarrow & & \downarrow k_4 & & \\
S & & S & & T + S & & \\
 & & & & k_0\downarrow & & \\
 & & & & S & &
\end{array}
\qquad \text{(I)}
$$

где $k_0 - k_4$ – константы скоростей отдельных процессов. Согласно кинетическому анализу [3] схемы (I), выражение

$$k = \frac{k_0\left(k_2 + \frac{k_4}{2}\right) + k_1\left(k_3 + \frac{k_4}{2}\right)[T]}{k_2 + \frac{k_4}{2} + k_1[T]} \qquad (1)$$

справедливо при больших $[T]$. Формула (1) описывает ход зависимости $k([T])$ в целом.

Следовательно, при ТТА по схеме (I) зависимость k от $[T]$ должна быть в целом нелинейной и иметь вид типа зависимости *1* на рис. 1.

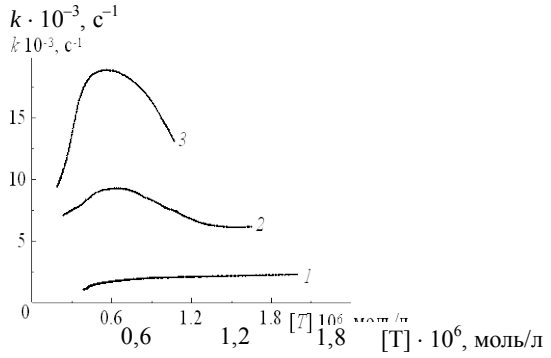


Рис. 1. Концентрационные зависимости параметра дезактивации ТС Mg-ФЦ в толуоле ([Mg-ФЦ] = 2,4 · 10^{-6} моль/л) при [Ni-ТФП], моль/л: *1* – 0; *2* – 1,4 · 10^{-5}; *3* – 4,0 · 10^{-5}

Несоответствие экспериментальных зависимостей $k([T])$ характеру функции (1) имеет место и при меньших $[T]$. На рис. 1 для кривых *2* и *3* при уменьшении $[T]$ значения k сначала возрастают, что не соответствует влиянию ТТА на ТС, а затем снова уменьшаются. Эти зависимости можно объяснить наложением на кинетику дезактивации ТС кинетики образования и распада других частиц. Этими частицами, по-видимому, являются комплексы (TQ) из взаимодействующих молекул Mg-ФЦ в ТС и молекул-тушителей в основном состоянии, образующиеся по следующей схеме:

$$\text{(II)}\quad \begin{array}{ccccccccc} & & & k_1' & & k_3' & & & \\ T & + & Q & \Leftrightarrow & (TQ) & \rightarrow & S & + & Q \\ k_0\downarrow & & & k_2' & & & & & \\ S & & & & & & & & \end{array}$$

где T, S и Q – молекулы донора энергии в триплетном и основном состояниях и тушителя соответственно; $k_0 - k_3'$ – константы скоростей отдельных процессов.

Кинетические уравнения для квазиравновесного случая ТТА по схеме (I), возможного при малых $[T]$ ($[T] \le 10^{-6}$ моль/л), имеют вид

$$-\frac{d[T]}{dt} = k_0[T] + k_A[T]^2 + k_1'[T][Q] - k_2'[(TQ)], \quad (2)$$

$$-\frac{d[(TQ)]}{dt} = -k_1'[T][Q] + (k_2' + k_3')[(TQ)], \quad (3)$$

где

$$k_A = \frac{k_1\left(k_3 + \frac{k_4}{2}\right)}{k_2 + k_3 + k_4}. \quad (4)$$

Для квазиравновесного случая образования и распада комплексов (TQ) (при $[(TQ)] << [Q]$, что выполняется, по-видимому, для рассмотренных соединений, когда $d[(TQ)] / dt = 0$) вместо уравнений (2) и (3) получим выражения

$$-\frac{d[T]}{dt} = k_0[T] + k_A[T]^2 + k_3'[(TQ)], \quad (5)$$

$$-\frac{d(\ln[T])}{dt} = k_0 + k_A[T]^2 + k_3'\frac{[(TQ)]}{[T]}. \quad (6)$$

В рассматриваемом примере

$$k = k_0 + k_A[T] + k_3'\frac{[(TQ)]}{[T]}. \quad (7)$$

При уменьшении $[T]$ последний член в уравнении (7) при постоянстве $[(TQ)]$ должен возрастать. Однако для схемы (II) изменение $[(TQ)]$ описывается разностью двух экспонент:

$$[(TQ)] = \mathrm{A}\, k_1'[Q_0]\exp(-\lambda_1 t) - \mathrm{B}\, k_1'[Q_0]\exp(-\lambda_2 t), \quad (8)$$

где $[Q_0]$ – полная концентрация тушителя (А и В определяются начальными условиями: $\lambda_1 + \lambda_2 = k_0 + k_1'[Q] + k_2' + k_3'$, согласно анализу уравнений (4) и (5), $\lambda_1 = k_2' + k_3'$, $\lambda_2 = k_0 + k_1'[Q]$ (при относительно малых $[Q_0]$ при $k_0 + k_1'[Q] << k_2' + k_3'$)).

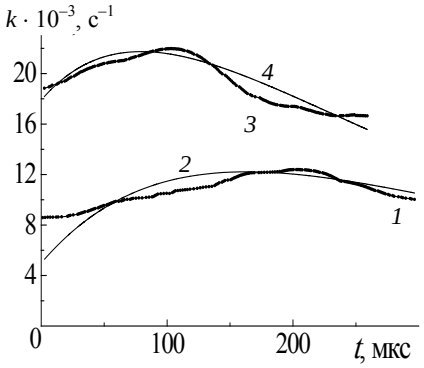


Рис. 2. Временные зависимости параметра дезактивации ТС Mg-ФЦ ([Mg-ФЦ] = 11,3 · 10^{-6} и 2,5 · 10^{-6} моль/л соответственно) в ДМФ при [Ni-ТФП], моль/л: *1* – 0,5 · 10^{-5}; *2* – 2,6 · 10^{-5}; *3* – 0,9 · 10^{-5}; *4* – 1,5 · 10^{-5}

В случае изменения t значения $[(TQ)]$ сначала возрастают, достигают максимума, а затем уменьшаются, и для k должно быть максимальное значение во времени, что и наблюдается на кривых *2* и *3* на рис. 1 и 2, где приведен ряд

экспериментальных зависимостей $k(t)$. По-видимому, немонотонные зависимости $k([T])$ (кривые *2* и *3* на рис. 1) в определенной степени характеризуют образование и распад комплексов (TQ). Как отмечалось выше, дезактивация ТС Mg-ФЦ при значительных $[Q_0]$ происходит по закону, близкому к экспоненциальному, т. е.

$$[T] \approx [T_0]\exp(-k_T\, t), \qquad (9)$$

тогда из уравнений (7)–(9) получим, что

$$k(t) \approx k_0 + C_1\exp(-k_T\, t) + C_2\exp[-(\lambda_1 - k_T)t] - \\ - C_3\exp[-(\lambda_2 - k_T)t], \qquad (10)$$

где $C_1 = [T_0]$, $C_2 = \mathrm{A}\, k_1' [Q_0]$ и $C_3 = \mathrm{B}\, k_1' [Q_0]$.

Используя компьютерное моделирование (подбирая значения $\lambda_1 - k_T$, $\lambda_2 - k_T$, C_2 и C_3) при сопоставлении рассчитанных зависимостей (10) и экспериментальных $k(t)$, получили зависимости $k(t)$, которые приведены на рис. 2. Из рис. 2 видно, что рассчитанные зависимости $k(t)$ соответствуют экспериментальным.

Обсуждение результатов. Установлено, что ход кривых $k([T])$ зависит от величины $[Q]$. То, что немонотонный ход зависимостей $k([T])$ при средних и малых $[T]$ отчетливее проявляется при повышении $[Q]$, можно объяснить увеличением $[(TQ)]$ при возрастании $[Q]$ (увеличение в целом значений k при возрастании $[Q]$, очевидно, обусловлено тушением ТС (и, возможно, комплексов (TT)). Установлено, что значения C_2 и C_3 возрастают при увеличении $[Q_0]$, что соответствует характеру функций (8) и (10). Значения $\lambda_1 = k_2' + k_3'$, характеризующие время жизни комплексов (TQ), несколько меньше значений константы скорости дезактивации ТС при воздействии на него тушителей – λ_2 (при моделировании соответствие экспериментальных и рассчитанных зависимостей $k(t)$ для всех систем получено только при $\lambda_1 < \lambda_2$). Такое соотношение λ_1 и λ_2 представляется естественным при образовании комплексов (TQ) (время жизни ТС молекул пигмента, не входящих в комплексы, сокращается в результате тушения больше, чем в комплексах). Последние, по-видимому, образуются вследствие проявления дисперсионных сил притяжения, которые для возбужденных состояний могут быть больше, чем для основного из-за возрастания поляризуемости молекул при возбуждении.

Как установлено, при повышении $[Q_0]$ значения λ_1 и λ_2 возрастают. Увеличение значений λ_2 соответствует выражению $\lambda_2 = k_0 + k_1' [Q]$. Возрастание значений λ_1 можно объяснить тем, что комплексы (TQ) дезактивируются тушителями, как и молекулы Mg-ФЦ в ТС, в результате межмолекулярного переноса энергии по обменному механизму.

Тушение ТС Mg-ФЦ комплексами порфиринов с Ag, Ni и Fe в принципе может быть обусловлено как межмолекулярным переносом энергии ТС пигмента на низколежащие уровни, связанные с возбуждением ионов металлов (поскольку энергии ТС $E_т$ молекул-тушителей, равные 13 500 – 14 500 см$^{-1}$, значительно больше $E_т$ Mg-ФЦ) [1], так и фотопереносом электрона (ФПЭ) с молекулы Mg-ФЦ в ТС на молекулы-тушители. Согласно проведенной оценке, для рассматриваемого ФПЭ существуют значительные энергетические барьеры и эффективность его должна быть невелика. Можно сделать вывод о том, что наблюдавшееся тушение ТС Mg-ФЦ действительно обусловлено переносом энергии, а не ФПЭ.

Заключение. Полученные данные свидетельствуют в пользу того, что наблюдавшееся тушение ТС Mg-ФЦ комплексами порфиринов с Fe, Ag и Ni происходит через образование возбужденных комплексов (TQ) из взаимодействующих молекул.

Литература

1. Сапунов, В. В. Тушение триплетных состояний Fe(II)- и Fe(III)-порфиринами / В. В. Са-пунов, М. П. Цвирко, К. Н. Соловьев // Биофизика. – 1977. – Т. 22, № 5. – С. 667–670.

2. Pekkarinen, L. Studies on Metastable States of Porphyrins. II. Spectra and Decay Kinetics of Tetraphenylporphine, Zink Tetraphenylporphine and Bacteriochlorophyll / L. Pekkarinen, H. Linschitz // J. Amer. Chem. Soc. – 1960. – Vol. 82, № 10. – P. 2407–2411.

3. Сапунов, В. В. О кинетике триплет-триплетной аннигиляции в жидких растворах / В. В. Сапунов // Опт. и спектр. – 1995. – Т. 79, № 4. – С. 606–612.

УДК 537

Н. А. Ахраменко, доцент (БелГУТ); Л. М. Булавко, ст. преподаватель (БелГУТ);
В. Я. Матюшенко, профессор (БелГУТ)

О МАГНИТНОМ ПОЛЕ БЕСКОНЕЧНОГО СОЛЕНОИДА

Calculation intensity of the magnetic field was examined for cases when electric current disposed on the surfaces for points on the surfaces, into the surfaces (the solenoid's surfaces) and out of the surfaces. Superposition magnetic field was used in the study of intensity of the magnetic field for electric current on the surfaces of the infinite solenoid.

Введение. Поскольку соленоид представляет собой проводник, намотанный близко или вплотную виток к витку по цилиндрической поверхности, то ток, текущий по проводнику, можно представить как суперпозицию линейного и кругового токов. Шаг спирали в этом случае задает величину осевого направления тока.

При малом шаге спирали соленоид можно рассматривать как систему последовательно соединенных друг с другом круговых витков или токов одинакового радиуса с общей осью, а величиной осевого направления тока можно пренебречь.

Индукцию магнитного поля соленоида определяют, используя закон полного тока [1–9]. Для точек внутри и вне цилиндрической поверхности величина индукции магнитного поля равна

$$B = \begin{cases} 0 \text{ при } & r > R, \\ \mu_0 n I \text{ при } & r < R \end{cases} \qquad (1)$$

где r – расстояние от оси цилиндра (соленоида) до исследуемой точки; R – радиус цилиндра (соленоида); I – ток соленоида; n – количество витков на единицу длины.

Магнитное поле сосредоточено внутри соленоида и является однородным.

Очевидно, что сам проводник также находится в некотором поле. Это поле действует на витки соленоида и создает там механические напряжения. Поэтому возникает необходимость определения магнитного поля при $r = R$, т. е. в точках локализации самого проводника с током. При стремлении к нулю толщины проводника ток в идеальном случае будет распределен по поверхности цилиндра.

Для определения $\vec{B}$ в точках, принадлежащих поверхности цилиндра, воспользуемся законом Био – Савара – Лапласа и принципом суперпозиции для магнитных полей. С этой целью найдем индукцию магнитного поля одного элемента тока при $r = R$, а затем всего соленоида.

Основная часть. Рассмотрим элемент тока *1* на поверхности цилиндра радиусом R, длина и направление которого задается вектором $d\vec{l}$ (рис. 1).

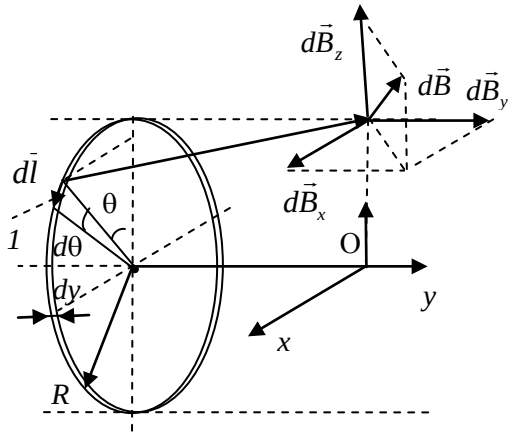


Рис. 1. Элемент тока *1* на поверхности цилиндра радиусом R, длина и направление которого задается вектором $d\vec{l}$

Согласно закону Био – Савара – Лапласа, величина $d\vec{B}$, создаваемая элементом тока, равна

$$d\vec{B} = \frac{\mu_0 dI\left[d\vec{l} \times \vec{\rho}\right]}{4\pi\rho^3}, \qquad (2)$$

где dI – величина тока в выбранном элементе тока; $\vec{\rho}$ – радиус-вектор от выбранного элемента тока до исследуемой точки.

Величины векторов $d\vec{l}$ и $\vec{\rho}$ представим через единичные вектора вдоль осей координат:

$$d\vec{l} = dl_x\vec{i} + dl_z\vec{k} = dl\cos\theta\vec{i} - dl\sin\theta\vec{k}, \qquad (3)$$

$$\vec{\rho} = -R\sin\theta\vec{i} + y\vec{j} + R(1-\cos\theta)\vec{k}. \qquad (4)$$

Преобразуем выражение (2) с учетом свойств векторного произведения:

$$d\vec{B} = \frac{\mu_0 dI}{4\pi\rho^3}\begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ dl\cos\theta & 0 & -dl\sin\theta \\ -R\sin\theta & -y & R(1-\cos\theta) \end{vmatrix} = \frac{\mu_0 dI}{4\pi\rho^3}\times$$

$$\times\left[ydl\sin\theta\vec{i} - \left(dl\cos\theta R(1-\cos\theta) + dlR\sin^2\theta\right)\vec{j} + \right.$$

$$\left. + ydl\cos\theta\vec{k}\right]. \qquad (5)$$

Учитывая, что $dl = Rd\theta$ выражение (5) можно преобразовать к следующему виду:

$$d\vec{B} = \frac{\mu_0 dI}{4\pi\rho^3}\left[yR\sin\theta d\theta\vec{i} + R^2\left(1-\cos\theta\right)d\theta\vec{j} + \right.$$

$$\left. + yR\cos\theta d\theta\vec{k}\right]. \qquad (6)$$

Величину тока dI представим через плотность тока по поверхности j в виде $dI = jdy$. Модуль вектора $\vec{\rho}$ определяется выражением

$$\rho = |\vec{\rho}| = \sqrt{(-R\sin\theta)^2 + (-y)^2 + (R(1-\cos\theta))^2} =$$

$$= \sqrt{2R^2 + y^2 - 2R^2\theta}. \qquad (7)$$

С учетом этого компоненты вектора $d\vec{B}$ будут равны:

$$dB_x = \frac{\mu_0 jdy}{4\pi\left(2R^2 + y^2 - 2R^2\cos\theta\right)^{3/2}} \times$$

$$\times\left[-yR\sin\theta d\theta\right], \qquad (8)$$

$$dB_y = \frac{\mu_0 jdy}{4\pi\left(2R^2 + y^2 - 2R^2\cos\theta\right)^{3/2}} \times$$

$$\times\left[R^2(1-\cos\theta)d\theta\right], \qquad (9)$$

$$dB_z = \frac{\mu_0 jdy}{4\pi\left(2R^2 + y^2 - 2R^2\cos\theta\right)^{3/2}} \times$$

$$\times\left[yR\cos\theta d\theta\right]. \qquad (10)$$

Проинтегрировав по всей поверхности, получим компоненты вектора $\vec{B}$:

$$B_x =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\mu_0 j}{4\pi\left(2R^2 + y^2 - 2R^2\cos\theta\right)^{3/2}}\left[yR\sin\theta\right], \qquad (11)$$

$$B_y =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\mu_0 j}{4\pi\left(2R^2 + y^2 - 2R^2\cos\theta\right)^{3/2}}\left[R^2(1-\cos\theta)\right], \qquad (12)$$

$$B_z =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\mu_0 j}{4\pi\left(2R^2 + y^2 - 2R^2\cos\theta\right)^{3/2}}\left[yR\cos\theta\right]. \qquad (13)$$

Интегрирование (11) и (13) по переменной y дает нуль. Интегрирование (12) по переменной y дает:

$$B_y =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\mu_0 j}{4\pi\left(2R^2 + y^2 - 2R^2\cos\theta\right)^{3/2}} R^2(1-\cos\theta) =$$

$$= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\mu_0 j}{4\pi} R^2(1-\cos\theta) \frac{1}{2R^2 - 2R^2\cos\theta} \times$$

$$\times \frac{y}{\left(2R^2 + y^2 - 2R^2\cos\theta\right)^{1/2}}\Bigg|_{-\infty}^{+\infty} =$$

$$= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\mu_0 j}{4\pi} R^2(1-\cos\theta) \frac{2}{2R^2 - 2R^2\cos\theta}\Bigg|_{-\infty}^{+\infty} =$$

$$= \frac{\mu_0 j}{2}. \qquad (14)$$

С учетом полученных компонент вектора $\vec{B}$ для точек поверхности можно записать

$$B = \begin{cases} 0 \text{при} & r >, R \\ \dfrac{\mu_0 j}{2} \text{ при} & r = R, \\ \mu_0 j \text{при} & r < R \end{cases} \qquad (15)$$

Графическая зависимость величины $\vec{B}$ тока соленоида от расстояния r относительно его оси представлена на рис. 2.

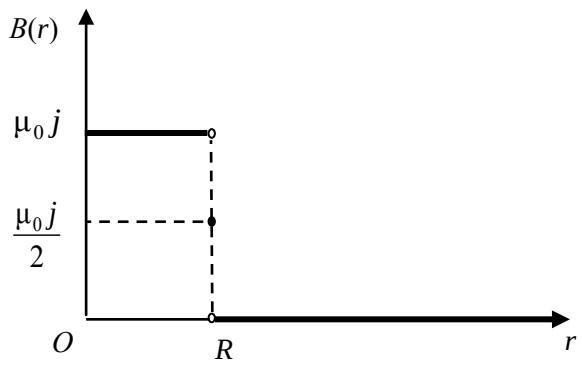


Рис. 2. Зависимость величины индукции магнитного поля тока соленоида $\vec{B}$ от расстояния r относительно его оси

В результате исследований получили, что величина индукции магнитного поля на поверхности соленоида не равна ее величине как вблизи внешней поверхности, так и вблизи внутренней поверхности.

Зная $\vec{B}$ в точках, принадлежащих цилиндрической поверхности, можно найти силу, действующую на элемент тока:

$$dF = BdIdl = Bjdydl =$$

$$= \left(\frac{\mu_0 j}{2}\right) jdydl = \frac{\mu_0 j^2}{2} dydl. \qquad .(16)$$

Площадь элемента поверхности

$$dS = dydl, \qquad (17)$$

$$dF = \frac{\mu_0 j^2}{2} dS. \qquad (18)$$

Вектор $d\vec{F}$ будет направлен радиально от оси цилиндра, т. е. ток как бы растягивает цилиндр. Поэтому соленоид, по которому течет ток, испытывает радиальное растяжение. Давление, испытываемое витками с током, будет равно

$$p = \frac{dF}{dS} = \frac{\mu_0 j^2}{2} = \left(\frac{\mu_0 j}{2}\right)^2 \frac{2}{\mu_0} = \frac{2B_п^2}{\mu_0}, \qquad (19)$$

где $B_п$ – индукция магнитного поля в точках поверхности цилиндра с круговым током.

Учитывая, что $j = nI$, выражения (15) примут следующий вид:

$$B = \begin{cases} 0 \text{при} & r >, R \\ \dfrac{\mu_0 In}{2} \text{ при } & r = R, \\ \mu_0 In \text{ при} & r < R \end{cases} \qquad (20)$$

Значение $\vec{B}$ на поверхности цилиндра можно представить как ее усредненное значение по сечению проводника в соленоиде. Поэтому элемент длины проводника в соленоиде испытывает радиальное растяжение, сила которого равна

$$dF = BnIDdl = \left(\frac{\mu_0 nI}{2}\right) nIDdl = \frac{\mu_0 n^2 I^2}{2} Ddl, \quad (21)$$

где D – диаметр проводника. Используя то, что $n = 1 / D$, получим силу, приходящуюся на элемент длины проводника:

$$\frac{dF}{dl} = \frac{\mu_0 I^2}{2} n. \qquad (22)$$

Заключение. График величины $\vec{B}$ при переходе через поверхность с током (рис. 2) претерпевает разрыв с обособленной точкой в месте разрыва. Это позволяет уточнить известные граничные условия для поверхностных токов. Касательные составляющие вектора напряженности магнитного поля $\vec{H}$ (и, следовательно, вектора магнитной индукции $\vec{B}$) при переходе через поверхностный ток соответственно равны:

$$H_{2\tau} - H_{1\tau} = \frac{4\pi}{c} j \text{ (СГС)},$$

или

$$B_{2\tau} - B_{1\tau} = \mu_0 j \text{ (СИ)}. \qquad (23)$$

Соответствующие вектора ($\vec{H}$ и $\vec{B}$) претерпевают разрыв, и условия (23) показывают их связь вблизи внешней и внутренней поверхностей. Однако здесь отсутствует значение индукции поля на самой поверхности при рассмотрении перехода через поверхность. Поэтому с учетом величины индукции магнитного поля для самой поверхности (выражения (15)) эти граничные условия можно представить в виде

$$B_{2\tau п\tau} - B = \frac{\mu_0}{2} j, \quad B_{п\tau} - B_{1\tau} = \frac{\mu_0}{2} j, \qquad (24)$$

где $B_{п\tau}$ – значение тангенциальной составляющей индукции на самой поверхности с током. Граничные условия в виде (24) учитывают значение индукции на самой поверхности, чего нет в условиях в виде (23). Выражения (24) дают более полную связь векторов при переходе через поверхностный ток, так как из них, как частный случай, следует выражение (23).

Литература

1. Сивухин, Д. В. Электричество / Д. В. Сивухин. – М.: Наука, 1983. – 703 с.
2. Матвеев, А. Н. Электричество и магнетизм / А. Н. Матвеев. – М.: Высш. шк., 2005. – 464 с.
3. Иродов, И. Е. Основные законы электромагнетизма / И. Е. Иродов. – М.: Высш. шк., 1991. – 280 с.
4. Савельев, И. В. Курс общей физики: в 3 т. / И. В. Савельев. – М.: Наука, 1988. – Т. 2: Электричество и магнетизм. Волны. Оптика. – 480 с.
5. Тамм, И. Е. Основы теории электричества / И. Е. Тамм. – М.: Физматлит, 2003. – 616 с.
6. Наркевич, И. И. Физика: учеб. / И. И. Наркевич, Э. И. Волмянский, С. И. Лобко. – Минск: Новое знание, 2004. – 680 с.
7. Ахраменко, Н. А. К определению электрического поля поверхностно распределенных зарядов / Н. А. Ахраменко, Л. М. Булавко // Весці БДПУ. Сер. 3. – 2006. – № 2. – С. 5–7.
8. Ахраменко, Н. А. Закон сохранения энергии и электрическое поле сферы / Н. А. Ахраменко, Л. М. Булавко, В. Я. Матюшенко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2006. – Вып. XIV. – С. 95–97.
9. Ахраменко, Н. А. К определению индукции магнитного поля поверхностных токов / Н. А. Ахраменко, Л. М. Булавко, В. Я. Матюшенко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 88–91.

УДК 539.376

Н. Е. Стеликов, доцент

ПРИМЕНЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПОЛЗУЧЕСТИ ПРИ КРУЧЕНИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

We have developed a kinetic theory of torsion creep on the basis of simulation of tangent tensions distribution along the section in time dimension.

Введение. В работах [1, 2] изложены основы кинетической теории ползучести твердых тел при осевом растяжении, где предполагается равномерное распределение макроскопических напряжений нормальных сечений с соответствующим перераспределением на межатомные связи. В настоящей работе ставится задача по привязке теории к сдвигу, когда макроскопические касательные напряжения образуют треугольную эпюру распределения в радиальном направлении.

Основная часть. С позиций кинетической концепции прочности, которая связывает процессы, происходящие на микроуровне в нагруженных телах, с силами межатомного взаимодействия, ползучесть при растяжении и кручении является следствием этих процессов, т. е. имеет одну природу и должна подчиняться одним закономерностям. Запишем в соответствии с [1, 2] уравнение ползучести для деформации ε, которая при кручении рассматривается как угол закручивания:

$$t = \tau_0 \left(\ln \frac{\delta}{\varepsilon} \right) \exp \frac{U_0 - \gamma \delta \sigma_0 / \varepsilon}{k_{\text{B}} T}, \qquad (1)$$

где t – время, необходимое на изменение величины деформации образца при кручении от нуля до некоторого значения ε; τ_0 – величина, которая по порядку совпадает с периодом колебаний атомов в решетке (~10^{-13}); δ – предельная величина деформации образца, т. е. угла закручивания при котором тело теряет сплошность; U_0 – энергетический параметр процесса ползучести; γ – структурно-чувствительный коэффициент, имеющий размерность объема; σ_0 – величина начального касательного напряжения, созданного в начальный момент времени; k_{B} – постоянная Больцмана; T – температура образца.

Применим кинетическую теорию ползучести к описанию процесса кручения цилиндрических образцов круглого сечения. На рис. 1 сплошными линиями показаны экспериментальные данные по ползучести нейлона при кручении [3]. В опытах определялся угол закручивания круглых цилиндрических образцов на базе 101,6 мм при температуре 298 К. Касательные напряжения в соответствии с нумерацией кривых составляют, МПа: 2,1; 4,2; 6,3; 8,4; 10,5; 12,6. Штриховыми линиями на рис. 1 показаны расчетные кривые ползучести, полученные по теоретической формуле (1) с подстановкой вместо значения деформации ε угла закручивания α при следующих значениях параметров: U_0 = 131,31 кДж/моль; γ = 0,718 кДж/(моль · МПа); δ = 100 град.

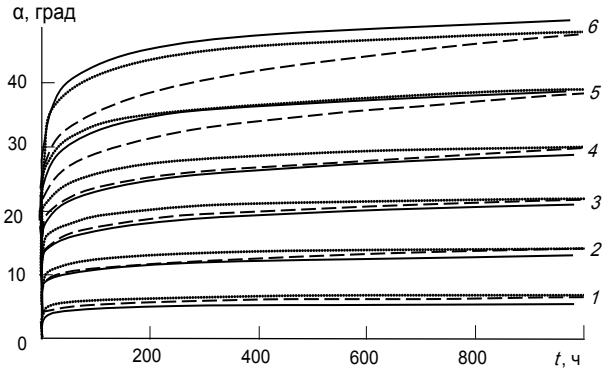


Рис. 1. Кривые ползучести нейлона при кручении

Анализируя результативность применяемой кинетической теории, в первую очередь, отметим удовлетворительное соответствие теоретических и экспериментальных кривых, а также соответствующее повышение деформаций при кручении в зависимости от касательных напряжений. Во-вторых, проведем анализ энергетического параметра U_0, который будем рассматривать как величину энергии активации процесса ползучести при кручении. Рассматривая ползучесть как результат процесса самодиффузии, связанный с выходом атомов из одного положения равновесия и переходом в другое положение, мы можем ожидать, что величина энергии активации этого процесса будет сопоставима с величинами энергии активации других (аналогичных) процессов. В частности, в случае полимеров таким процессом может быть процесс термической деструкции, при которой выход атомов из положения равновесия вызывается температурой. По данным работы [4], значение энергии активации термической деструкции нейлона с молекулярным весом порядка 30 000 составляет 27 ккал/моль (113 кДж/моль), а для нейлона с молекулярным весом порядка 60 000 энергия активации равна 34 ккал/моль (142 кДж/моль). Очевидно, что используемая кинетическая теория дает приемлемое значение энергии активации ползучести, так как его значение совпадает с экспериментально определенными пределами для этой величины. Это подтверждает предположение

об одинаковости сравниваемых процессов, которые происходят на микроуровне в полимерных образцах, разрушаемых механическим или термическим путем. Близость значений энергии активации U_0, полученных разными путями, может служить также хорошим аргументом в пользу состоятельности развиваемой кинетической теории.

Дальнейшее развитие кинетической теории может быть связано с улучшением степени совпадения теоретических и экспериментальных кривых. Анализ соответствия теоретических и экспериментальных кривых, приведенных на рис. 1, показывает разницу в скорости роста деформаций ползучести, особенно в начальный период после приложения нагрузки. Объяснение такого поведения материала при кручении может быть связано с тем, что касательные напряжения распределяются по сечению образца неравномерно, например, по треугольной эпюре. Учтем, что в процессе ползучести происходит перераспределение напряжений с разрушенных межатомных связей на неразрушенные. Это меняет картину распределения напряжений по сечению образца и, следовательно, скорость роста деформаций. На такое перераспределение напряжений уже обращалось внимание в работе [3], где качественно показано изменение распределения напряжений и переход от линейной закономерности распределения напряжений к нелинейной.

Мы предлагаем модель ползучести при кручении образца с учетом перераспределения напряжений по сечению за счет разрушения более напряженных связей и нагружения менее напряженных, но более многочисленных межатомных связей при постоянной величине крутящего момента. На рис. 2 показана схема изменения распределения касательных напряжений по круглому сечению радиусом r в процессе ползучести, принятая в данной модели.

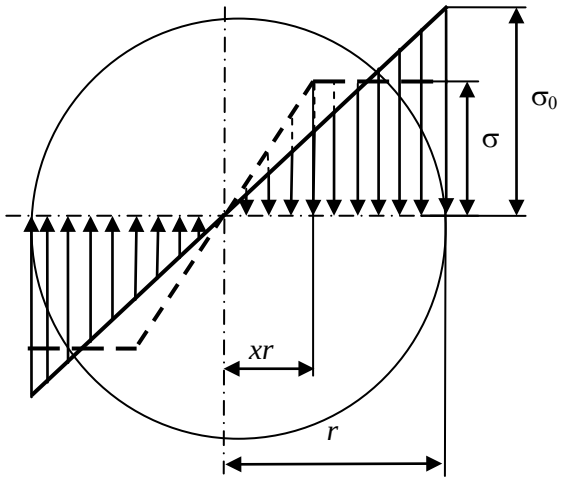


Рис. 2. Схема изменения распределения касательных напряжений при кручении в процессе ползучести

Первоначально эпюра напряжений имеет треугольный вид с максимальным значением σ_0. Далее, по мере деформирования образца, идет уменьшение значений касательных напряжений и их выравнивание по сечению. Штриховыми линиями показана промежуточная эпюра распределения касательных напряжений, когда внешняя часть сечения образца нагружена равномерно распределенными, а внутренняя часть − линейными по радиусу. Отношение размера внутренней части к радиусу r равно x. Учтем, что при треугольном распределении напряжений крутящий момент равен $\sigma\pi r^3/2$, а при прямоугольном распределении − $2\sigma\pi r^3/3$ [5]. Тогда для случая, когда на внутренней части круглого сечения радиусом xr напряжения распределены по треугольнику, а на внешней оставшейся части − по прямоугольнику, крутящий момент запишется в следующем виде:

$$M_k = \frac{2}{3}\sigma\pi r^3 - \frac{2}{3}\sigma\pi x^3 r^3 + \frac{1}{2}\sigma\pi x^3 r^3 = \\ = \sigma\pi r^3\left(\frac{2}{3} - \frac{1}{6}x^3\right). \qquad (2)$$

Принимая M_k = const, обозначив начальные напряжения при треугольной эпюре распределения касательных напряжений через σ_0, получим зависимость текущих максимальных напряжений

$$\sigma = \frac{3\sigma_0}{4 - x^3}. \qquad (3)$$

Значение x^3 меняется от единицы в начале нагружения до нуля, когда напряжения выравниваются по сечению. Такому изменению величины x соответствует эмпирическая зависимость от времени в виде $x^3 = \exp - \mu t$, которую мы вводим в расчет, записав формулу (1) в виде

$$t = \tau_0 \ln\left(\frac{\delta}{\alpha}\right)\exp\frac{U_0 - 3\gamma\delta\sigma_0/\alpha\left(4 - \exp - \mu t\right)}{k_B T}. \qquad (4)$$

На рис. 1 точечными линиями показаны кривые ползучести, рассчитанные по формуле (4) с использованием параметров U_0 и δ, по которым построены штриховые кривые на рис. 1, и по параметрам γ = 0,85 кДж/(моль · МПа) и $\mu = 1,5 \cdot 10^{-7}$ с$^{-1}$. Очевидным является то, что введение коэффициента μ позволило приблизить теоретические кривые ползучести к экспериментальным, но самое важное − правильно отразить изменение скорости нарастания деформации ползучести во времени, что наглядно демонстрируется на рис. 1 почти идеальной параллельностью теоретических и экспериментальных кривых. Все это может говорить о состоятельности принятой модели изменения касательных напряжений при

кручении в процессе ползучести и возможности применения формулы (4) для соответствующих расчетов.

Заключение. Таким образом, в работе развит кинетический подход к ползучести при кручении в условиях неравномерного распределения касательных напряжений на микроуровне расчетного сечения с учетом изменения характера этого распределения во времени. В итоге получено новое уравнение ползучести для условий кручения. Результатами расчетов с использованием полученной зависимости и сравнения их с экспериментальными данными, полученными независимыми исследованиями, подтверждена правильность принятой модели изменения эпюры распределения касательных напряжений в процессе ползучести цилиндрического образца, подверженного воздействию постоянным крутящим моментом.

Сравнение значений энергии активации при ползучести, полученных в результате расчетов по исследуемой зависимости, с аналогичными данными, полученными для условий термической деструкции, показывает их соответствие, что доказывает одинаковую природу этих процессов.

Результативность работы во многом обеспечена тем, что развитие кинетической теории велось на основе классических подходов, выработанных в механике деформируемого твердого тела. Очевидно, что такая связь позволяет не только совершенствовать кинетическую теорию, но и направлять ее в апробированное русло. Кроме этого, такая связь выводит на новые задачи, например, такую как выявление природы коэффициента μ в уравнении (4) и выражение этого коэффициента через параметры, отражающие силы межатомного взаимодействия.

Разрабатываемая кинетическая теория, позволяющая с хорошим приближением описывать экспериментальные данные, направлена на проектирование реальных конструкций, особенно машиностроительных, где кручение как вид напряженного состояния деталей имеет широкое распространение.

Литература

1. Стеликов, Н. Е. Кинетика деформирования и разрушения твердых тел при ползучести / Н. Е. Стеликов // Весці НАН Белар уіс Сер . фіз.-тэхн. навук. – 2004. – № 3. – С. 60–63.

2. Стеликов, Н. Е. Кинетическая теория ползучести: монография / Н. Е. Стеликов. – Горки: Ред.-изд. отдел БГСХА, 2006. – 104 с.

3. Макклинток, Ф. Деформация и разрушение материалов / Ф. Макклинток, А. Аргон. – М.: Мир, 1970. – 444 с.

4. Мадорский, С. Термическое разложение органических полимеров / С. Мадорский. – М.: Мир, 1967. – 326 с.

5. Сопротивление материалов / А. Ф. Смирнов [и др.]; под ред. А. Ф. Смирнова. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1975. – 480 с.

УДК 537.534:539.23

О. Г. Бобрович, доцент; И. С. Ташлыков, профессор (БГПУ)

СТРУКТУРА МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩЕГО (Mo, W) ПОКРЫТИЯ, ОСАЖДЕННОГО НА ГРАФИТ В УСЛОВИЯХ ИОННОГО АССИСТИРОВАНИЯ

Analysis of chemical bonds, element composition and depth distribution of component in coating formed by self ion-assisted deposition of metal (Mo, W) onto graphite using a method in which the metal deposition was accompanied by bombardment Mo^+ or W^+ ions is reported. Analysis was carried out using Rutherford back scattering and X-ray photoelectric spectroscopy methods. Elemental analysis of the coatings on graphite shows a high content of carbon, oxygen and of the silicon. The findings have allowed to determine the presence of metal Mo, W, Mo and W oxide fractions.

Введение. Для производства функциональных покрытий в современной технологии широко используются ионно-лучевые методы осаждения тонких покрытий на различные материалы и изделия. Ионное воздействие, сопровождающее осаждение покрытия, на состав и структуру модифицируемого образца обусловлено комплексом физических процессов, включающих взаимодействие налетающих ионов с мишенью, атомное перемешивание, радиационно-стимулированную диффузию элементов покрытия и материала подложки [1, 2].

Основная часть. Целью работы являлось установление элементного состава покрытия, распределения элементов в покрытии и их химической связи при формировании структуры покрытие – подложка в системах Mo – графит и W – графит, создаваемых нанесением металлсодержащего (Mo, W) покрытия в условиях ассистирования ионами Mo^+ или W^+ соответственно.

Для реализации этого метода осаждения покрытия используется ионный источник, создающий плазму вакуумного электродугового разряда, в которой одновременно генерируются положительные ионы и нейтральная фракция из материала электродов источника ионов. Ионно-ассистированное нанесение металлсодержащих покрытий на основе молибдена или вольфрама осуществлялось в разных опытах при ускоряющем напряжении U от 7 до 20 кВ. В рабочей камере в процессе создания покрытий поддерживался вакуум $\sim 1 \cdot 10^{-2}$ Па.

Элементный состав поверхности образцов графита, модифицированных ионно-ассистированным осаждением металлсодержащего покрытия, распределение элементов в покрытии и их химические связи изучены с применением методов резерфордовского обратного рассеяния (РОР) ионов гелия [3] и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) [4]. Спектры РФЭС снимали на электронном спектрометре LHS-10 («Leybold» WG) с использованием MgK_α-излучения. Спектры РОР ионов гелия с энергией E_0 = 1,5 МэВ снимали в условиях геометрии рассеяния $\theta_1 = 50°$, $\theta_2 = 70°$, $\theta = 160°$. В качестве маркера для определения точного значения энергетической линии на спектре РФЭС использовался сигнал Au_{4f}, а послойный анализ образцов проводился с помощью травления ионами Ar^+ с энергией 3 кэВ со скоростью 0,5–1,0 нм/мин.

Композиционный состав исходного образца графита, полученный компьютерным моделированием спектра РОР, соответствует формуле $C_{97,4}O_{2,0}Si_{0,6}$.

На рис. 1 показаны экспериментальные спектры РОР ионов гелия от образцов графита, модифицированных нанесением W в условиях ассистирования ионами W^+. Анализ энергетических спектров ионов гелия от модифицированных образцов графита позволяет идентифицировать наличие в них, кроме атомов металла, также атомов кислорода и кремния. Искажение формы спектра РОР ионов гелия в области 50–60 каналов (рис. 1) со стороны поверхности может быть связано как с ростом металлсодержащего покрытия, так и с одновременным осаждением атомов углерода на образец графита.

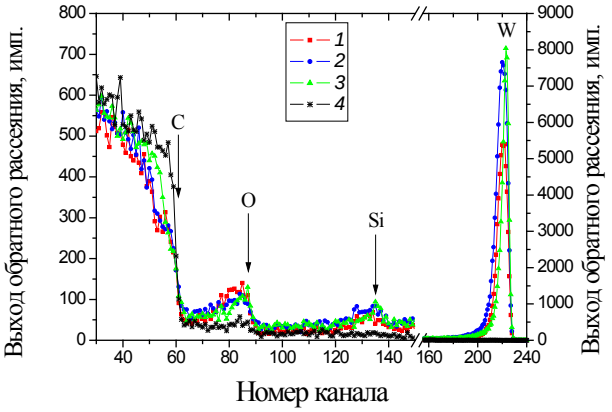


Рис. 1. Спектры РОР ионов гелия с E_0 = 1,5 МэВ от образцов графита, модифицированных нанесением W в условиях ассистирования ионами W^+ при ускоряющем напряжении: *1* – 7 кВ; *2* – 15 кВ; *3* – 20 кВ; *4* – спектр от исходного образца графита

Различие в спектрах РОР отражает факт осаждения на образцы графита более толстого металлсодержащего покрытия тогда, когда используется наименьшее (7 кВ) ускоряющее напряжение. Аналогичная зависимость наблюдается на спектрах РОР для системы W – графит.

Толщина покрытия определяется соотношением потока ионов $J_и$ к потоку осажденных атомов $J_а$ ($J_и$ / $J_а$), которое в наших экспериментах было меньше единицы, что соответствовало режиму роста тонкой пленки [5] и составляло от $J_и$ / $J_а$ = 0,08 при U = 7 кВ до $J_и$ / $J_а$ = 0,61 при U = 20 кВ. Рассчитанные скорости осаждения тонких металлсодержащих покрытий составляли от 0,2 до 0,4 нм/мин в разных опытах для систем Mo – графит и W – графит.

Методом РФЭС подтверждены сведения об элементном составе (рис. 2) поверхностных слоев систем Mo – графит и W – графит, полученные с помощью метода РОР. Данные метода РФЭС свидетельствуют о том, что по основным компонентам элементный состав, идентифицируемый этим методом, качественно согласуется с данными, полученными в независимых опытах с применением резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия.

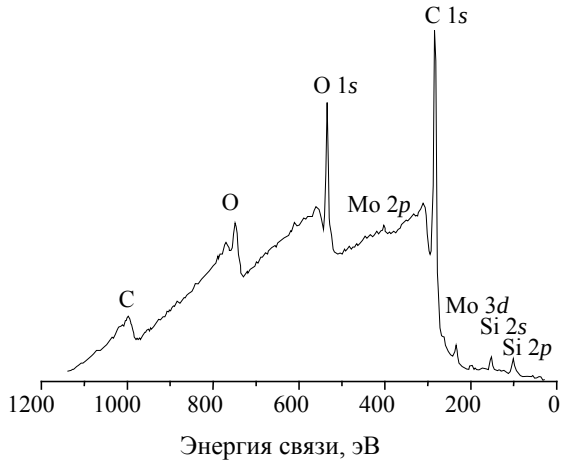


Рис. 2. Спектр (РФЭС) от образца графита, модифицированного нанесением Mo в условиях ассистирования ионами Mo^+ при ускоряющем напряжении 15 кВ

Наличие в покрытии углерода и кислорода обусловлено конструктивными особенностями используемого резонансного ионного источника вакуумной электродуговой плазмы. В плазме присутствуют ионы газов, которые адсорбированы на поверхности электродов, а также в остаточном вакууме паромасляного диффузионного насоса. Наличие атомов кремния в покрытии объясняется встречной диффузией атомов подложки в осаждаемое покрытие в условиях ионного ассистирования. Для подтверждения присутствия атомов кремния в покрытии как результата встречной диффузии на рис. 3 приводятся спектры РОР ионов гелия от образцов бериллия, которые находились в вакуумной камере одновременно с модифицируемыми образцами графита.

Канал и соответствующая ему энергия, где должен находиться сигнал от кремния, отмечен стрелкой. Поскольку сигнал от Si отсутствует, то это подтверждает, что кремний входит в покрытие в результате встречной диффузии, а не вследствие осаждения при нанесении металлсодержащего покрытия. Подобная встречная диффузия серы на поверхность из объема резины наблюдалась авторами [6] при осаждении металлсодержащих покрытий на эластомер.

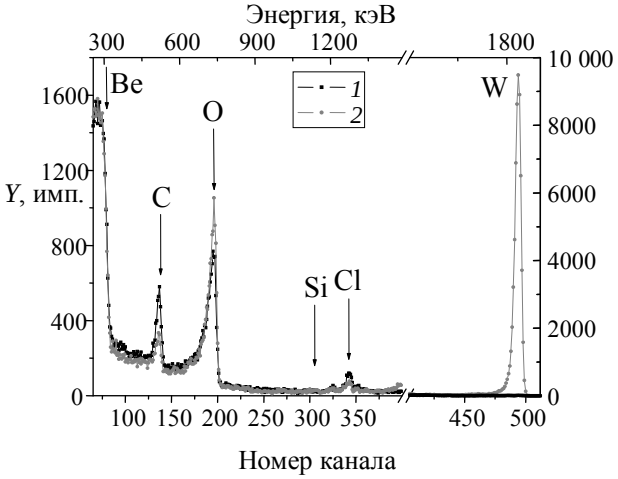


Рис. 3. Энергетические спектры ионов гелия с E_0 = 2 МэВ, обратно рассеянных (θ_1 = 0°, θ_2 = 15°, θ = 165°) от исходного образца бериллия (спектр *1*) и от образца бериллия, модифицированного нанесением W в условиях ассистирования ионами W^+ при ускоряющем напряжении 20 кВ (спектр *2*)

По спектрам РФЭС, снятым на глубинах ~12,5; ~22,5; ~42,5 нм, от модифицированных образцов при послойном их травлении определили элементный состав поверхностных слоев образцов графита, модифицированных нанесением Mo в условиях ассистирования ионами Mo^+ при ускоряющем напряжении 15 кВ. С увеличением времени травления происходит изменение интенсивности сигнала от элементов, который определяется его концентрацией. В таблице представлены результаты элементного состава по глубине модифицированных образцов. По всей толщине исследуемого слоя идентифицируется присутствие наносимого молибдена, технологических примесей углерода и кислорода, а также кремния.

Для идентификации химических связей изучалась тонкая структура спектров РФЭС в области энергетических уровней C_{1s}, O_{1s}, Mo_{3d}, W_{4f}. Тонкая структура спектра C 1*s* свидетельствует о том, что углерод на исследуемых глубинах находится в виде графитоподобного углерода ($E_{св}$ ~ 284,7 эВ).

Тонкая структура спектра Mo 3*d* говорит о том, что молибден на тех же глубинах находится как в виде Mo ($E_{св}$ ~ 228,6 эВ для Mo $3d_{5/2}$-уровня), так и в виде MoO_x (x ~ 2; $E_{св}$ ~ 229,5 эВ для MoO_2 $3d_{5/2}$-уровня). Соотношение Mo : MoO_2 в модифицированном слое графита составляет 60% : 40%.

Таблица

Элементный состав поверхностных слоев образца графита, модифицированного нанесением Mo в условиях ассистирования ионами Mo^+ при $U = 15$ кВ

Глубина, нм	Состав образца, ат. %			
	C	O	Mo	Si
0	81,3	13,1	0,6	5,0
~ 2,5	86,5	9,0	1,3	3,2
~12,5	86,5	8,4	1,9	3,2
~42,5	88,3	7,2	1,3	3,2

В работе [7] авторам удалось установить, что покрытия на основе W, осажденные на эластомер при использовании аналогичного метода, содержат, помимо металлического W, оксидов вольфрама, также карбид вольфрама WC, который нам идентифицировать не удалось.

Анализ спектров в областях O_{1s}, W_{4f} позволяет определить металлический вольфрам ($E_{св}$ ~ 3 06, эВ для W $4f_{7/2}$-уровня) и оксиды вольфрама WO_2, WO_3 ($E_{св}$ ~ 35,5 эВ, $E_{св}$ ~ 36,1 эВ для W $4f_{7/2}$-уровня).

Заключение. Независимыми взаимодополняющими методами РОР и РФЭС установлено, что в поверхностном слое исследуемых структур металлсодержащее покрытие – графит, наряду с осаждаемым металлом в условиях ассистирования ионами того же металла, содержатся углерод, кислород и кремний. Наличие этих элементов в покрытии обусловлено спецификой осаждения металлсодержащего покрытия из резонансного источника вакуумной электродуговой плазмы, внедрением элементов остаточных газов в мишенной камере, а также диффузией сопутствующей примеси кремния из графита в покрытие в результате радиационного ассистирования нанесению тонких пленок на графит.

Результаты анализа тонкой структуры спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показали, что в системе Mo – графит молибден находится как в виде металлического молибдена, так и виде оксида MoO_2, а в системе W – графит анализ спектров дал возможность определить металлический вольфрам и оксиды вольфрама WO_2, WO_3.

Послойное ионное травление модифицированных образцов графита, модифицированных нанесением Mo в условиях ассистирования ионами Mo^+, позволило на разных глубинах установить элементный состав поверхностных слоев и оценить количественное соотношение между Mo и MoO_2, которое по всей исследуемой глубине практически не изменяется.

Литература

1. Бобрович, О. Г. Структура и состав покрытий на основе Zr, осажденных на кремний при ионном ассистировании в условиях саморадиации / О. Г. Бобрович, И. С. Ташлыков // Физика и химия обработки материалов. – 2002. – № 5. – С. 40–43.

2. Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции / под ред. Дж. Поута, К. Ту, Дж. Мейера. – М.: Мир, 1982. – 576 с.

3. Комаров, Ф. Ф. Неразрушающий анализ поверхностей твердых тел ионными пучками / Ф. Ф. Комаров, М. А. Кумахов, И. С. Ташлыков. – Минск: Университетское, 1987. – 256 с.

4. Нефедов, В. И. Рентгеноэлектронная и фотоэлектронная спектроскопия. – М.: Химия, 1984. – 256 с.

5. Бобрович, О. Г. Формирование на графите металлсодержащих покрытий в условиях ионного ассистирования / О. Г. Бобрович, И. С. Ташлыков // Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы 5-й Междунар. конф., Минск, 6–9 окт. 2003 г. / БГУ. – Минск, 2003. – С. 326–328.

6. Ташлыков, И. С. Влияние состава межфазной области на адгезионную устойчивость покрытий, осажденных на резину в условиях радиационного ассистирования / И. С. Ташлыков, А. В. Касперович, А. А. Ситнов // Физика и химия обработки материалов. – 2000. – № 5. – С. 50–53.

7. Тульев, В. В. Исследование структуры и химических связей в покрытиях на основе W, полученных на эластомере методом ионно-ассистированного осаждения / В. В. Тульев, О. Г. Верес, И. С. Ташлыков // Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы 7-й Междунар. конф., Минск, 26–28 сент. 2007 г. / БГУ. – Минск, 2007. – С. 338–340.

УДК 539.1.06:539.23.234

В. В. Тульев, доцент

ЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВ И МИКРОТВЕРДОСТЬ СТРУКТУР Mo – W/Al, Ti – Mo – W/Al, СФОРМИРОВАННЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫМ ОСАЖДЕНИЕМ ПОКРЫТИЙ

Mo – W- and Ti – Mo – W-based films were deposited on aluminum using ion assisted deposition technique in conjunction with self irradiation. Rutherford back scattering and computer simulation RUMP code were applied to investigate the composition of the modified aluminum surface. It is determined that coatings include base-metal, oxygen, carbon and aluminum. Reasons of the complex coating composition creation and of change in microhardness on aluminum are discussed.

Введение. В данной работе приведены экспериментальные результаты изучения элементного состава и микротвердости структур Me/Al, где в качестве материалов основы покрытий были выбраны Ti, Mo и W. Многокомпонентные структуры Mo – W/Al и Ti – Mo – W/Al получали последовательным нанесением покрытий на основе Ti, Mo, W. Покрытия наносились методом ионно-ассистированного осаждения [1–3]. Ускоряющая разность потенциалов при осаждении покрытий составляла 7 кВ. Причем на образцы сначала осаждалось покрытие, содержащее вольфрам, потом покрытие, содержащее молибден, и последним осаждалось покрытие на основе титана. Осаждение покрытий проводилось в таком порядке, чтобы минимизировать распыление уже модифицированной поверхности образца, так как коэффициенты распыления алюминия при облучении ионами Ti^+, Mo^+, W^+ при ускоряющей разности потенциалов 7 кВ составляют 1,8; 3; 4 соответственно [4]. Плотность ионного тока достигала 2–3 мкА/см^2. Интегральный поток ассистирующих ионов для каждого слоя составлял ~$7 \cdot 10^{15}$ ион/см^2, чтобы суммарный интегральный поток был ~$2 \cdot 10^{16}$ ион/см^2. Осаждение покрытий происходило при вакууме в мишенной камере (~10^{-2} Па). Измерение микротвердости образцов осуществлялось на приборе ПМТ-3. Испытание производилось путем вдавливания в поверхность образца алмазной четырехгранной пирамиды с углами при вершине 136°. Нагрузка на индентор менялась в интервале от 0,1 до 0,5 Н, что соответствовало изменению глубины проникновения индентора от (1,8 ± 0,2) до (8,9 ± 0,5) мкм.

Основная часть. Изучение элементного состава модифицированных структур проводилось методом резерфордовского обратного рассеяния (РОР) ионов гелия. Параметры метода РОР при исследовании структур Mo – W/Al и Ti – Mo – W/Al представлены в табл. 1. На основе данного метода был определен композиционный состав покрытий, рассчитаны слоевые концентрации элементов покрытий. Распределение компонентов по глубине в анализируемых приповерхностных слоях строились на основе данных РОР с использованием компьютерного моделирования [5].

Анализ спектров РОР ионов гелия от сформированных структур (рис. 1) свидетельствует о наличии сопутствующих технологических примесей углерода и кислорода в формируемых структурах. Источником их являются остаточные газы в мишенной камере и летучая фракция углеводорода вакуумного масла паромасляного насоса [6, 7].

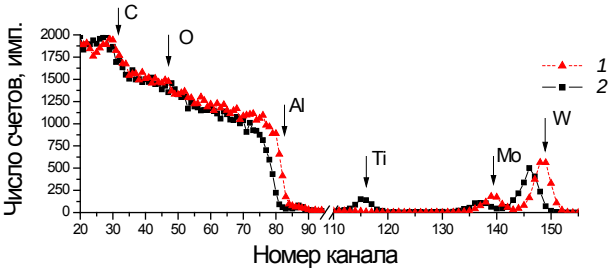


Рис. 1. Спектры РОР ионов гелия от алюминия после последовательного ионно-ассистированного осаждения покрытий: *1* – на основе W и Mo; *2* – на основе W, Mo и Ti

Также следует отметить образование ступеньки в сигнале от алюминия в области 80–90 каналов (рис. 1). Этот факт говорит о наличии атомов алюминия в осажденном покрытии, т. е. о существовании встречной диффузии атомов подложки алюминия в осаждаемое покрытие.

Таблица 1

Энергия ионов гелия E_0, геометрия рассеяния (угол рассеяния θ, угол влета θ_1, угол вылета θ_2 рассеянных ионов), энергетическое разрешение детектирующей системы $\Delta E_{дет}$, глубинное разрешение $\Delta t_{дет}$, максимальная глубина анализа t_{max} и относительная погрешность при определении содержания рассеивающих атомов ε

Исследуемая структура	Геометрия рассеяния, град			E_0, МэВ	$\Delta E_{дет}$, кэВ	$\Delta t_{дет}$, нм	t_{max}, нм	ε, %
	θ	θ_1	θ_2					
Mo – W/Al, Ti – Mo – W/Al	160	50	70	1,5	15	14,0	400	5

Одной из причин встречной диффузии может быть радиационно-индуцированная сегрегация, так как для небольших глубин внешняя поверхность образца служит основным стоком для дефектов и атомов [8]. Многокомпонентные структуры Ti – Mo – W/Al и Mo – W/Al (рис. 2) характеризуются концентрациями атомов Ti, Mo, W ~5 ат. % в слое порядка ~50 нм, углерода – 60–70 ат. % и кислорода – 15–20 ат. %, а также алюминия – 6–8 ат. %. Анализируя распределения компонентов по глубине, приведенные на рис. 2, отметим образование в приповерхностных слоях модифицированного образца (~50–70 нм) многокомпонентной структуры на основе Mo, W (рис. 2, *а*) и Ti, Mo и W (рис. 2, *б*), несмотря на то, что слои наносились последовательно. Формирование многокомпонентной структуры свидетельствует о протекании во время осаждения тонких пленок процессов перемешивания компонентов покрытий, процессов диффузии компонентов в глубь подложки и процессов встречной диффузии не только алюминия из подложки, но и атомов из ранее нанесенных покрытий. Наибольшая глубина проникновения в алюминиевую подложку характерна для вольфрама и уменьшается для молибдена и далее для титана. Это соответствует очередности нанесения слоев на алюминий.

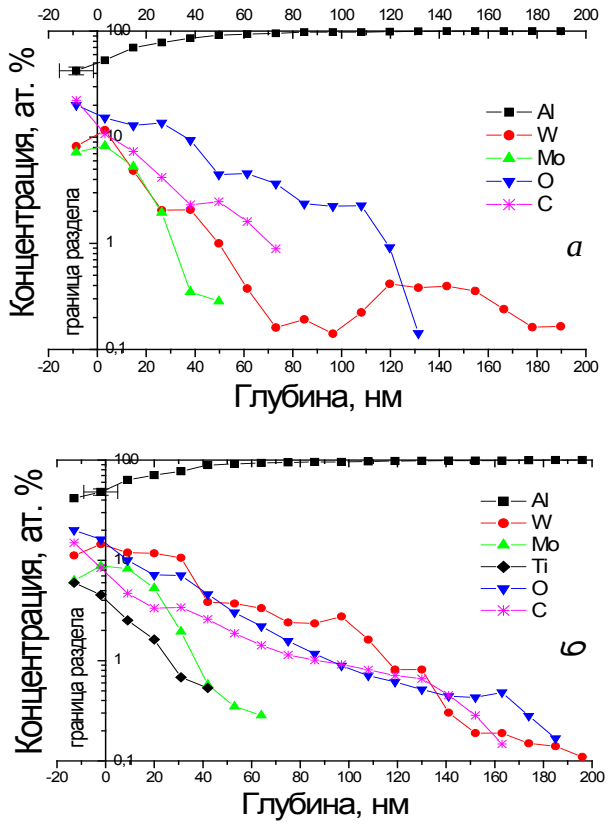


Рис. 2. Профили распределения компонентов по глубине в алюминии после последовательного ионно-ассистированного осаждения покрытий:
а – на основе W и Mo; *б* – на основе W, Mo и Ti

Данный характер распределения атомов основы покрытия может быть обусловлен следующими причинами. Во-первых, ионы металлов основы следующего покрытия испытывают дополнительное торможение в ранее нанесенном покрытии, что приводит к смещению профиля распределения данного металла ближе к поверхности формируемой структуры [6]. Во-вторых, вследствие возбуждения системы при ассистировании осаждающегося покрытия происходит радиационно-стимулированная диффузия в глубь образца не только атомов основы наносимого покрытия, но и атомов уже нанесенного покрытия [6].

На основе экспериментально установленных значений микротвердости поверхности для различных глубин проникновения индентора для структур Al, W – Mo/Al, W – Mo – Ti/Al были построены графики изменения микротвердости приповерхностных слоев в зависимости от глубины проникновения индентора (рис. 3).

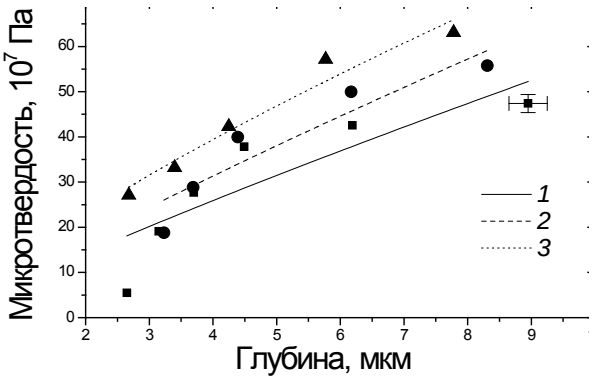


Рис. 3. Зависимость микротвердости от глубины внедрения индентора:
1 – исходный алюминий;
2 – структура W – Mo/Al; *3* – W – Mo – Ti/Al

Как следует из хода кривых на рис. 3, микротвердость модифицированных алюминиевых образцов увеличилась по сравнению с микротвердостью исходных образцов. При этом микротвердость образцов, на которые последовательно осаждались слои на основе W, Mo, Ti, оказались выше микротвердости образцов с осажденными слоями W, Mo. Из приведенных экспериментальных данных следует, что осаждение пленок на алюминий существенно влияет на микротвердость поверхности модифицированных образцов, хотя их толщина мала (от 5 до 40 нм) по сравнению с глубиной проникновения индентора (2–9 мкм). По графикам на рис. 3 были определены значения относительного изменения микротвердости модифицированного образца по сравнению с микротвердостью исходного образца $\Delta H / H_{исх}$ при одинаковой глубине проникновения индентора. Для иллюстрации обнаруженных эффектов изменения микротвердости поверхности модифицированных образцов

при различном составе осажденных покрытий и подложки в табл. 2 приведены данные относительного изменения микротвердости исследованных образцов на глубине внедрения (5,0 ± 0,3) мкм.

Таблица 2

Относительное изменение микротвердости для структур W – Mo/Al и W – Mo – Ti/Al

Образец	W – Mo/Al	W – Mo – Ti/Al
$\Delta H / H_{исх}$	+0,10	+0,25

Эффект упрочнения поверхности алюминиевых образцов при ионно-ассистированном осаждении покрытий на основе W, Mo и Ti мы связываем с упрочнением, аналогичным упрочнению при пластических деформациях [9]. Введение в приповерхностные слои алюминия легирующей примеси W, Mo и Ti, которые в нем нерастворимы [10], их дальнейшая радиационно-стимулированная диффузия в глубь образца, а также формирование в приповерхностных слоях структурных радиационных дефектов и включений силицидов, карбидов и оксидов в процессе осаждения покрытий приводят к возникновению упругих напряжений в приповерхностных областях образцов. Эти напряжения инициируют скольжение дислокаций, что вызывает возрастание плотности дислокаций, а это в свою очередь приводит к упрочнению образца [9].

Заключение. При последовательном нанесении тонких пленок на основе Ti, Mo и W на алюминий методом ИАНПУС при энергии ассистирующих ионов 7 кэВ и суммарном интегральном потоке $2 \cdot 10^{17}$ ион/см^2 формируются многокомпонентные структуры, в состав которых входят атомы основы покрытия Ti, Mo и W, атомы сопутствующих примесей C и O, а также атомы подложки Al. При этом экспериментально установлено, что существует встречная диффузия атомов алюминия, молибдена и вольфрама в покрытие. Причиной встречной диффузии может быть радиационно-индуцированная сегрегация в сочетании с атомным перемешиванием при ассистировании осаждающегося покрытия. Так же существуют процессы радиационно-стимулированной диффузии Ti, Mo, W и сопутствующих примесей C и O в глубь образца.

Для структур, полученных осаждением тонких слоев W – Mo, W – Mo – Ti на алюминий, наблюдается увеличение микротвердости. Причинами наблюдаемого упрочнения являются введение в алюминий нерастворимых элементов, формирование в приповерхностных слоях структурных радиационных дефектов и включений силицидов, карбидов и оксидов. При этом в формируемых структурах возникают упругие напряжения, которые обусловливают упрочнение, аналогичное упрочнению при пластических деформациях.

Литература

1. Metal v apour v acuum a rc s ource i on implantation a s a s urface tr eatment t echnique f or industrial tool bits / W. L. Lin [et al.] // Surf. Coat. Technol. – 1992. – Vol. 51. – P. 534–539.
2. Esinger, W . Low e nergy i on assist d uring deposition – an effective tol for controlling thin film microstructure / W. Esinger // N ucl. I nstr. M eth. Phys. Res. – 1997. – Vol. B127–128. – P. 796–808.
3. Тульев, В. В. Изучение состава приповерхностных слоев алюминия при ионно-ассистированном нанесении Mo, W покрытий / В. В. Тульев, В. С. Куликаускас, И. С. Ташлыков // Поверхность. Физика, химия, механика. – 1995. – № 9. – С. 45–49.
4. Energy de pendence o f the yi elds o f i on-induced s puttering of monatomic s olids / N. Matsunami [et al.] // Japan: I nstitute of Plasma Physic – AM. – 1983. – № 32. – P. 1–284.
5. Saarilahti, J. Interactive personal-computer data a nalysis of i on ba ckscattering s pectra / J. Saarilahti, E. Rauhala // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. – 1992. – Vol. B 64. – P. 734–738.
6. Структурно-фазовые изменения в алюминии при последовательной имплантации ионов углерода и азота / В. В. Углов [и др.] // Физика и химия обработки материалов. – 2000. – № 2. – С. 12–16.
7. Ohira, S. Formation of AlN by ni trogen molecule ion implantation / S. Ohira, M. Iwaki // N ucl. Instr. Meth. Phys. Res. – 1987. – Vol. B 19–20. – P. 162–166.
8. Комаров, Ф. Ф. Ионная имплантация в металлы / Ф. Ф. Комаров. – М.: Металлургия, 1990. – 216 с.
9. Гуляев, А. П. Металловедение: учеб. для вузов / А. П. Гуляев. – М.: Металлургия, 1986. – 544 с.
10. Шанк, Ф. А. Структуры двойных сплавов / Ф. А. Шанк. – М.: Металлургия, 1973. – 760 с.

УДК 66.011-52

Ю. А. Байда, ассистент

АНАЛИЗ РЕЗИНОСМЕСИТЕЛЯ КАК ОБЪЕКТА УПРАВЛЕНИЯ

In the article discuss methods of a control of a rubber mixer. Main parameters of process have been revealed, the interrelation between them in a general view is certain. Parameters accessible to measurement and parameters accessible to regulation are certain. Structures of observers of the important process parameters inaccessible to measurement are offered. Possible control channels and levels are analyzed. Criterions and limitations of the control system are offered. The structure of the control system in a general view is synthesized. The step-by-step adaptation system is offered.

Введение. Изготовление резиновых смесей является одним из основных процессов резинового производства и оказывает существенное влияние на качество изделий.

Процесс резиносмешения – сложный механохимический процесс, в котором механические процессы диспергирования, гомогенизации происходят совместно с тепловыми и химическими явлениями. Ввиду большого различия в физических свойствах исходных компонентов резиновой смеси, широких вариаций количественного их соотношения и порядка введения в камеру резиносмесителя число возможных положений компонентов в рабочем пространстве машины очень велико. Это вызывает сложность аналитического определения усилий, возникающих в камере резиносмесителя при приготовлении резиновых смесей [1]. Более того, в процессе приготовления резиновой смеси могут происходить фазовые превращения компонент, что в общем случае приводит не только к количественным, но и к качественным изменениям свойств самой смеси. В результате возникает необходимость для описания процессов, происходящих в смесителе, применять зависимости с переменной структурой.

Целью процесса резиносмешения является достижение такого распределения компонентов в смеси, которое обеспечивает однородность физических и химических свойств в любой точке резиновой смеси. Для характеристики свойств готовой смеси с достаточной точностью используют: однородность распределения компонентов по объему каучука, вязкость смеси, ее температуру и дисперсность частиц компонента.

Для количественного описания однородности опираются на статистический анализ. Он основан на сравнении генеральной дисперсии с фактическим значением среднеквадратичного отклонения концентраций диспергируемого вещества. (Численный критерий – индекс смешения.)

Наряду с выравниванием концентраций диспергируемой фазы смешение сопровождается ее измельчением. Конечные размеры частиц, как и равномерность распределения, определяют качество изделий. Существует понятие оптимальной степени диспергирования, превышение которой ухудшает характеристики материала.

Процесс смешения резиновой смеси можно представить как процесс ее деформирования, причем для большинства полимеров деформация при смешении может быть сведена к деформации сдвига. Каучук в процессе смешения можно отнести к группе псевдопластичных жидкостей, для которых уменьшается эффективная вязкость с увеличением скорости сдвига. Для математического описания деформации сдвига в настоящее время используются эмпирические зависимости [2].

Показателем степени гомогенности резиновой смеси может служить поверхность раздела фаз смешиваемых компонентов. Существует прямая зависимость поверхности раздела фаз от деформации сдвига. Однако в реальных смесителях, где имеют место многомерные течения, пользуются широким кругом обобщающих понятий (например, суммарной среднемассовой деформацией сдвига (ССДС)) [3].

Процесс резиносмешения сопровождается выделением теплоты, что приводит к увеличению температуры смеси. Температура определяет вязкость смеси, а также фазовые превращения, происходящие в ней. Превышение температурой некоторого критического значения может привести к необратимым химическим реакциям и к потере смесью требуемых свойств.

Выявление зависимостей между параметрами процесса. Для получения структуры системы регулирования необходимо выявить основные зависимости между параметрами процесса. На данном этапе достаточно выявить зависимости в общем виде. Представим их в виде нелинейных дифференциальных уравнений. Часть уравнений имеет переменную структуру, т. е. вид функции определяется фазовыми переходами, происходящими в смеси.

Взаимосвязь между параметрами процесса можно представить следующими уравнениями:

$$T = F_1^a(T_0,\ \omega,\ t,\ g,\ \mu), \qquad (1)$$

$$\mu = F_2^a(\omega,\ t,\ T,\ \mu_0), \qquad (2)$$

$$\gamma = F_3^a(\omega,\ n,\ t), \qquad (3)$$

$$J = F_4^a(\gamma,\ \mu,\ t), \quad (4)$$

$$a = F_5\ (T,\ \mu,\ t), \quad (5)$$

$$P = F_6\ (\mu,\ \omega,\ g,\ t), \quad (6)$$

$$n = F_7\ (\omega,\ t), \quad (7)$$

где T – температура смеси; a – показатель фазового состояния смеси, определяет вид зависимостей (1)–(4); T_0 – параметр (вектор параметров), характеризующий температуру исходных компонент смеси; ω – скорость вращения роторов смесителя; t – время смешения; g – сила давления на верхний затвор; μ – вязкость смеси; μ_0 – параметр (вектор параметров), характеризующий вязкость исходных компонент смеси; n – число оборотов роторов смесителя; J – показатель однородности смеси (например, индекс смешения); γ – показатель деформации сдвига (например, ССДС); P – мощность, развиваемая приводом смесителя.

Выявление и анализ параметров процесса, доступных регулированию. Можно выделить следующие параметры процесса резиносмешения, доступные регулированию: полное время смешения, моменты ввода соответствующих добавок, моменты и длительность подъема затвора, величина давления затвора (при наличии соответствующей системы регулирования), скорость вращения роторов (при наличии управляемого электропривода).

С ростом времени смешения происходит увеличение температуры смеси и уменьшение ее вязкости, а также до некоторой степени повышается однородность. Ввод добавок вызывает изменение зависимостей (1)–(4), т. е. приводит к качественным изменениям свойств смеси. Подъем затвора позволяет провернуть смесь без давления и переориентировать ее относительно смесительных роторов для увеличения эффективности дальнейшего смешения. Изменение силы давления на поршень дает возможность регулировать температуру смеси. При возрастании скорости вращения роторов смесителя увеличивается скорость нарастания температуры и уменьшается эффективная вязкость.

Выявление и анализ параметров процесса, доступных измерению. Температура смеси выступает важным параметром, который косвенно указывает на вязкость смеси и реакции, происходящие в ней. Следует отметить, что сигнал о температуре смеси поступает с существенным запаздыванием. Это объясняется невозможностью установки датчика непосредственно в камере смесителя, где происходит интенсивное движение высоковязкой среды. Однако существующие системы управления, например [4], используют вместо температуры смеси температуру корпуса смесителя с учетом теплового гистерезиса, при этом обеспечивается необходимая точность. Кроме того, температура является основным регулируемым параметром в данной системе.

Наиболее общим параметром, характеризующим степень воздействия резиносмесителя на смесь, является мощность, развиваемая электроприводом резиносмесителя. Существуют системы управления, в которых по затраченной мощности судят о степени смешения компонентов и по ее значению определяют момент завершения смешения [5].

Общим числом оборотов, которое совершает ротор смесителя, во многом определяется гомогенность смеси. Измерение суммарного числа оборотов ротора позволит говорить о качестве смеси во время смешения.

Частота вращения роторов смесителя определяет скорость изменения температуры и влияет на значение вязкости смеси. С другой стороны, регулируемый электропривод требует измерения частоты вращения для ее стабилизации.

Формирование критериев и ограничений системы управления процессом. Регулирование резиносмесителем в общем случае следует свести к определению момента окончания процесса смешения, при котором достигается требуемое качество смешения (однородность, вязкость, температура готовой смеси). В этом случае выполняется основной критерий – получение смеси данного качества.

Отдельным критерием системы регулирования следует отметить затраты электроэнергии. Процессы изготовления резиновых смесей связаны со значительными затратами энергии. Доля затрат на смешение компонентов резиновых смесей в общих затратах на изготовление шин составляет 10–20%, причем из них 30–60% затраты на энергию [2]. Очевидно, одна из целей системы управления – минимизация затрат электроэнергии. Можно выделить следующие пути уменьшения затрат энергии: снижение времени смешения; регулирование скорости вращения роторов смесителя.

Снабжение резиносмесителя регулируемым приводом позволит управлять такими параметрами, как температура и вязкость смеси. Вязкость и температура являются косвенными показателями качества резиновой смеси. Вязкость определяет момент сопротивления смешению (напряжение сдвига), т. е. мощность, развиваемую двигателем. От температуры смеси зависит не только вязкость, но и химические реакции, которые протекают в смеси и приводят к качественным изменениям ее свойств. В результате таких изменений происходит изменение вида зависимостей (1)–(4), что необходимо учитывать во время регулирования. На основании вышесказанного можно отметить важность регулирования и контроля темпера-

туры и вязкости в процессе смешения, а также получение смеси требуемой температуры и вязкости в конце смесительного цикла. Превышение температурой смеси некоторого критического значения приводит к непоправимым химическим реакциям и браковке всего замеса, что требует наличия аварийной выгрузки смеси при критическом значении температуры.

Процесс диспергирования происходит под действием напряжений сдвига, причем увеличение напряжений сдвига способствует его интенсификации. При возрастании температуры снижается напряжение сдвига, следовательно, для достижения заданной степени диспергирования требуется большая деформация сдвига. Важно отметить, что превышение оптимальной степени диспергирования ухудшает физико-механические характеристики материала.

Анализ возможных каналов и уровней системы управления процессом. Рассмотрим в общем виде систему автоматического управления (САУ), которая минимизирует время смешения при условии обеспечения необходимого качества смеси. Такой САУ необходимо получать информацию о качестве смеси в режиме непрерывного времени. Параметрами качества смеси можно считать ее вязкость, температуру и гомогенность компонентов.

Для получения информации о неизмеряемых показателях в непрерывном времени необходимо построить их наблюдатель, который позволит дать оценку параметрам, недоступным измерению. Имея зависимости (1)–(7) в явном аналитическом виде, можно выразить интересующие нас характеристики (вязкость, гомогенность) относительно измеряемых.

Рассмотрим уравнение (2). На основании данной формулы можно получить оценку вязкости при условии, что известна вязкость исходных веществ. Получение подобной информации сопряжено с затратами времени и сложностью учета большого числа входных параметров. Однако, анализируя уравнение (6), можно сделать вывод о возможности получения дополнительной информации о вязкости по изменению потребляемой мощности. Подобный подход можно встретить в [4]. Запишем наблюдатель вязкости в общем виде как

$$\mu^{\wedge} = F_8^a(\omega,\ T,\ P,\ t), \qquad (8)$$

где $\mu^{\wedge}$ – оценка вязкости смеси.

Как видно из уравнения (4), гомогенность концентрации распределяемого компонента зависит от деформации сдвига (например, ССДС) и вязкости смеси. Важно помнить, что критерии качества смешения только первоначально зависят от деформации сдвига, а затем наступает своеобразное насыщение. Более того, увеличение деформации сдвига может привести к ухудшению показателей качества смеси. Деформация сдвига в свою очередь зависит от скорости вращения и количества оборотов роторов (3) В качестве информации о вязкости используем ее оценку, полученную с помощью наблюдателя (8). Следовательно, наблюдатель однородности смеси в общем случае будет иметь вид

$$J^{\wedge} = F_9^a(\omega,\ n,\ \mu^{\wedge},\ t), \qquad (9)$$

где $J^{\wedge}$ – оценка показателя однородности смеси.

САУ получает информацию о качестве смеси от наблюдателя и прекращает процесс смешения при достижении заданного уровня качества или при невозможности дальнейшего его увеличения.

При формализации критерия минимизации энергии, а также при регулировании температуры и вязкости возникает задача регулирования частоты вращения роторов. Частота вращения роторов будет изменяться САУ в зависимости от затраченной мощности, температуры и вязкости смеси. Для системы регулирования скоростью вращения роторов возможна разработка специального закона управления, который обеспечит минимизацию затрат энергии.

Контроль температуры необходим для обеспечения информацией о ходе химических преобразований в смеси, что влечет изменение структуры зависимостей показателей. Для оценки параметра a, характеризующего фазовое состояние смеси, необходим наблюдатель. Данный наблюдатель, полученный на основе уравнения (5), будет иметь следующий вид:

$$a^{\wedge} = F_{10}(T,\ \mu^{\wedge},\ t), \qquad (10)$$

где $a^{\wedge}$ – оценка показателя фазового состояния смеси.

Это позволит учитывать изменение структуры уравнений в процессе регулирования, а также реализовать САУ переменной структуры. Такая система обеспечит автоматическое изменение параметров при качественных изменениях смеси.

Необходима аварийная остановка процесса при достижении температурой смеси критического значения. Управление температурой смеси можно обеспечить регулированием скорости вращения роторов и (или) давления при помощи затвора [6].

В процессе эксплуатации данной САУ возможно проводить анализ качества смеси экспресс-методами после получения смеси. Это позволит создать систему постепенной адаптации и вносить коррекцию в САУ после каждого замеса, что приведет к адаптации системы для большого числа рецептур. Система адаптации, получив совокупность параметров качества смеси ($\{J, \mu, K_1, K_2, \ldots\}$), формирует вектор настроечных коэффициентов для САУ ($\{R_1, R_2, \ldots\}$).

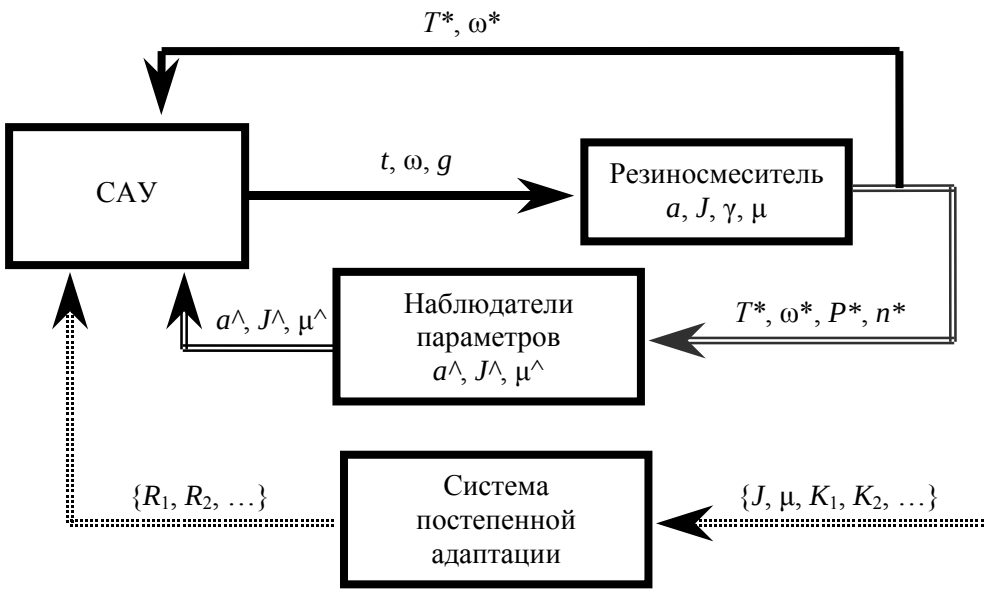


Рисунок. Схема системы управления процессом резиносмешения

На основании вышесказанного синтезируем структурную схему системы управления резиносмесителем, представленную на рисунке. В данной схеме параметры, помеченные символом «*», характеризуют измеренное значение соответствующей величины, а символом «^» – ее оценку.

Заключение. Изучение процесса позволило определить параметры, доступные регулированию, и параметры, доступные измерению. Анализ процесса дал возможность выявить зависимости между показателями смесителя в общем виде. Были получены структуры наблюдателей важных параметров, недоступных измерению; сформулированы требования к САУ переменной структуры, которая обеспечивает минимизацию затрат электроэнергии при сохранении заданного уровня качества; предложена система постепенной адаптации САУ.

Литература

1. Бекин, Н. Г. Машины и агрегаты заводов резиновой промышленности: в 4 т. / Н. Г. Бекин. – Ярославль: Изд-во Ярослав. политехн. ин-та, 1976. – 4 т.

2. Смешение полимеров / В. В. Богданов [и др.]. – Л.: Химия, 1979. – 192 с.

3. Богданов, В. В. Основы технологии смешения полимеров / В. В. Богданов, В. И. Метелкин, С. Г. Саватеев; под ред. В. Н. Красовского. – Л.: Изд-во Ленинград. ун-та, 1984. – 192 с.

4. Thermally r egulated c losed mixer: pa t. WO 02 22334 World I ntellectual Property Organization, IPC B29B 7/28, 7/82 / Antonio Proni, Daniele Ballasso; fil. 27.08.01; pub. 21.03.02.

5. Method of m ixing and kne ading control of a rubber k neader: pa t. 4076220 U SA, I PC B29B 7/28, 7/82 / K atsutoshi Nakashima, Toshito Kita; fil. 10.02.76; pub. 28.02.78.

6. Control f or ba tch mixer: pa t. 0244121 European P atent O ffice, IPC B 29B 7/ 28 / Sureshchandra R ambhai P atel; f il. 15. 04.87; pub. 04.11.87.

УДК (539.26+539.533):669.71

П. А. Сивцова, ассистент; В. Г. Шепелевич, профессор (БГУ)

СТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ БЫСТРОЗАТВЕРДЕВШЕГО СПЛАВА Al – 5,4 ат. % Mg – 0,4 ат. % Fe

The processes taking place during thermal treatment of rapidly solidified foils of Al – 5,4 at. % Mg – 0,4 at. % Fe alloy were investigated. Al_8Mg_5 precipitation was found and characterized by form and distribution of the precipitates. (111) texture of foils is preserved during annealing. Decomposition of supersaturated solid solution, obtained by rapid solidification, was studied by SEM, XRD and microhardness measurements during isochronous and isothermal annealing. The decomposition begins at 150–200ºC and is accomplished by characteristic microhardness grow. After prolonged thermal treatment microhardness decreases and Al_8Mg_5 phase migrates to grain boundaries.

Введение. Быстрозатвердевшие алюминиевые сплавы часто имеют более высокие механические свойства, чем сплавы, приготовленные традиционными методами. Улучшение механических свойств таких сплавов связано с образованием в них пересыщенных растворов переходных элементов в алюминии, а также мелкодисперсной структурой выделений, образующихся в процессе сверхбыстрой кристаллизации. Сочетание же упомянутых факторов с процессами старения потенциально способно дополнительно повысить механические характеристики данных сплавов. В связи с этим были предприняты исследования свойств сплава алюминия с магнием и железом, полученных методами сверхбыстрой закалки из расплава. Магний является основным легирующим элементом сплавов типа «магналий», которые после холодной деформации имеют значительные прочность и пластичность наряду с высокими коррозионной стойкостью и свариваемостью. Железо специально добавляют в сплавы типа «магналий» с целью снижения аномального роста зерна [1].

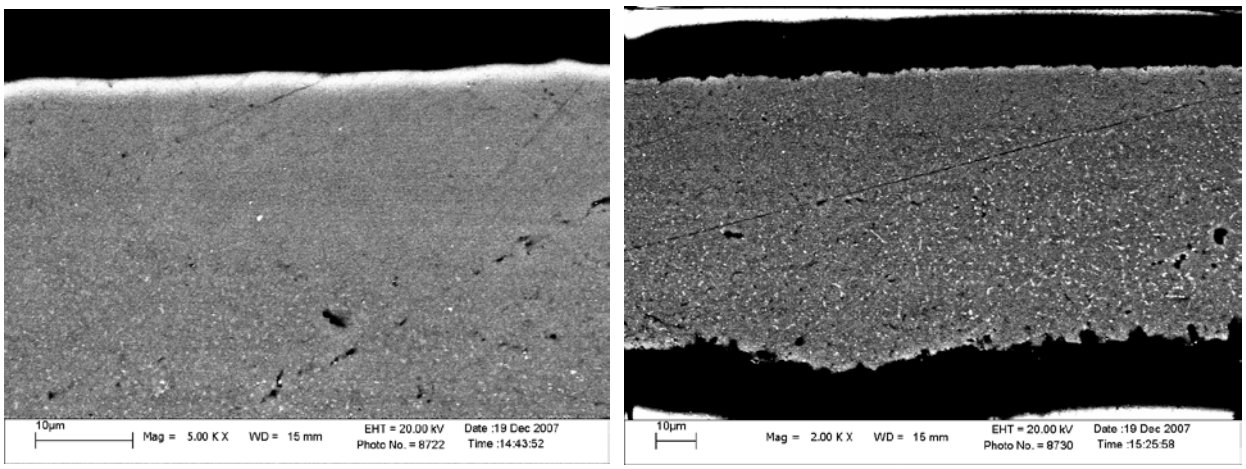
Основная часть. Исследованный сплав Al – 5,4 ат. % Mg – 0,4 ат. % Fe был получен сплавлением двух бинарных – Al – 7,2 ат. % Mg и Al – 2,0 ат. % Fe. Фольги синтезировались упрощенным методом центробежной закалки [2]. Капля расплава массой ~0,2 г инжектировалась на внутреннюю полированную поверхность быстровращающегося медного барабана диаметром 20 см, частота вращения которого составляла 1500 об/мин. Максимальная длина полученной фольги достигала 7 см, ширина – 10 мм. Для исследований отбирались фольги с толщиной в пределах 30–80 мкм. Скорость охлаждения, как показал расчет [3], достигала 10^6 К/с. Сторона, прилегающая к кристаллизатору, имела зеркальную, а противоположная сторона – бугристую структуру, в дальнейшем обозначаемые как сторона А и сторона Б.

Проводились исследования структуры и механических свойств сплавов в исходном состоянии и после термической обработки. Структура и химический состав образцов изучались посредством растрового электронного микроскопа LEO 1455VP. Рентгеноструктурный анализ проводился на дифрактометре ДРОН-3М в геометрии Брега – Брентано в монохроматизированном медном излучении. Полюсная плотность дифракционных линий 111, 200, 220, 311, 331, 420 рассчитывалась по методу Харриса [4]. Прецизионная съемка линии 420 служила для расчета параметра и микродеформации элементарной ячейки кристаллической решетки [5]. Погрешность определения параметра элементарной ячейки – 0,01%. Микротвердость фольги исследовалась с помощью ПМТ-3 с нагрузкой 20 г. Погрешность измерения микротвердости – 3%. Изохронный отжиг быстрозатвердевшей фольги осуществлялся от комнатной температуры до 470°С через 30°С с выдержкой по 20 мин при каждой температуре. Последовательный изотермический отжиг проводился в течение нескольких часов при различных температурах.

Электронная микроскопия выявила существование в объеме фольги мелкодисперсных выделений второй фазы, объемная плотность которых уменьшается по мере удаления от стороны А, а размер увеличивается. Это свидетельствует о значительных различиях в режимах затвердевания слоев фольги, прилегающих к кристаллизатору и удаленных от него. Как показывает расчет, около 2/3 толщины затвердевают в режиме рекалесценции, а затем происходит переход к отводу тепла в подложку [9].

После отжига количество выделений уменьшается, а размер – увеличивается. Данные эффекты выражены тем сильнее, чем выше температура отжига. Также с ростом температуры происходит миграция выделений из объема на границы зерен (рис. 1). Рентгеноспектральный и рентгенофазовый анализ выделений показали, что они принадлежат фазе Al_8Mg_5, которая при высоких скоростях охлаждения возникает уже при содержании магния в 2–3 ат. % [6].

Параметр элементарной ячейки фольги увеличен относительно параметра для чистого алюминия, что показывает существование твердого раствора. Измеренное значение постоянной решетки соответствует наличию в твердом растворе 0,3–0,4 ат. % магния (в зависимости от доли железа, перешедшего в твердый раствор).



а *б*

Рис. 1. Распределение выделений второй фазы:
а – исходное состояние; *б* – отжиг при 470°С в течение 1 ч

Изотермический отжиг приводит к дополнительному увеличению параметра элементарной ячейки (рис. 2), которое не может быть связано лишь с выходом железа из твердого раствора, так как рост параметра решетки для такого процесса не должен превышать 0,004 Å при экспериментальной величине скачка на 0,008 Å. Подобное поведение связано, таким образом, еще и с растворением интерметаллида Al_8Mg_5 и переходом магния в твердый раствор α-Al [1].

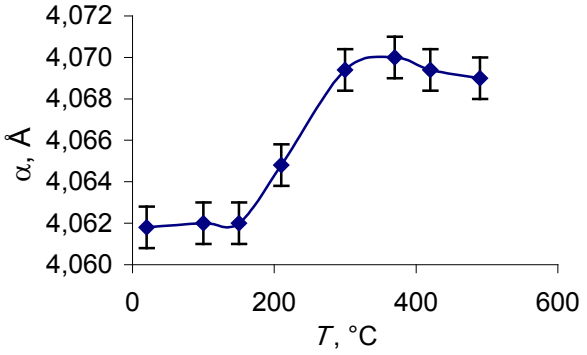


Рис. 2. Зависимость параметра элементарной ячейки от температуры отжига

Физическое уширение дифракционной линии (420) твердого раствора на основе алюминия исследованного сплава в исходном состоянии невелико и при отжиге уменьшается (рис. 3), что обусловлено растворением выделений второй фазы и переходом магния в твердый раствор на основе алюминия и с коалесценцией выделений, в результате чего происходит уменьшение микронапряжений кристаллической решетки.

Значения полюсных плотностей дифракционных линий твердого раствора на основе алюминия показывают, что преобладающей является текстура (111), на долю которой приходится 50% объема фольги. Отжиг фольг не приводит к смене доминирующей текстуры.

Преобладающей текстурой в алюминиевых сплавах, полученных традиционными методами кристаллизации, является текстура (100), так как плоскости {100} имеют минимальную поверхностную энергию при контакте с расплавом, и поэтому преимущественно формируются при росте дендритов [4, 7]. Возможность же формирования текстуры (111) следует из термодинамических расчетов движущей силы перемещения плоской межфазной границы «кристалл – жидкость», учитывающих соответствующее изменение плотности жидкости перед фронтом кристаллизации [7]. Согласно результатам вычислений, для плоскостей {111}, совпадающих с межфазной границей, дополнительная энергия для перемещения в нормальном направлении является минимальной.

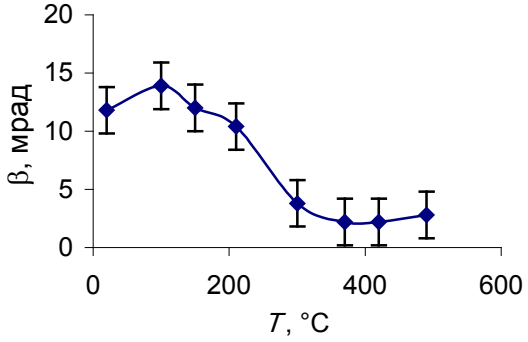


Рис. 3. Зависимость физического уширения дифракционной линии (420) от температуры отжига

Микротвердость исследованной фольги в исходном состоянии в 3 раза превышает микротвердость чистого алюминия и в 1,2 раза – микротвердость массивных образцов, что связано с формированием пересыщенного твердого раствора на основе алюминия, наличием мелко-

дисперсных выделений второй фазы и микродеформациями кристаллической решетки, внесенными на этапе получения фольги.

Изохронный отжиг фольг выявил сложный процесс старения (рис. 4). Существенное изменение микротвердости образцов в интервале 140–290°С обусловлено выделением в этой области температур железосодержащей фазы, на роль которой претендует метастабильный интеметаллид Al_6Fe [1, 8], так как стабильная фаза Al_3Fe образуется в быстрозатвердевших сплавах только при более высоких температурах.

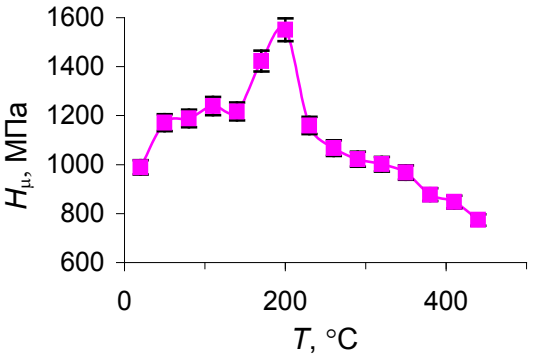


Рис. 4. Зависимость микротвердости фольг от температуры при изохронном отжиге

Для проверки результатов изохронного отжига был проведен изотермический отжиг (рис. 5). В интервале температур 120–260°С действительно наблюдается существенное изменение микротвердости. Полученные результаты показали, что выявленные в процессе изохронного отжига особенности старения не являются специфическими именно для этого вида отжига и выбранных режимов старения, а характерны для сплава в целом.

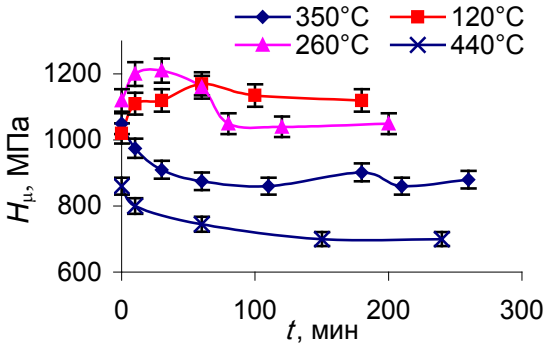


Рис. 5. Зависимость микротвердости фольг от времени при изотермическом отжиге

Полученные результаты объясняются тем, что на начальном этапе выделения фазы Al_6Fe очень малы и приводят к упрочнению фольги. При повышении температуры они увеличиваются, коалесцируют, количество частиц уменьшается, и они более не способны оказывать упрочняющее действие. О справедливости этих предположений свидетельствуют электронно-микроскопические фотографии срезов отожженных фольг. Коалесценция включений способствует протеканию рекристаллизации, приводящей к монотонному уменьшению микротвердости на конечных этапах изохронного отжига.

Заключение. Исследование структуры и свойств быстрозатвердевшей фольги сплава Al – 5,4 ат. % Mg – 0,4 ат. % Fe выявило ее сложное поведение при «горячем» старении и существенный потенциал этого сплава как конструкционного материала. Сверхбыстрая закалка из расплава в сочетании с оптимально подобранными режимами старения позволяют добиться практически двукратного роста микротвердости.

Литература

1. Мондольфо, Л. Ф. Структура и свойства алюминиевых сплавов / Л. Ф. Мондольфо. – М.: Металлургия, 1979. – 640 с.
2. Высокоскоростное затвердевание расплава (теория, технология и материалы) / под ред. Б. С. Митина. – М.: СП «ИНТЕРМЕТ ИНЖИНИРИНГ», 1998. – 400 с.
3. Мирошниченко, И. С. Закалка из жидкого состояния / И. С. Мирошниченко. – М.: Металлургия, 1982. – 168 с.
4. Вассерман, Г. Текстуры металлических материалов / Г. Вассерман, И. Гревен. – М.: Металлургия, 1969. – 654 с.
5. Горелик, С. С. Рентгенографический и электронно-оптический анализ: учеб. пособие для вузов / С. С. Горелик, Ю. А. Скаков, Л. Н. Расторгуев. – М.: МИСИС, 1994. – 327 с.
6. Золоторевский, В. С. Металловедение литейных алюминиевых сплавов / В. С. Золоторевский, Н. А. Белов. – М.: МИСИС, 2005. – 376 с.
7. Li, D. Y. A possible role for surface packing density in the formation of {111} texture in solidified FCC metals / D. Y. Li, I. A. Szpunar // Mater. Sci. Lett. – 1994. – Vol. 13, № 21. – P. 1521–1523.
8. Сивцова, П. А. Исследование быстрозатвердевшей фольги сплава системы Al-Cr-Fe / П. А. Сивцова, В. Г. Шепелевич // МиТОМ. – 2007. – № 6 (624). – С. 8–11.
9. Сивцова, П. А. Структура поверхности быстрозатвердевших фольг алюминиевых сплавов, полученных центробежной закалкой / П. А. Сивцова, И. А. Сивцов, В. Г. Шепелевич // Журнал функциональных материалов. – 2007. – Т. 1, № 4. – С. 134–140.

УДК 004.021:004.942

И. В. Алданова, аспирант; И. Ф. Кузьмицкий, доцент

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДИНАМИКИ ПРОЦЕССА ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ

In the given work, dynamics of process of polycondensation with removal of ethylene glycol from reactionary weight is in detail investigated. The main parameters influencing quality of polymer and character of their influence are determined. The mathematical model of the processes proceeding in a reactor of the basic polycondensation is made, in view of the accepted assumptions and simplifications. The nonlinear differential equations of the first order for definition of speeds of concentration change of products and temperature inside a reactor represent material and power balances of system. The given mathematical model takes into account the elementary processes proceeding in a reactor, including concentration of ethylene glycol, diethylene glycol and water not only in melt, but also in a steam phase. The conclusion about dependence of time of melt stay from temperature inside a reactor is made.

Введение. Перерабатывающие отрасли промышленности стремятся довести до максимума свои производственные мощности, сохраняя при этом качество продукта. Обычно существует компромисс между этими двумя требованиями. Это особенно верно при производстве полимеров, где свойства продукта являются критическими и реакторы должны работать при условиях, которые на выходе дают продукты, удовлетворяющие относительно узким требованиям спецификаций.

Таким образом, основной задачей при производстве полимеров является получение требуемого объема продукции высокого качества с наименьшими затратами сырьевых и энергетических ресурсов. Для решения такого рода задачи необходимо детально изучить кинетику процессов, происходящих в производственных реакторах.

Основная часть. При производстве полиэтилентерефталата бутылочного типа (марки F) завершающая стадия поликонденсации происходит в конечном реакторе. Глубокий вакуум порядка 0,28–0,32 кПа создается гликолекольцевыми насосами. Температура 294–306°С регулируется подачей жидкого динила в рубашку реактора. Частота вращения дисковой мешалки в реакторе основной поликонденсации составляет 6 об/мин. При этом на ее поверхности происходит распределение слоя расплава толщиной более 2 мм. Таким образом, можно судить о влиянии частоты вращения мешалки на скорость процесса в результате интенсивного испарения под вакуумом летучих веществ с ее поверхности, так называемое обновление расплава. Это в свою очередь оказывает воздействие на время протекания реакций и препятствует образованию «застойных зон» при получении полимера. В качестве катализатора, активирующего реакцию поликонденсации, используется оксид сурьмы Sb_2O_3, расход которого соотносится с расходом расплава, поступающего в поликонденсатор из реактора отгона этиленгликоля.

Процесс поликонденсации ведется с отводом этиленгликоля из реакционной массы, поэтому при изучении кинетики поликонденсации используют метод математического моделирования [1].

В реакторе основной поликонденсации протекают следующие химические реакции.

1. Реакция поликонденсации (получение путем соединения молекул гидроксиэтилэфирной концевой группы диэфирной группы и этиленгликоля):

$$2E_g \xleftrightarrow{k_1/k_1'} Z + EG \qquad (1)$$

2. Образование ацетальдегида.

2.1. В результате разложения гидроксиэтилэфирной концевой группы получается кислотная концевая группа и ацетальдегид:

$$E_g \xrightarrow{k_2} E_a + A \qquad (2)$$

2.2. Вследствие реакции взаимодействия винильной и гидроксиэтилэфирной концевой группы образуется диэфирная группа и ацетальдегид:

$$E_V + E_g \xrightarrow{k_3} Z + A \qquad (3)$$

3. Получение диэтиленгликоля.

3.1. В результате реакции взаимодействия гидроксиэтилэфирных концевых групп и этиленгликоля образуется кислотная группа и диэтиленгликоль:

$$E_g + EG \xrightarrow{k_4} E_a + DEG \qquad (4)$$

3.2. Вследствие реакции взаимодействия гидроксиэтилэфирной и диэтиленгликолевой концевых групп получается диэфирная группа и диэтиленгликоль:

$$E_g + E_{DEG} \xleftrightarrow{k_5 / k_5'} Z + DEG \qquad (5)$$

3.3. В результате реакции взаимодействия гидроксиэтилэфирных концевых групп образуется кислотная концевая группа и диэтиленгликолевая концевая группа:

$$E_g + E_g \xrightarrow{k_6} E_a + E_{DEG} \qquad (6)$$

4. Образование воды.

4.1. Вследствие реакции взаимодействия кислотной концевой группы и этиленгликоля получается гидроксиэтилэфирная концевая группа и вода:

$$E_a + EG \xleftrightarrow{k_7 / k_7'} E_g + W \qquad (7)$$

4.2. В результате реакции взаимодействия гидроксиэтилэфирной концевой группы и кислотной концевой группы образуется диэфирная группа и вода:

$$E_g + E_a \xleftrightarrow{k_8 / k_8'} Z + W \qquad (8)$$

5. Разложение диэфирной группы. В результате этой реакции получается винильная и кислотная концевые группы:

$$Z \xrightarrow{k_9} E_V + E_a \qquad (9)$$

В данных уравнениях k_i и k'_i – константы скорости прямой и обратной реакций соответственно, $с^{-1}$.

Перечень условных обозначений, использованных в уравнениях реакций (1)–(9), представлен в таблице.

Таблица

Условные обозначения компонентов реакций

Условное обозначение	Компонент
E_a	Кислотная концевая группа
E_g	Гидроксиэтилэфирная концевая группа
E_V	Винильная концевая группа
E_{DEG}	Диэтиленгликолевая концевая группа
Z	Диэфирная группа
W	Вода
EG	Этиленгликоль
DEG	Диэтиленгликоль

Таким образом, можно сделать вывод, что основными параметрами, влияющими на качество получаемого в процессе полиэтилентерефталата, являются: давление в реакторе, температура, концентрация катализатора, время пребывания полимера в реакторе и скорость перемешивания реакционной массы, а также значительное воздействие оказывает концентрация винильных и кислотных групп в расплаве полимера. Кислотные концевые группы делают полимер склонным к гидролизу, винильные концевые группы отвечают за окрашивание полиэтилентерефталата [2].

Материальный баланс системы. Составить детальное математическое описание процессов в реакторах поликонденсации чрезвычайно трудно в связи с наличием сложных течений вязкой жидкости, с зонами застоя, а также эффектами диффузии и испарения летучих компонентов при переменной вязкости расплава. Поэтому будем руководствоваться следующими упрощающими предположениями:

– перемещение расплава вдоль реактора подчиняется режиму идеального вытеснения;

– расплав в поперечном направлении идеально перемешан;

– испарение летучих компонентов происходит главным образом с поверхности перемешивающего устройства;

– химические реакции в пленке характеризуются теми же самыми параметрами, что и в объеме расплава за исключением реакции основной поликонденсации, которая ускоряется;

– коэффициенты диффузии летучих компонентов в расплаве зависят от вязкости последнего.

При моделировании должен быть отражен и исследован перечень элементарных процессов:

1) увеличение вязкости расплава при его продвижении вдоль реактора;

2) химические реакции, имеющие равновесный характер в объеме расплава и неравновесный – на его поверхности;

3) удаление летучих компонентов за счет создания пониженного давления [3].

Учитывая вышеуказанные допущения и перечень подлежащих исследованию процессов, составим материальный баланс системы.

Время пребывания реакционной смеси в реакторе основной поликонденсации напрямую зависит от скорости протекающих в нем реакций. Таким образом, запишем выражения скоростей реакций, используя для этого уравнения (1)–(9):

$$R_1 = k_1 \left[E_g\right]^2 - k_1' \left[Z\right] \left[EG\right], \qquad (10)$$

$$R_2 = k_2 \left[E_g\right], \qquad (11)$$

$$R_3 = k_3 \left[E_V\right] \left[E_g\right], \qquad (12)$$

$$R_4 = k_4 \left[E_g\right] \left[EG\right], \qquad (13)$$

$$R_5 = k_5 \left[E_g\right] \left[E_{DEG}\right] - k_5' \left[Z\right] \left[DEG\right], \qquad (14)$$

$$R_6 = k_6\left[E_g\right]^2, \quad (15)$$

$$R_7 = k_7\left[E_a\right]\left[EG\right] - k_7^{'}\left[E_g\right]\left[W\right], \quad (16)$$

$$R_8 = k_8\left[E_a\right]\left[E_g\right] - k_8^{'}\left[Z\right]\left[W\right], \quad (17)$$

$$R_9 = k_9\left[Z\right]. \quad (18)$$

В выражениях (10)–(18) квадратные скобки означают концентрацию вещества в расплаве, моль/м^3.

Используя выражения (10)–(18), запишем уравнения материального баланса. Скорость изменения концентрации компонента в реакторе идеального смешения по координате (длина реактора) и времени равна сумме скоростей реакций, в которые входит компонент, с учетом стехиометрических коэффициентов [5]:

$$\frac{\partial\left[E_g\right]}{\partial\tau} + U\frac{\partial\left[E_g\right]}{\partial z} =$$

$$= [-2R_1 - R_2 - R_3 - R_4 - R_5 - 2R_6 + R_7 - R_8], \quad (19)$$

$$\frac{\partial\left[E_a\right]}{\partial\tau} + U\frac{\partial\left[E_a\right]}{\partial z} =$$

$$= [R_2 + R_4 + R_6 - R_7 - R_8 + R_9], \quad (20)$$

$$\frac{\partial\left[Z\right]}{\partial\tau} + U\frac{\partial\left[Z\right]}{\partial z} = \left[R_1 + R_3 + R_5 + R_8 - R_9\right], \quad (21)$$

$$\frac{\partial\left[E_V\right]}{\partial\tau} + U\frac{\partial\left[E_V\right]}{\partial z} = \left[-R_3 + R_9\right], \quad (22)$$

$$\frac{\partial\left[E_{DEG}\right]}{\partial\tau} + U\frac{\partial\left[E_{DEG}\right]}{\partial z} = \left[-R_5 + R_6\right], \quad (23)$$

$$\frac{\partial\left[W\right]}{\partial\tau} + U\frac{\partial\left[W\right]}{\partial z} =$$

$$= \left[R_7 + R_8\right] - k_l a\left(\left[W\right] - \left[W^*\right]\right), \quad (24)$$

$$\frac{\partial\left[EG\right]}{\partial\tau} + U\frac{\partial\left[EG\right]}{\partial z} =$$

$$= \left[R_1 - R_4 - R_7\right] - k_l a\left(\left[EG\right] - \left[EG^*\right]\right), \quad (25)$$

$$\frac{\partial\left[DEG\right]}{\partial\tau} + U\frac{\partial\left[DEG\right]}{\partial z} =$$

$$= \left[R_4 + R_5\right] - k_l a\left(\left[DEG\right] - \left[DEG^*\right]\right). \quad (26)$$

В уравнениях материального баланса (24)–(26) $[EG^*]$, $[W^*]$, $[DEG^*]$ – равновесные концентрации летучих продуктов в расплаве у межфазной поверхности (соответственно для $[EG^*]$ $j = 1$, для $[W^*]$ $j = 2$, для $[DEG^*]$ $j = 3$), моль/м^3; τ – время пребывания расплава в реакторе, с; U – скорость потока в реакторе, м/с; z – интегральный параметр ($z \in [0; 1]$), за который принимается длина реактора основной поликонденсации L, м.

Равновесная концентрация j-го летучего продукта в расплаве у межфазной поверхности определяется следующим образом:

$$C_j^* = \left(\frac{C_{POLY}}{1 - \sum_j X_j^*}\right) X_j^*. \quad (27)$$

Общая концентрация полимерных составляющих в расплаве и у межфазной поверхности равна

$$C_{POLY} = \frac{\left[E_g\right] + \left[E_a\right] + \left[E_V\right] + \left[E_{DEG}\right]}{2}. \quad (28)$$

Мольная доля j-го летучего продукта в расплаве у межфазной поверхности составляет

$$X_j^* = \frac{PY_j}{P_j^\circ \gamma_j}. \quad (29)$$

Давление пара j-го компонента в зависимости от температуры рассчитывается по следующим формулам:

$$\ln P_{EG}^\circ = 49,703 - \left(\frac{8576,7}{T}\right) - 4,042T, \quad (30)$$

$$\ln P_W^\circ = 18,568 - \left(\frac{4047,606}{T - 33,3}\right), \quad (31)$$

$$\ln P_{DEG}^\circ = 17,0326 - \left(\frac{4122,52}{T - 122,5}\right). \quad (32)$$

Мольная доля j-го летучего продукта в паровой фазе у межфазной поверхности находится из выражения

$$Y_j = \int_0^1 k_l a\left(C_j - C_j^*\right)\partial z. \quad (33)$$

Коэффициент активности j-го летучего продукта определяется из следующего соотношения:

$$\gamma_j = \frac{1}{m_j}\exp\left(1 - \frac{1}{m_j} + \chi_L\right). \quad (34)$$

Отношение жидкофазных молярных объемов полимера и чистых компонентов равно

$$m_j = \frac{V_P \rho_j}{M_j}. \quad (35)$$

Молярный объем чистого полимера в жидком состоянии, моль/м^3, рассчитывается по формуле

$$V_P = \frac{1 - U_V}{C_{POLY}}. \quad (36)$$

Объемная фракция летучего материала в расплаве находится из следующего уравнения:

$$U_V = \sum_j \frac{M_j C_j}{\rho_j}. \qquad (37)$$

Параметр взаимодействия полимер – растворитель Флори – Хаггинса равен

$$\chi_L = a_0 + b_0 \left(1 - \frac{U_V}{U_V^\circ}\right). \qquad (38)$$

Коэффициент массопереноса, м/мин, определяется по формуле

$$k_l a = k_l a_{ref} \left(\frac{N}{N_{ref}}\right)^\alpha. \qquad (39)$$

В выражениях (35)–(39) приняты следующие условные обозначения:

ρ_j – плотность j-го чистого жидкого продукта, кг/м^3;

M_j – молекулярный вес j-го летучего продукта;

C_j – концентрация j-го летучего продукта в расплаве, моль/м^3;

a_0, b_0 – параметры уравнения;

U_V° – объемная фракция летучего материала в расплаве при $z = 0$;

a – удельная межфазная поверхность на единицу объема расплава, м$^{-1}$;

ref – ссылочные условия;

α – экспонента, описывающая влияние скорости перемешивающего устройства на $k_l a$.

Выражения (27)–(39) представляют собой алгоритм расчета равновесных концентраций этиленгликоля, диэтиленгликоля и воды в паровой фазе [2].

Энергетический баланс системы. Для реактора изменениями кинетической и потенциальной энергии и работой системы обычно можно пренебречь. Тогда для элемента движущейся среды, исходя из первого закона термодинамики, получаем следующее уравнение:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = -\frac{\sum_{i=1}^{n} H_i R_i' + KA_h \left(T_в - T\right)}{\sum_{i=1}^{n} R_i' C_{pi}} \frac{\partial T}{\partial z}, \qquad (40)$$

где H_i – парциальная мольная энтальпия i-го компонента, кДж/моль; R_i' – скорость изменения концентрации i-го компонента смеси, моль/(м^3 · град); K – общий коэффициент теплопередачи, кДж/(м^2 · К); A_h – боковая поверхность теплообмена на единицу длины, м^2/м; $T_в$ – температура внешней поверхности, К; T – температура внутри реактора поликонденсации, К; C_{pi} – теплоемкость i-го компонента, кДж/(моль · К).

В данном случае энтальпия зависит только от температуры, и парциальная мольная энтальпия равна парциальной мольной энтальпии чистого вещества (пренебрегаем влиянием состава).

Для реактора баланс количества движения сводится к уравнению для перепада давления, которое устанавливает связь между тепловыми потерями и трением среды. В нашем случае давление внутри реактора должно поддерживаться постоянным, таким образом, мы пренебрегаем составлением баланса по количеству движения [4].

Предположим, что однозначная зависимость констант скоростей реакций от температуры выражается через соотношение Аррениуса:

$$k_i = k_{i0} \exp^{(-E_i/RT)}, \qquad (41)$$

где k_{i0} – предэкспоненциальный множитель, м^3/(моль · мин); E_i – энергия активации, Дж/моль; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль · К); T – абсолютная температура, К.

С учетом формулы (40) по результатам измерений среднечисленной степени полимеризации и концентрации карбоксильных групп в литературе приведены следующие выражения для констант скорости реакций (1), (2), (8), (9) соответственно:

$$k_{1к} = 4{,}5C \cdot 10^5 \exp^{(-77{,}5/RT)} + 2{,}1 \cdot 10^{12} \exp^{(-168/RT)},$$

$$k_{2к} = 1{,}44C \cdot 10^9 \exp^{(-125/RT)},$$

$$k_{8к} = 6{,}89C \cdot 10^5 \exp^{(-72{,}9/RT)} + 4{,}3 \cdot 10^6 \exp^{(-101/RT)},$$

$$k_{9к} = 1{,}25C \cdot 10^{10} \exp^{(-158/RT)},$$

где $C_к$ – концентрация катализатора, %.

Анализ литературных источников показывает, что пока не удалось определить какого-либо детерминированного влияния температуры на величину константы равновесия. На основании этого можно сделать предположение о равенстве нулю энтальпии поликонденсации полиэтилентерефталата [5].

Заключение. При детальном исследовании кинетики процессов, протекающих в реакторе, можно сделать вывод, что математической моделью процессов, происходящих в реакторе основной поликонденсации, является система нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка (19)–(26) и (40).

В простейшем случае моделирование кинетики химических реакций приводит к необходимости численного решения задачи Коши для системы дифференциальных уравнений [4].

Таким образом, при управлении процессом поликонденсации главной задачей является

регулирование температуры внутри реактора расходом жидкого динила; давления; частоты вращения перемешивающего устройства и соотношения расходов расплав – катализатор.

Литература

1. Адорова, И. В. Математическое моделирование процесса синтеза полиалкилентерефталатов / И. В. Адорова, В. В. Кузнецов // Производство и переработка пластмасс и синтетических смол. – М.: НИИТЭХИМ, 1987. – 43 с. – (Обзорная информация).

2. Bhaskar, V. Multiobjective optimization of an industrial wiped film poly (ethylene terephthalate) reactor: some further insights / V. Bhaskar, S. K. Gupta, A. K. Ray // Computers & Chemical Engineering. – 2001. – С. 391–407.

3. Дорогов, Н. Н. Математическое моделирование и оптимизация технологических процессов в производстве полимера полиэтилентерефталата / Н. Н. Дорогов. – Минск: Издательский центр БГУ, 2002. – 187 с.

4. Кроу, К. Математическое моделирование химических производств / К. Кроу; под ред. Г. М. Островского. – М.: Мир, 1973. – 391 с.

5. Поликонденсация полиэтилентерефталата при участии дикарбоновых кислот / В. В. Шевченко [и др.] // Хим. волокна. – 1977. – № 1. – С. 22–24.

УДК 621.317

М. А. Анкуда, ассистент

АНАЛИЗ РАБОТЫ МЕТОЧНОГО ОДНОКАТУШЕЧНОГО ЯМР-ИЗМЕРИТЕЛЯ РАСХОДА ЖИДКОСТЕЙ

In article the way of measurement of the expense a proton of containing liquids by a method of a NMR is considered. The attention is paid to features of a method, possibility of definition of the expense of liquid organic substances, in particular oil refining products. The block diagramme one-bobbin an expense NMR-measuring instrument is presented. Time diagrammes of work of a flowmeter with time division of process of a mark and registration are resulted. The electric basic scheme the spin detector as most comprehensible of possible devices of registration of a signal of a NMR is given.

Введение. Меточный ядерно-магнитный расходомер (marker nuclear-magnetic flowmeter) – ядерно-магнитный расходомер, в котором на каком-либо участке пути от поляризатора до приемной катушки резонатора производится создание метки в потоке путем изменения вектора намагниченности ядер. Расход определяется по времени прохождения жидкостью пути от отметчика, создающего метку, до приемной катушки. Эффект ЯМР наблюдается на образцах, содержащих достаточное количество ядер с большими значениями магнитных моментов [1]. Использование ЯМР в движущихся средах для технологических процессов ограничивается жидкостями или сжатыми газами, содержащими водород, фтор, литий, хлор и фосфор. Наибольшее распространение получили методы ЯМР для проточных водородосодержащих жидкостей.

Основная часть. Для регистрации сигнала ЯМР движущейся жидкости используются катушки Блоха, мостовые детекторы, схема Роллина, автодинные спиновые детекторы. Применение катушек Блоха и мостовых схем в промышленных приборах ограничивается их сложностью и низкой помехоустойчивостью. К недостаткам автодинов следует отнести инерционность и большую амплитуду генерации, что может приводить к искажению сигнала ЯМР. Однако простота и надежность, а также возможность перестройки частоты при высокой чувствительности обусловливают широкое использование автодинов в спектрометрах, магнитометрах, расходомерах.

Меточный однокатушечный ЯМР-расходомер относится к измерителям с временным разделением процессов отметки и регистрации. Принцип устройства состоит в пространственном совмещении датчика меток и анализатора. При этом анализатор периодически превращается в датчик меток, а спиновый детектор – в генератор нутации, в то же время измерительным участком является участок, проходящий через катушку регистрации. Для получения сигнала поле в месте расположения образца должно быть не менее 0,13 Тл [2]. Поэтому наиболее критичным узлом является первичный преобразователь. Для использования в жестких условиях технологического процесса преобразователь должен обладать высокой помехоустойчивостью к электромагнитным и механическим воздействиям и малым энергопотреблением. Этим требованиям удовлетворяет первичный преобразователь на основе постоянных магнитов с ярмом броневого типа.

Первичный преобразователь выполнен на основе постоянных магнитов. В магнитной системе броневого типа использованы постоянные магниты из 27СА220. Необходимая индукция в рабочем зазоре достигается включением боковых магнитов, состыкованных одноименными полюсами с боковыми гранями центральных магнитов и полюсных наконечников.

Структурная схема ЯМР-измерителя расхода с временным разделением процесса отметки и регистрации представлена на рис. 1, а временные диаграммы, характеризующие его работу, – на рис. 2.

Измеритель работает следующим образом. Поляризация жидкости производится в поле, создаваемом магнитами поляризатора. Сигнал ЯМР наблюдается периодически, для чего используется модулирующее синусоидальное поле звуковой частоты, создаваемое катушками модуляции, от генератора модуляции. Анализ вектора намагниченности движущейся жидкости производится при помощи катушки регистрации, соединенной со спиновым детектором [3], во время отсутствия импульса на выходе генератора импульсов; при этом обеспечивается оптимальная для регистрации сигнала ЯМР амплитуда радиочастотного резонансного поля, создаваемого катушкой регистрации.

Отметка жидкости выполняется инверсией вектора ядерной намагниченности радиочастотным полем катушки регистрации с приходом на вход управления амплитудой импульса генерации спинового детектора, вырабатываемого генератором импульсов (рис. 2). Отметка инверсией осуществляется при выполнении условия

$$\pi = \gamma B_{1и} \tau_и , \qquad (1)$$

где $\tau_и$ – длительность импульса на выходе генератора импульсов;

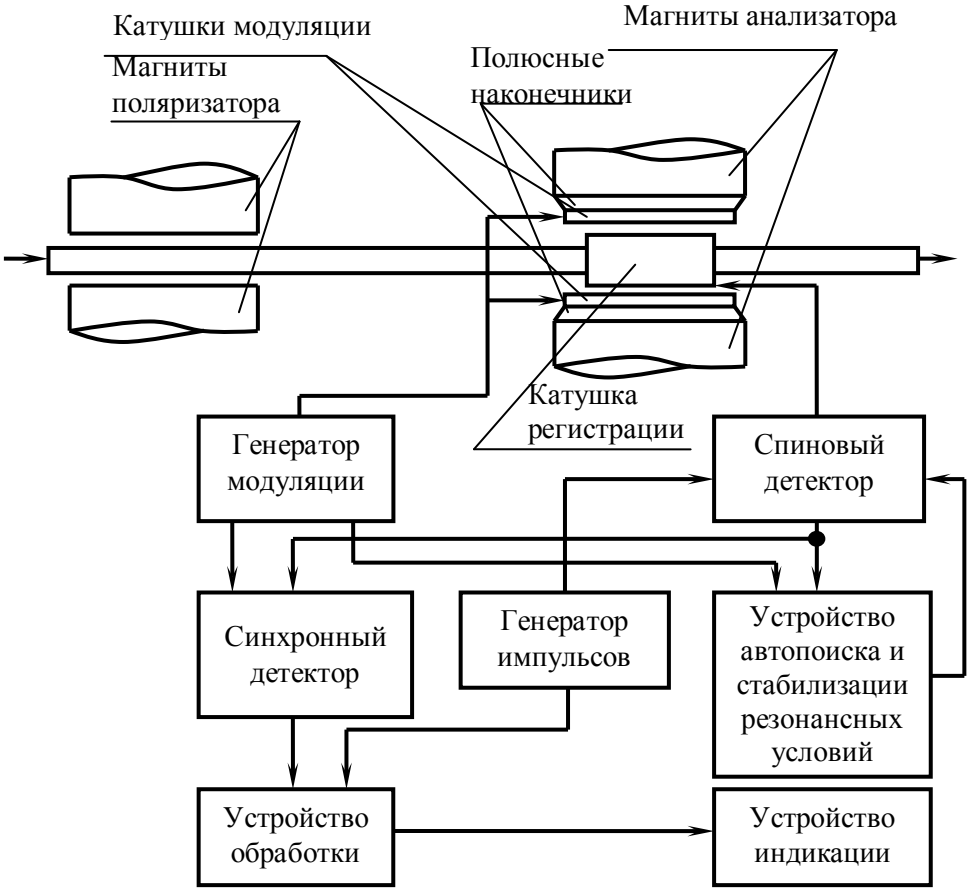


Рис. 1. Структурная схема меточного однокатушечного ЯМР-расходомера

$$B_1 = \frac{1}{2}\mu_0 I_{к.р} \frac{N}{l}, \qquad (2)$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м – магнитная проницаемость вакуума; $I_{к.р}$ – ток в катушке регистрации.

В свою очередь ток в соленоиде выражается через его индуктивность $L_{к.р}$:

$$I_{к.р} = \frac{U_{ген}}{\omega_р L_{к.р}} = \frac{U_{ген} l}{\omega_р \mu_0 N^2 S_{к.р}}, \qquad (3)$$

где $U_{ген}$ – амплитуда резонансного напряжения на катушке регистрации.

Снижение случайных погрешностей измерения расхода, обусловленных шумами в тракте регистрации, для меточных ЯМР-расходомеров временного типа достигается применением адаптивной частоты отметки и полосы пропускания канала регистрации к скорости жидкости [3].

Погрешность определения информативного параметра смежна с напряжением шумов в тракте регистрации:

$$\delta t_п = \frac{A_ш}{dA/dt}, \qquad (4)$$

где $A_ш$ – амплитуда шумовых флуктуаций сигнала ЯМР; dA/dt – скорость изменения интенсивности в момент регистрации отметки.

Случайная погрешность измерения расхода определяется погрешностью информативного параметра регистрации. Тогда из (1)–(3) получаем зависимость длительности π-импульса от параметров катушки регистрации – амплитуды переменного напряжения и резонансной частоты:

$$\tau_и = \frac{2\pi\omega_р N S_{к.р}}{\gamma U_{ген}}. \qquad (5)$$

Независимость угла нутации от скорости движения жидкости обеспечивается выполнением условия

$$\tau_и << \frac{l}{W}. \qquad (6)$$

Регистрация намагниченности жидкости производится на второй гармонике частоты модуляции синхронным детектором. При движении жидкости отмеченная инверсная намагниченность в объеме катушки регистрации сменяется неотмеченной вследствие притока в соленоид ядер из поляризатора. Формирование импульса, длительность которого обратно пропорциональна расходу, и преобразование длительности в расход осуществляются устройством обработки. На устройство индикации выводится информация о расходе измеряемой жидкости.

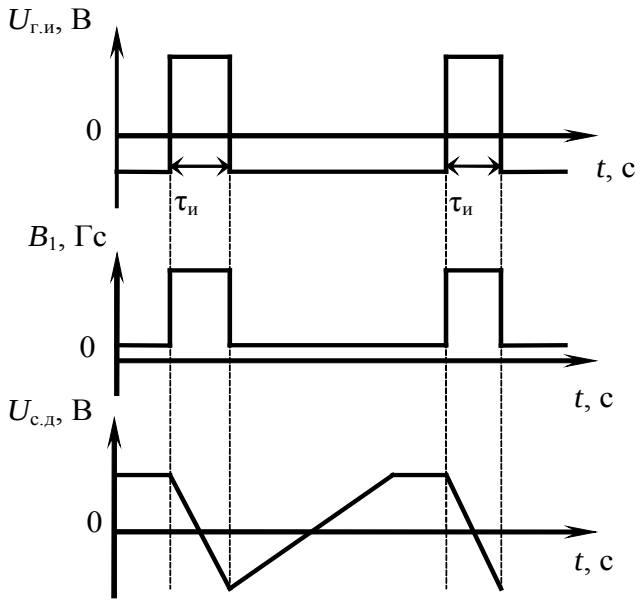


Рис. 2. Временные диаграммы меточного однокатушечного расходомера:
$U_{г.и}$, $U_{с.д}$ – напряжения на выходе генератора
импульсов и синхронного детектора соответственно

Скорость изменения намагниченности в катушке регистрации после π-импульса с учетом формулы для однокатушечного меточного расходомера выражается в виде

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\chi_0 B - M}{T_1} - \gamma^2 B_1^2 T_2 M + \\ + \frac{l}{W}\left(\left|M_{вх}\right| + \chi_0 B_а\right). \qquad (7)$$

Первое слагаемое в формуле (7) описывает процесс намагничивания жидкости в поле анализатора, второе – разрушение намагниченности резонансным радиочастотным полем при ее анализе, третье – смену инверсной намагниченности в катушке регистрации неинверсной из-за течения жидкости. Для некоторых спиновых детекторов (например, автодинов) второе слагаемое может превалировать над первым и третьим, что приводит к быстрому разрушению инверсной намагниченности и не позволяет зарегистрировать сигналы эмиссии. Перспективными для однокатушечного меточного ЯМР-расходомера могут быть спиновые детекторы, которые обеспечивают большой сигнал при малой амплитуде генерации. Примером такого детектора может служить спиновый детектор на основе генератора с параметрическим возбуждением колебаний. Остальные блоки однокатушечного измерителя решены известными схемотехническими методами.

Аналоговая схема регистрации включает в себя генератор модуляции, синхронные детекторы, систему автопоиска и стабилизации тракта регистрации расхода.

Принципиальная схема автодинного спинового детектора, обеспечивающего регистрацию движения ядерных спинов, приведена на рис. 3.

Автодинный спиновый детектор включает дифференциальный усилитель, выполненный на VT2, VT3, истоковый повторитель на VT1, детектор на VD2, VD3, колебательный контур на СД, L1 и варикапной матрице VD1, с помощью которой обеспечивается перестройка резонансной частоты колебательного контура, и усилитель низкой частоты на DA1. Частота генерируемых колебаний в первом приближении определяется резонансной частотой колебательного контура, катушкой которого является катушка регистрации L1, охватывающая трубопровод с резонирующими ядрами движущейся жидкости. Поглощение энергии высокочастотного магнитного поля катушки образцом эквивалентно внесению в контур дополнительного сопротивления потерь. Поскольку сигналы ЯМР наблюдаются периодически, то наступление условий резонанса приводит к соответствующей амплитудной модуляции генерируемых высокочастотных колебаний. Это поглощение выделяется детектором, выполненным на VD2, VD3, и усиливается каскадом DA1. Цифровой блок по запрограммированному алгоритму анализирует сигнал поглощения и вырабатывает управляющее воздействие на варикап VD1 для изменения частоты генерации автодина, чем обеспечивается тонкая подстройка резонансных условий. Подстройка резонансных условий осуществляется при помощи частотной модуляции генерируемых автодином колебаний с использованием поискового градиентного алгоритма определения экстремума, реализующего программным образом метод синхронного детектирования.

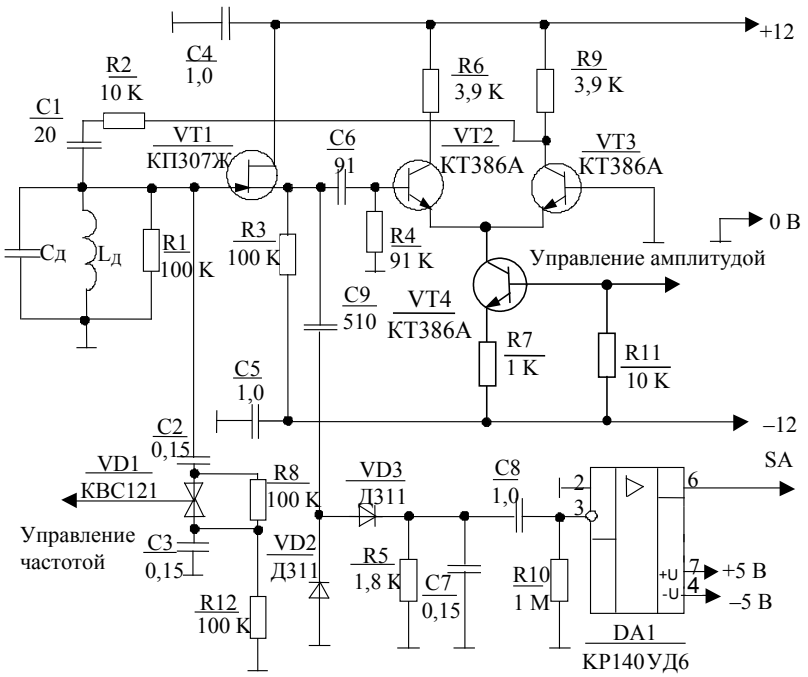


Рис. 3. Принципиальная схема автодинного спинового детектора

При помещении в катушке резонирующих ядер исследуемого образца, т. е. ядер движущейся жидкости, изменяется величина эффективного сопротивления потерь R1 и, следовательно, амплитуда колебаний генератора. Далее сигнал поглощения направляется на синхронный детектор в блок аналоговой обработки.

Сигнал ЯМР спинового детектора через ограничитель и повторитель поступает на синхронный детектор и устройство автопоиска и стабилизации резонансных условий. Опорный сигнал синхронного детектора формируется компаратором и имеет удвоенную частоту модуляции (500 Гц). Напряжение U_s синхронного детектора определяется кривой поглощения и служит индикатором захвата резонансных условий при поиске или мерой намагниченности жидкости при измерении расхода. Сигнал синхронного детектора поступает на детектор резонансных условий. При расстройке резонансных условий в анализаторе (например, после включения прибора) сигнал ЯМР на выходе спинового детектора отсутствует и устройство переключается в режим поиска. Поиск осуществляется сканированием частоты генерации спинового детектора пилообразным напряжением устройства автопоиска и стабилизации нансных условий. В момент прохождения резонансных условий на выходе детектора появляется низкое напряжение, устройство переключается в режим стабилизации. Начинается процесс измерения расхода [3].

Измеренная величина расхода поступает на вход цифрового устройства с последующей индикацией на дисплее или передачей на ЭВМ.

Заключение. Предложенный однокатушечный меточный ЯМР-расходомер временного типа с временным разделением процессов отметки и регистрации за счет сокращения участка размагничивания метки обеспечивает повышение точности измерения малых расходов быстро релаксирующих жидкостей.

Литература

1. Леше, А. Ядерная индукция / А. Леше; пер. с нем. – М.: Изд-во иностран. лит-ры,1963. – 684 с.

2. Оробей, И. О. Первичный преобразователь импульсного ЯМР-спектрометра для систем управления / И. О. Оробей, В. В. Сарока // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2002. – Вып. X. – С. 136–138.

3. Организационно-техническое управление в межотраслевых комплексах: материалы II Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 20–21 нояб. 2007 г. / Бел. гос. технол. ун-т; редкол.: И. М. Жарский [и др.]. – Минск, 2007. – 563 с.

УДК 62-52621.923

А. А. Лялько, ассистент

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ НЕЙРО-НЕЧЕТКИХ СИСТЕМ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ГИБКОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО РЕГЛАМЕНТА ДЕРЕВООБРАБАТЫВАЮЩИХ ПРОИЗВОДСТВ

In given article are considered two directions of increase of productivity the woodworking equipment: synthesis of an adaptive mode of processing of wood and reduction of auxiliary time in a running cycle by optimization of auxiliary operations. At the heart of an adaptive mode of processing of wood the speed control of giving the tool in the conditions of uncertainty parameters of system the rig – the adaptation – the tool – a detail. For construction of model process of cutting wood is used the mathematical apparatus of the theory of fuzzy logic. For management of the basic process – cutting process, uses hybrid technology of adaptive neuro – fuzzy inference system (ANFIS), possessing, in comparison with other methods, high speed of training, simplicity of algorithm. Also in article is considered the question of optimization of auxiliary operations on the basis of synthesis fuzzy control at positioning in a watching mode. Are brought results of modeling of the developed algorithms in system Matlab.

Введение. Автоматическое управление гибкими производствами, оснащенными современным оборудованием, возможно лишь при использовании вычислительной техники с современным программным обеспечением. Сдерживающим фактором на пути переоснащения предприятий автоматическими системами управления производством является отсутствие алгоритмов программного управления деревообрабатывающим оборудованием.

Имеются два основных направления повышения производительности деревообрабатывающего оборудования: синтез оптимальных режимов обработки древесины и сокращение вспомогательного времени в рабочем цикле путем оптимизации вспомогательных операций.

Обработка изделий на деревообрабатывающих станках должна производиться при экономически выгодной скорости резания, отвечающей наилучшему использованию режущего инструмента и станка. Станок, работая с соответствующей подачей и глубиной резания, должен обеспечивать наибольшую производительность при высоком качестве обработки.

Специфика работы современного деревообрабатывающего оборудования заключается в необходимости частых перемещений рабочих органов, позволяющих обеспечить максимальный выход спецификационных пиломатериалов или заготовок заданного размера.

Частые установочные перемещения, даже если они механизированы, являются трудоемкими операциями и занимают значительную долю вспомогательного времени. Сокращение этой доли может быть обеспечено только путем автоматизации установочных перемещений [1].

Основная часть. В зависимости от типа исполнительного механизма и применяемой системы управления точное позиционирование, т. е. перемещение рабочего органа из исходного положения в требуемое с заданной точностью, может осуществляться одним из следующих способов:

1) ограничением пути движения рабочего органа жестким упором или системой взаимосвязанных жестких упоров;

2) автоматическим отключением привода при достижении заданного положения (по команде от датчиков перемещения или сравнивающего устройства);

3) путем плавного снижения скорости от максимальной до нуля по мере уменьшения сигнала рассогласования (позиционирование в следящем режиме).

Первый способ используется в сравнительно простых системах, в которых программоносителем является барабан мерных упоров, или в системах, построенных на базе гидравлических позиционеров. Недостатками этого способа являются ограниченное число позиций и удары на заключительном этапе позиционирования. Второй способ позволяет осуществлять позиционирование в релейном режиме с отключением привода на скорости медленного подвода и получил в деревообрабатывающих станках наибольшее распространение. При позиционировании в следящем (релейном) режиме закон изменения скорости выбирается исходя из двух основных требований к системе: обеспечения необходимой точности остановки в заданном положении и достаточного быстродействия.

Рассмотрим синтез нечеткого управления при позиционировании в следящем режиме. Подход к точке останова может осуществляться при различных нагрузках, что приводит к потере точности при статическом регуляторе положения или к затягиванию процесса останова при наличии астатического регулятора. Противодействовать данному явлению можно с помощью нечеткого регулятора положения (НРП), предназначенного для оптимизации режима позиционирования следящего электропривода, структурная схема которого приведена на рис. 1.

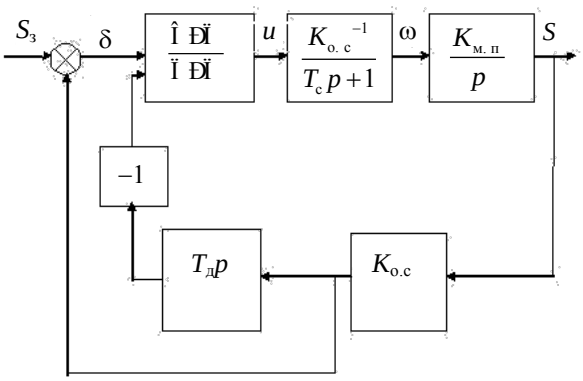


Рис. 1. Структурная схема следящего электропривода с нечетким регулятором положения

Здесь УМК – управляющий микроконтроллер; РП – регулятор положения; Д – двигатель; МП – механическая передача.

Микроконтроллер управляет контуром скорости двигателя (КСД) посредством управляющего напряжения *u*. Контур скорости может быть реализован комплектным электроприводом постоянного или переменного тока. Настройка КСД на модульный оптимум позволяет отобразить его инерционным звеном с постоянной времени $T_с$, а $K_{о.с}$ – это коэффициент обратной связи по скорости двигателя в контуре скорости. Двигатель приводит в движение рабочий орган через механическую передачу (МП) с коэффициентом передачи $K_{м.п}$. Сигнал обратной связи по положению *S* рабочего органа подается на вход следящей системы через звено обратной связи по положению с коэффициентом передачи $K_{о.с}$. Данный сигнал используется также для формирования обратной связи по скорости перемещения рабочего органа с помощью дифференцирующего звена с постоянной времени $T_д$.

Значение рассогласования между заданным положением $S_з$ и сигналом обратной связи по положению $K_{о.п}S$ подается как на основной регулятор положения (ОРП), так и на нечеткий регулятор положения (НРП), а на НРП, кроме того, поступает сигнал обратной связи по скорости рабочего органа, взятый с обратным знаком. Будем далее называть δ – ошибкой по положению.

Поскольку при $S_з = \text{const}$

$$\frac{d\delta}{dt} = -K_{о.ï}\frac{dS}{dt}, \qquad (1)$$

то на вход НРП подается сигнал, который обозначим ε, равный

$$\varepsilon = \delta + T_д\frac{d\delta}{dt}. \qquad (2)$$

Модель непрерывной части следящего привода имеет вид

$$-u(\varepsilon) = T_{св}T\frac{d^2\delta}{dt^2} + T_в\frac{d\delta}{dt}, \qquad (3)$$

где $u(\varepsilon)$ – управляющее напряжение, формируемое на выходе РП; $T_в = \frac{K_{о.с}}{K_{о.п}K_{м.п}}$ – эквивалентный коэффициент вязкого трения, численно равный обратной величине коэффициента усиления разомкнутого контура привода.

Значение $u(\varepsilon)$ при управлении от НРП изменяется по релейному закону следующим образом:

$$\begin{cases} u = U_{зmax} \text{ при } \varepsilon > 0 \\ u = -U_{зmax} \text{ при } \varepsilon < 0 \\ u = 0 \text{ при } |\varepsilon| < \varepsilon_1 \end{cases} \qquad (4)$$

где ε_1 – величина зоны нечувствительности.

Пусть зона нечувствительности ε_1 определяется заданной зоной точностью позиционирования и составляет $\delta = \pm\varepsilon$.

Ограничение, при котором обеспечивается устойчивый останов в заданной точке позиционирования, причем внутри зоны нечувствительности имеет вид

$$|u| < \frac{2\varepsilon T_в}{T_с - T_д}, \quad T_д < T_с. \qquad (5)$$

Полученные соотношения используем в алгоритме построения нечеткого релейного регулятора положения. Величину ε будем рассчитывать по формуле (2).

НРП работает в пределах $|\delta| < \delta_{max}$, где δ_{max} – граничное значение ошибки, определяющее пределы функционирования НРП. В противном случае нечеткий регулятор должен быть автоматически отключен, а вместо него должен быть включен ОРП.

Необходимость в нечетком регуляторе возникла потому, что при подходе к заданному положению величина *S* измеряется малым количеством отсчетов датчика положения, а каждый отсчет занимает относительно соседнего не вполне определенное положение из-за погрешности шкалы датчика. Деления шкалы устанавливаются с некоторой погрешностью, которая имеет случайный характер. Распределение погрешностей измерения положения рабочего органа можно отобразить в виде совокупности нечетких множеств:

$$A_\delta = \{\mu_\delta(\delta), \delta\}, \qquad (6)$$

где $\mu_\delta(\delta)$ – функция принадлежности ошибки позиционирования, которая имеет треугольный вид.

На рис. 2 по оси абсцисс откладываются дискретные значения датчика положения k_i. Предполагается, что максимальная погрешность по положению не превышает дискретной единицы.

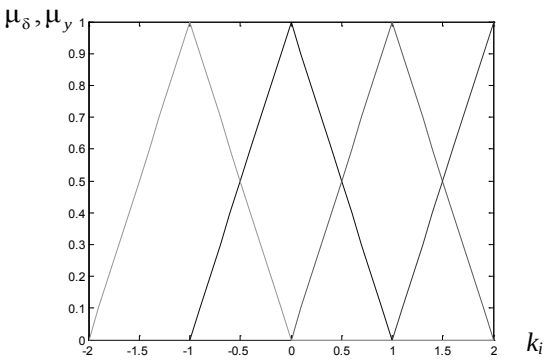


Рис. 2. Функции принадлежности ошибки и скорости изменения ошибки позиционирования

Обозначим скорость изменения ошибки позиционирования через y:

$$y = \frac{d\delta}{dt}. \qquad (7)$$

Функции принадлежности скорости изменения ошибки позиционирования также будут иметь треугольный вид.

Величина ε, рассчитываемая по формуле (2), также является нечетким множеством, представляющим собой сумму двух нечетких множеств A_δ и A_v.

Пример нахождения ε для случая тормозного режима, когда δ и y имеют противоположные знаки, представлен на рис. 3.

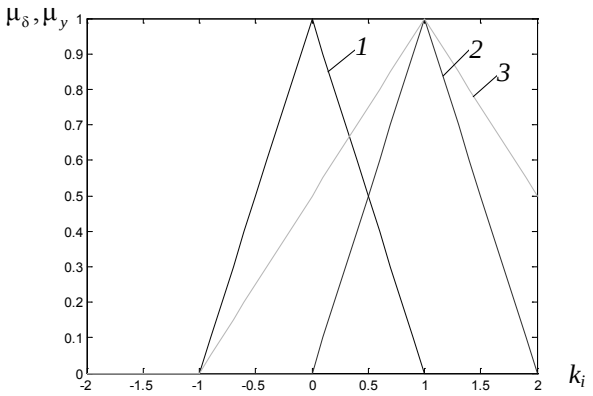


Рис. 3. Нахождения ε для случая тормозного режима: *1* – функция принадлежности скорости изменения ошибки позиционирования; *2* – функция принадлежности ошибки позиционирования; *3* – функция принадлежности $\mu_\varepsilon = \mu_\delta + \mu_y$

Значение ε, на основании которого выбираем сигнал управления u, получаем на выходе блока дефазификации на основании метода центра тяжести.

Дефазификация нечеткого множества по методу центра тяжести осуществляется по формуле [2]:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{k} \alpha_i \mu_A(\alpha_i)}{\int_{\underline{\alpha}}^{\overline{\alpha}} \mu_A(\alpha_i)}. \qquad (8)$$

В нашем случае ε = 0,82.

Для управления основным процессом – процессом резания – используется гибридная технология адаптивной нейро-нечеткой системы заключений (ANFIS), обладающая, по сравнению с другими методами, высокой скоростью обучения, простотой алгоритма и оптимальной проработанностью программного обеспечения в системе математического моделирования Matlab [3].

Проектирование системы управления посредством обучения по некоторому набору входных-выходных данных, требуемому современными алгоритмами нейро-нечеткой идентификации, предполагает наличие тестового регулятора, действие которого в различных схемно-режимных условиях собирается в некоторую базу данных. В качестве тестовой системы регулирования использованы алгоритмы линейно-квадратичного управления, позволяющие достичь компромисса между эффективностью регулирования и величиной сигнала управления, принимая во внимание шум входных и выходных переменных.

Рассмотрим следующую стохастическую модель системы управления:

$$\begin{aligned} X(k+1) &= F_x[X(k)] + B_u(k)U(k) + G_x N_x(k), \\ Y(k+1) &= F_y[X(k)] + G_y N_y(k), \end{aligned} \qquad (9)$$

где $X(k)$ – n-мерный вектор в пространстве состояний; $Y(k)$ – вектор наблюдений; $U(k)$ – вектор управления, $F_x(.)$, $F_y(.)$ – некоторые известные функции своих аргументов; B_u, G_x, G_y – известные матрицы; $N_x(k)$, $N_y(k)$ – вектора гауссовских случайных процессов; $k = 0, 1,..., N$ – индекс дискретизации по времени.

В качестве управляющего воздействия $U(k)$ принимается скорость продольной подачи, мм/об; в качестве вектора $X(k)$ – сила резания; в качестве вектора $Y(k)$ – напряжение на выходе датчика силового параметра.

Модель регулируемого привода в первом приближении представим колебательным звеном второго порядка с передаточной функцией вида

$$W_п = \frac{v(s)}{U(s)} = \frac{k_п}{T_п^2 s^2 + 2\xi T_п s + 1}, \qquad (10)$$

где $v(s)$, $U(s)$ – изображения, по Лапласу, скорости подачи и управляющего напряжения соответственно; $k_п$ – коэффициент передачи привода; $T_п$ – постоянная времени привода; ξ – коэффициент демпфирования.

Для получения математической модели процесса резания фрезерованием рассмотрим, как изменение сил резания связано с параметрами обработки древесины.

Передаточная функция процесса резания фрезерованием по управляющему воздействию имеет следующий вид [4]:

$$W_R = \frac{P(s)}{v(s)} = \frac{k_r}{T_r s + 1}, \qquad (11)$$

где $P(s)$ – лапласово изображение силового параметра; $k_r = c_r(t)$ и $T_r = 1 / n$ – соответственно коэффициенты передачи и постоянная времени процесса резания; t – глубина резания; $c_r(t)$ – функция, определяемая видом стабилизируемого силового параметра, материалом заготовки и инструмента, его геометрией; n – частота вращения шпинделя.

Силовые параметры будем оценивать по току, потребляемому электродвигателем. Исходя из этого модель процесса резания может быть представлена следующим образом:

(12)

где I – ток, потребляемый электродвигателем; $k_{рез}$ – коэффициент пропорциональности; v – скорость резания; h – глубина резания.

Алгоритм управления синтезируется на основе квадратичного критерия качества:

$$J = \sum_{i=1}^{N} [(P(i) - P_0(i))^T R(P(i) - P_0(i)) + U(i)^T QU(i)], \qquad (13)$$

где $P_0(i)$ – параметр, характеризующий требуемые динамические нагрузки; R, Q – известные матрицы.

Оптимальный вектор управления $U(i)^0$ в стохастической системе (9) выбирается из условия:

$$U(k)_0 = \arg\min\ J[X(k),\ U(k)]\ \ U \in \mathrm{U},$$

где U – множество всех допустимых управлений.

Настройка весов адаптивной нейро-нечеткой системы управления осуществляется на основе алгоритма обратного распространения ошибки. На вход объекта управления подается тестовое множество и веса настраиваются таким образом, чтобы разность между реальным выходом объекта управления и выходом нейронной сети была минимальной.

На рис. 4 показан результат моделирования нейро-нечеткой системы управления силой резания при условии, что функция $P_0(i)$ представляет собой прямоугольные импульсы.

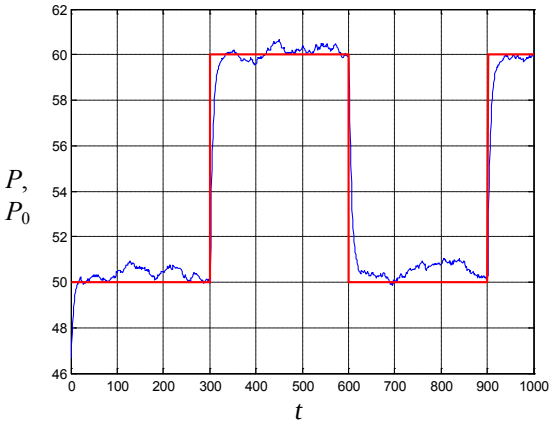


Рис. 4. Результат моделирования нейро-нечеткой системы управления силой резания

Заключение. В данной работе был разработан гибкий регламент управления процессом резания древесины фрезерованием. Для управления установочными перемещениями был разработан алгоритм нечеткого управления при позиционировании в следящем режиме. Для управления основным процессом – процессом резания – была использована гибридная технология адаптивной нейро-нечеткой системы заключений.

Литература

1. Кузнецов, В. М. Автоматизация установочных перемещений в деревообрабатывающих станках / В. М. Кузнецов. – М.: Лесная промышленность, 1981.

2. Штовба, С. Д. Проектирование нечетких систем средствами MATLAB / С. Д. Штовба. – М.: Горячая линия – Телеком, 2007.

3. Jang, J. S. R. ANFIS: Adaptive-Network-Based Fuzzy Inference System / J. S. R. Jang // IEEE Trans. Systems & Cybernetics. – 1993. – Vol. 23.

4. Бейлин, Л. П. Расчет систем стабилизации силового параметра процесса резания / Л. П. Бейлин, А. И. Левин // Станки и инструменты. – 1974. – № 8. – С. 7–10.

УДК 674.093

Д. С. Карпович, доцент; С. С. Карпович, вед. инженер

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ КРУГЛЫХ ДЕРЕВОРЕЖУЩИХ ПИЛ В СТАТИКЕ

In article it is considered questions of research of stability round woodcutting saws in view of application of the concept of superthin cloths of the tool that renders essential influence on behavior of a deviation tooth's saws on the size comparable to size of divorce of serial saws. Functional dependence between a deviation of elements of a saw and geometrical parameters of a saw, and also axial making force of cutting is found.

Введение. Для исследования поведения сверхтонких дереворежущих пил [1] в процессе резания существенное внимание необходимо уделять анализу сил резания и их влиянию на поведение инструмента [2, 3]. Это связано в первую очередь с малой толщиной полотна пилы, в результате чего силы резания могут отклонять зубья сверхтонких пил на величину, сопоставимую с величиной развода серийных пил. При этом рассматриваемый анализ может применяться не только к сверхтонким пилам, но и к серийному инструменту.

Основная часть. Проанализируем силы, действующие на режущие элементы сверхтонких пил. Из-за меньшей толщины опытных пил, большей деформируемости зубчатого венца классическая форма зубьев оказалась малопригодной, в основу концепции режущего венца специальных пил был положен принцип функционального разделения режущих элементов на подрезающие и скалывающие. Зубчатый венец опытных пил по конфигурации и внешнему виду отличается от серийных пил, и эту особенность можно отражать термином «режущий элемент». Профили зубьев и режущих элементов представлены на рис. 1.

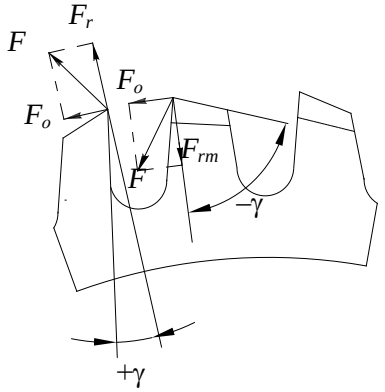


Рис. 1. Профили режущих элементов специальных пил

Режущая кромка лезвийного инструмента испытывает сложное напряженное состояние, с одновременным воздействием на материал режущего клина напряжения сжатия, сдвига, растяжения, изгиба при циклическом нагружении зубьев многолезвийного инструмента.

Для изучения деформируемости сверхтонких пил была изготовлена пила с толщиной полотна в рабочей зоне в пределах 0,6–0,7 мм. В результате испытаний ее на разных оборотах при использовании древесины сосны замерены с помощью щупа данные о ширине пропила, показанные в таблице.

Таблица

Зависимость ширины пропила от частоты вращения шпинделя

Частота вращения, мин$^{-1}$	50	100	400	800	1600
Ширина пропила, мм	2,25	1,8	1,20–1,25	1,1–1,2	0,8

Различия в ширине пропила на входе несущественны и лежат в пределах 0,05–0,10 мм, с тенденцией к уменьшению с увеличением частоты шпинделя. Ширина пропила на выходе пилы значительно зависит от частоты вращения и лежит в пределах 0,80–2,25 мм, что составляет различие в 2,8 раза. Для практической работы важно отметить, что этот параметр контролируемый и на частотах свыше 1600 мин$^{-1}$ обеспечивает высокое качество выполнения операции, что можно видеть на рис. 2. Качество раскроя древесины определяется условиями как входа зубьев в пропил, так и выхода из пропила.

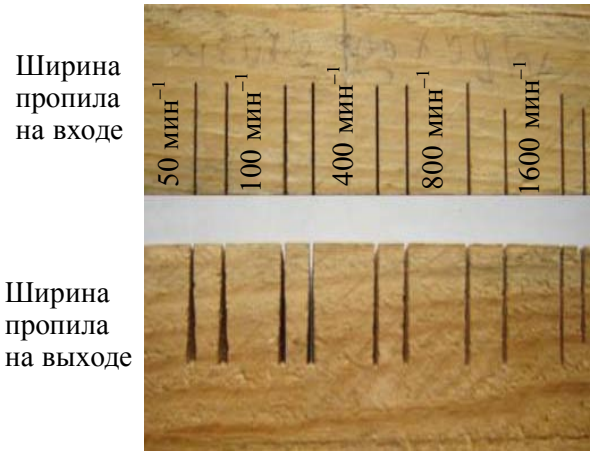


Рис. 2. Ширина пропила при различных частотах вращения шпинделя на входе и выходе пилы

Очевидно, что на величину ширины пропила влияет деформация полотна пилы. Рассмот-

рим сверхтонкую пилу в поперечном сечении. На рис. 3 приведена схема воздействия силы резания на полотно пилы.

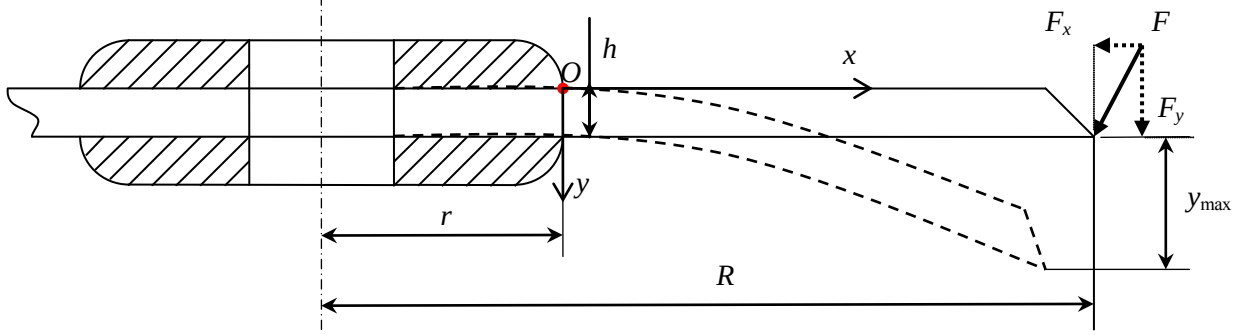


Рис. 3. Сечение круглой дисковой пилы

Величина отклонения полотна пилы y зависит от большого количества факторов: величины проекции силы резания на ось Oy F_y; толщины диска пилы h [4]; радиуса пилы R; материала, из которого выполнена круглая дисковая пила; радиуса зажимных фланцев r; расстояния от точки жесткой фиксации пилы фланцами до точки измерения деформации x.

Для нахождения зависимости между параметрами воспользуемся допущением: закрепление корпуса пилы является консольным по касательной к зажимным фланцам в точке O. Графически это представлено на рис. 4.

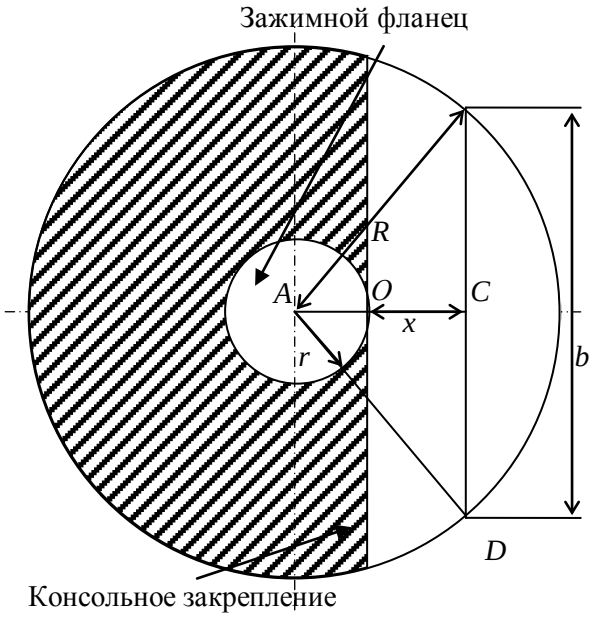


Рис. 4. Геометрическая интерпретация условий решаемой задачи

Изгибающий момент инерции M можно вычислить по формуле

$$M = EI_z(x)\frac{d^2y(x)}{dx^2}, \qquad (1)$$

где E – модуль упругости; $I_z(x)$ – осевой момент инерции; y – величина деформации по оси Oy; x – расстояние от точки жесткой фиксации пилы фланцами до точки измерения деформации.

Осевой момент инерции $I_z(x)$ будет равен

$$I_z(x) = \frac{b(x)h^3}{12}, \qquad (2)$$

где b – величина сечения, находящегося на расстоянии x от линии консольного закрепления.

Для нахождения b рассмотрим прямоугольный треугольник ACD, приведенный на рис. 4. Длина стороны CD равна $b/2$, сторона AC равна сумме отрезков AO и OC, сторона AD равна R. В свою очередь, $AO = r$, а $OC = x$. Тогда

$$\left(\frac{b}{2}\right)^2 + (r+x)^2 = R^2. \qquad (3)$$

Выразим из (3) величину b:

$$b = 2\sqrt{R^2 - (r+x)^2}. \qquad (4)$$

Подставим (4) в (2):

$$I_z(x) = \frac{2h^3\sqrt{R^2-(r+x)^2}}{12} = \frac{h^3\sqrt{R^2-(r+x)^2}}{6}. \qquad (5)$$

Величину изгибающего момента инерции $M(x)$ в уравнении (1) можно найти по формуле

$$M(x) = F_y(R-r), \qquad (6)$$

где F_y – величина силы резания, действующей на изгиб полотна пилы; $(R-r)$ – расстояние от точки приложения силы резания до консольного закрепления.

Подставив уравнения (5) и (6) в (1), получим:

$$F_y(R-r) = E\frac{h^3\sqrt{R^2-(r+x)^2}}{6}\frac{d^2y(x)}{dx^2}. \qquad (7)$$

Преобразуем уравнение (7) в стандартный вид Коши:

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2}=\frac{6F_y\,(R-r)}{Eh^3\sqrt{R^2-(r+x)^2}}. \qquad (8)$$

Для нахождения аналитического решения уравнения (8) примем, что $R >> r$ и уравнение (8) упростится:

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2}=\frac{6F_yR}{Eh^3\sqrt{R^2-x^2}}. \qquad (9)$$

Общее решение уравнения (9) имеет вид

$$y(x)=\frac{6F_yR}{Eh^3}[x\arctan\left(\frac{x}{\sqrt{R^2-x^2}}\right)+$$
$$+\sqrt{R^2-x^2}\,]+C_1x+C_2. \qquad (10)$$

Частное решение из уравнения (10) можно найти, подставив начальные условия:

$$y(x=0)=0,\ \left.\frac{dy(x)}{dx}\right|_{x=0}=0. \qquad (11)$$

Первое выражение означает, что в точке соединения полотна пилы с зажимными фланцами прогиб отсутствует, а второе – отсутствует приращение прогиба в вышеназванной точке. С учетом (11) выражение (10) преобразуется:

$$y(x)=\frac{6F_yR}{Eh^3}\left[x\arctan\left(\frac{x}{\sqrt{R^2-x^2}}\right)+\right.$$
$$\left.+\sqrt{R^2-x^2}-R\right]. \qquad (12)$$

Для анализа адекватности принятых упрощений на рис. 5 приведены графики изменения прогиба полотна круглой пилы по мере приближения к режущим элементам.

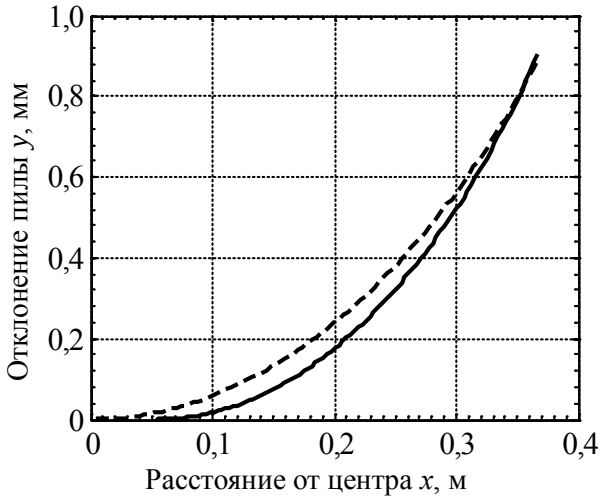


Рис. 5. Сравнение численного (непрерывная линия) и аналитического (пунктирная линия) решений

Исходя из анализа рис. 5, можно сделать вывод о том, что полученное аналитическое выражение (12) может быть использовано для приближенного анализа связи между отклонением полотна пилы и параметрами пилы.

Для определения связи между отдельными секторами пилы была смонтирована установка на базе шпинделя токарного станка 1К62. Этот узел изготавливают с максимально высокой точностью, что исключает случайные погрешности измерений. В кулачках токарного патрона фиксируется цилиндрический хвостовик узла, на котором между фланцами с помощью резьбового соединения закрепляется полотно пилы.

На один из зубов прикладывается нагрузка в осевом направлении и фиксируется величина его смещения в точке воздействия с точностью 0,05 мм. По периметру зубчатого венца установлены индикаторы часового типа с точностью измерения 0,01 мм. Эксперимент повторяли для различных величин нагрузок.

Измерения деформативности зубчатого венца проводились на серийной заводской пиле диаметром 360 мм, толщиной полотна 2,2 мм с числом зубьев 48.

Величина деформации зубчатого венца фиксировалась в точках 0, 0,25*D*, 0,5*D*, 1*D*, отмеченных на рис. 6.

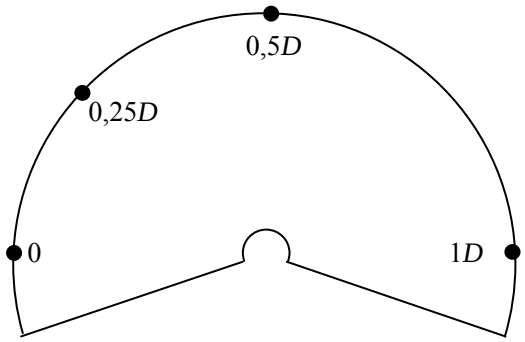


Рис. 6. Точки измерения деформаций

На рис. 7 приведена графическая зависимость величины отклонения от точек периметра для пяти различных нагрузок, отклонявших точку 0 на 0,25; 0,5; 0,75; 1,0 и 1,5 мм последовательно.

По вертикальной оси отложены значения задаваемого осевого смещения зубчатого венца с градацией 0,25; 0,5; 0,75; 1,5 мм, по горизонтальной – вызванные осевые отклонения в точках 0,25*D* (45º), 0,5*D* (90º) 1*D* (180º).

На удалении 0,25*D* (45º) от точки приложения задаваемого смещения величина осевого отклонения зубьев в среднем уменьшается в 4 раза. Эта особенность характерна для всех видов нагрузки. Для последующих точек характер изменения также не зависит от величины нагрузки.

Нулевое отклонение, т. е. мертвая точка, находится на удалении 0,45*D* при всех значениях задаваемого смещения в диапазоне от 0,25 до 1,5 мм. Дальше по диаметру зафиксировано отклонение зубчатого венца в противоположном направлении, эта ситуация обозначалась числом со знаком минус.

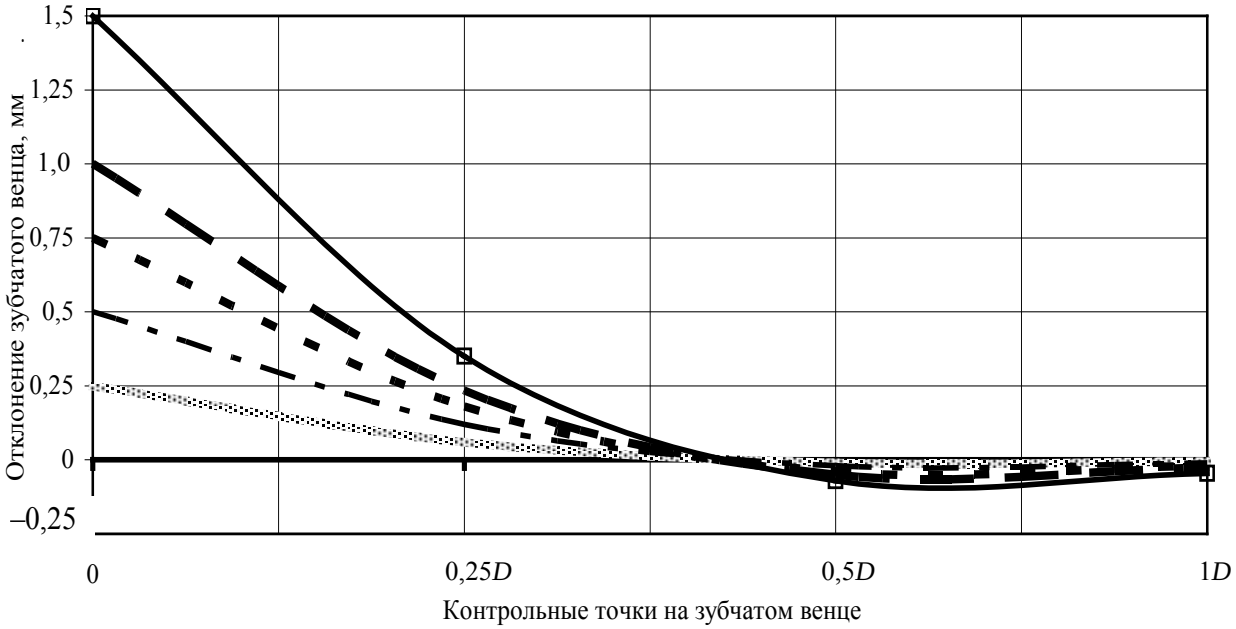


Рис. 7. Влияние величины задаваемого осевого смещения *y* зубчатого венца на положение зубьев в контрольных точках полупериметра серийной пилы (D = 310 мм, h = 3,2 мм, z = 64, r = 100 мм)

В дальнейшем по мере приближения к противоположной точке диаметра пилы (точка 1*D*) величина отклонений имеет тенденцию к уменьшению и приближается к нулевому значению.

Рассмотренная методика оценки деформативности полотна круглых пил характеризуется простотой и возможностью применения в производственных условиях.

Как показали исследования, есть различия в деформативности зубчатого венца круглых пил разного назначения и они фиксируются с высокой точностью. Сравнительный анализ продемонстрировал, что деформативность полотен круглых пил имеет индивидуальный характер. Пилы из одной партии отличаются разными величинами осевых смещений зубьев по периметру при одинаковых условиях нагружения. Это связано не только с погрешностью в геометрических параметрах пил, но и величиной остаточных напряжений в металле полотен пил [5].

Заключение. При определенной толщине полотна пилы осевая составляющая силы резания достигает величины, достаточной для отклонения зуба пилы на величину, сопоставимую с величиной развода.

Выражение (12) дает возможность оценить величину отклонения полотна пилы в зависимости от расстояния от зажимного фланца, диаметра пилы, материала, осевой составляющей силы резания.

Описанная методика оценки деформативной устойчивости круглых пил с учетом влияния частей инструмента друг на друга позволяет определить величины отклонения по периметру инструмента под действием сил резания, действующих на режущие элементы.

Литература

1. Возможности уменьшения энергоемкости процесса резания древесины [Электронный ресурс] / С. С. Карпович [и др.] // Деревообработка: технологии, оборудование, менеджмент XXI века: материалы II Междунар. евраз. симпозиума. – Екатеринбург, 2007. – Режим доступа: http://symposium.forest.ru/article/2007/4_equipment/word/bgtu_10.doc. – Дата доступа: 07.03.2008.

2. Стахиев, Ю. М. Работоспособность плоских круглых пил / Ю. М. Стахиев. – М.: Лесная промышленность, 1989. – 580 с.

3. Стахиев, Ю. М. Устойчивость и колебания плоских круглых пил / Ю. М. Стахиев. – М.: Лесная промышленность, 1977. – 294 с.

4. Санев, В. И. Обработка древесины круглыми пилами / В. И. Санев. – М.: Лесная промышленность, 1980. – 323 с.

5. Якунин, Н. К. Подготовка круглых пил к работе / Н. К. Якунин. – М.: МГУЛ, 2000. – 287 с.

УДК 621.391.26

И. О. Оробей, доцент; Д. А. Гринюк, доцент; С. Е. Жарский, ст. преподаватель;
М. А. Анкуда, ассистент; И. Г. Сухорукова, ассистент

АДАПТИВНЫЙ ФИЛЬТР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРИТЕРИЯ СЕРИЙ

Questions of construction of the adaptive filter sliding average which allow to carry out fine tuning under the current trend without essential increase in requirements to computing capacity his realizing are considered. The filter is based on use of known criterion of series of an estimation stationary trends. The algorithm can be used in measuring technics for processing informative signals, in systems of identification of unknown devices and systems of adaptive management by technological processes.

Введение. Цифровая фильтрация является важнейшей областью цифровой обработки сигналов. В первую очередь цифровые фильтры отличаются высоким качеством формирования частотной характеристики, стабильностью параметров, простотой изменения параметров амплитудно-частотной характеристики и возможностью адаптации параметров фильтра. Наиболее полно эти преимущества используются в таких областях, как подавление различного рода шумов и помех, распознавание речи и, в особенности, для подавления эха в устройствах передачи данных. Различают два основных типа фильтров. Цифровые фильтры с конечной импульсной характеристикой (КИХ) реализуются путем весового суммирования N предшествующих отсчетов входного сигнала. Выходной сигнал фильтра $y(n)$ имеет вид

$$y(n)=\sum_{k=0}^{N} h_k x(n-k),$$

где h_k – весовые коэффициенты фильтра; $x(n-k)$ – отсчеты входного сигнала.

Цифровые фильтры с бесконечной импульсной характеристикой (БИХ) используют входной $x(n-k)$ и выходной $y(n-k)$ сигналы. Выходной сигнал такого фильтра описывается уравнением

$$y(n)=\sum_{k=1}^{M} b_k x(n-k)+\sum_{k=1}^{N} b_k y(n-k),$$

где b_k, a_k – весовые коэффициенты фильтра.

Цифровые фильтры БИХ требуют меньших вычислительных затрат по сравнению с КИХ, однако они имеют нелинейную фазовую характеристику и при определенных условиях становятся неустойчивыми.

Фильтры КИХ при симметричном выборе весовых коэффициентов h_k имеют линейную фазовую характеристику и поэтому находят широкое применение в высококачественной аппаратуре. Если фильтр КИХ используется для децимации (понижения) частоты дискретизации в n раз, то вычислительные затраты также сокращаются в n раз.

Количество звеньев фильтра N возрастает при снижении пульсаций в полосе пропускания, повышении крутизны ската частотной характеристики и увеличении ослабления сигнала в полосе задержания.

Основная часть. Структура КИХ-фильтра удобна для построения алгоритмов адаптивных фильтров. Одним из способов по уменьшению необходимой вычислительной мощности при построении качественных фильтров может явиться своевременное обнаружение стационарных и нестационарных трендов. В качестве такого критерия предложено использовать критерий серий.

В известных способах адаптивной фильтрации для фильтров скользящего среднего с конечной импульсной характеристикой весовые коэффициенты выбирают по вектору ошибки или невязки из перестраиваемой матрицы коэффициентов, которые рассчитывают на основе минимизации ошибок градиентным методом с поисковым определением компонент градиента или вычисляют методом наименьших квадратов [1–8].

Данные способы и основанные на них устройства обладают следующими недостатками. Для реализации алгоритмов оценивания и расчета весовых коэффициентов требуется высокая вычислительная мощность, определяемая размерностью системы уравнений на один шаг при численном интегрировании дифференциальных уравнений для аналоговых фильтров или алгебраических уравнений – для цифровых. Кроме того, фильтр с конечной импульсной характеристикой требует большого объема памяти для хранения усредняемых значений и матрицы весовых коэффициентов. Значительным недостатком известных адаптивных фильтров является ограниченное возрастание точности с течением времени даже при соблюдении в реальном процессе принятой модели шума, а также неустойчивая работа устройств, обусловленная неидентичностью предполагаемых и реальных моделей полезного сигнала и шума. При наличии нескольких локальных экстремумов в функциях ошибок или невязок градиентные методы с поисковым определением компонент градиента могут осуществлять выбор весовых коэффициентов, соответствующих экстремуму, не дающему абсолютно минимального значе-

ния ошибки или невязки. Использование статистических методов определения весовых коэффициентов также не обеспечивает устойчивости работы фильтра в случае нестационарности вероятностных характеристик процесса.

В качестве простого, но надежного средства предложено использовать критерий серий.

Серией называется последовательность однотипных наблюдений, перед и после которой следуют наблюдения противоположного типа или же вообще нет никаких наблюдений [9]. Для последовательности N наблюдений случайной величины y каждое наблюдение значения y_i ($i = 1, 2, \ldots, N$) можно отнести к одному из двух классов, обозначаемых как (+) и (–). Например, при выполнении условия $y_i \geq Y_{ср}$, где $Y_{ср}$ – среднее значение или медиана всей выбранной последовательности y_i, наблюдение можно отнести к классу (+), т. е. к классу наблюдений с ошибкой $e \geq 0$; в противном случае наблюдение относят к классу (–), т. е. к классу наблюдений с ошибкой $e < 0$. Можно модифицировать классификацию наблюдений, отбрасывая наблюдения с ошибкой $e = 0$ или относя такие наблюдения к тому классу, к которому относилось предыдущее наблюдение. В результате образуется последовательность наблюдений (рис. 1).

Наблюдения

+	+	–	+	+	–	+	+	+	–	+	–	–	+	–	–	+	–	–	–
1	2	3	4	5			6	7	8	9	10	11	12						

Серии

Рис. 1. Критерий серий

В этой последовательности из $N = 20$ наблюдений имеется $r = 12$ серий. Число серий, появившихся в последовательности наблюдений, позволяет выяснить, являются ли отдельные результаты статистически независимыми наблюдениями одной и той же случайной величины. Считается, что если последовательность N наблюдений состоит из независимых исходов одной и той же случайной величины, т. е. если вероятность отдельных исходов ((+) или (–)) не меняется от наблюдения к наблюдению, то выборочное распределение числа серий r является случайной величиной, распределенной по нормальному закону [9], со средним значением

$$\mu = \frac{2N^+N^-}{N} + 1, \qquad (1)$$

где N^+, N^- – число исходов, относящихся к классам (+) и (–) соответственно; и дисперсией

$$\sigma^2 = \frac{2N^+N^-(2N^+N^- - N)}{N^2(N-1)}. \qquad (2)$$

При статистической независимости

$$N^+ = N_n^+ = N^- = N_n^- = \frac{N}{2},$$

что позволяет преобразовать среднее значение и дисперсию к виду [9]

$$\mu = \frac{N}{2} + 1, \qquad (3)$$

$$\sigma^2 = \frac{N^2 - 2N}{4(N-1)}. \qquad (4)$$

Более точный расчет для малых значений N приводит к следующим выражениям для среднего числа серий:

$$\mu = \frac{2N^+N^-}{N} + 0{,}5, \qquad (5)$$

$$\mu = \frac{N}{2} + 0{,}5, \qquad (6)$$

которые могут быть использованы вместо формул (1) и (3) соответственно.

Стандартный алгоритм критерия серий после определения μ, σ^2 и r требует задания уровня значимости и сравнения экспериментально определенного числа серий r с границами принятия гипотезы статистической независимости процесса, определяемыми относительно μ по уровню значимости. Если r окажется вне этой области, то гипотезу статистической независимости отвергают с принятым уровнем значимости, иначе процесс считают статистически независимым.

В предлагаемом способе адаптивной фильтрации, алгоритм которого приведен на рис. 2 и 3, использовано определение уровня значимости, соответствующего принятию гипотезы статистической независимости по заданным значениям μ, σ^2 и r, т. е. уровня значимости, соответствующего границам $[\mu - r;\ \mu + r]$. Через уровень значимости или связанные с ним величины можно определить вероятность статистической независимости данных.

Алгоритм способа, представленный на рис. 2, включает операции аналого-цифрового преобразования (АЦП) (блок *1*); наращивания переменной состояния (блок *2*); инициализации начальных установок (блок *3*); расчета среднего и дисперсии для N наблюдений при статистической независимости отсчетов (блок *4*); вычисления весового коэффициента (блок *5*); авторегрессионной фильтрации скользящего среднего (блок *6*); определения ошибки и ее знака (блок *7*); подсчета числа серий (блок *8*); проверки конца наблюдений (блок *9*); наращивания переменной наблюдений при сохранении переменной состояния (блок *10*); определения вероятности статистической независимости (блок *11*); сброса переменной наблюдений с изменением переменной состояния (блок *12*).

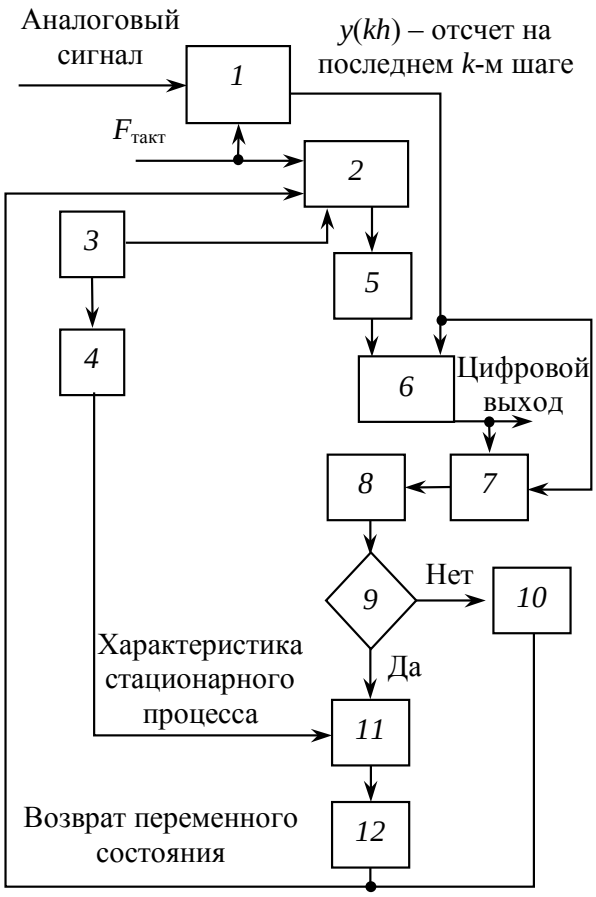


Рис. 2. Структура адаптивного авторегрессионного фильтра скользящего среднего на критерии серий: *1* – АЦП; *2* – наращивание переменной состояния; *3* – инициализация начальных установок; *4* – расчет математического ожидания и дисперсии для *N* наблюдений при статистической независимости отсчетов; *5* – вычисление весового коэффициента; *6* – авторегрессионная фильтрация скользящего среднего; *7* – определение ошибки и ее знака; *8* – подсчет числа серий; *9* – проверка конца наблюдений; *10* – наращивание переменной наблюдения при сохранении переменной состояния; *11* – определение вероятности статистической независимости; *12* – сброс переменной наблюдений с изменением переменной состояния

Сокращение памяти, необходимой для хранения отдельных значений усредняемой величины, в предлагаемом способе достигается использованием авторегрессионного фильтра скользящего среднего с ненулевым значением коэффициента только перед последним значением усредняемой величины (блок *6*) [8]. Весовые коэффициенты перед остальными отдельными отсчетами равны нулю, что исключает необходимость хранения в памяти всех цифровых отсчетов с выхода АЦП (блок *1*), кроме последнего. Пошаговое возрастание точности для последовательности статистически независимых данных, имеющих стационарные вероятностные характеристики, обеспечивается за счет наращивания постоянной состояния фильтра, осуществляемого блоком *2*. При этом снижается весовой коэффициент перед последним цифровым отсчетом и растет вклад в последующую величину среднего значения предыдущего среднего (средних) (блок *5*). Увеличение переменной состояния производится в цикле для каждого значения цифрового отсчета, причем в пределах одной последовательности *N* наблюдений цифровые отсчеты с АЦП принимаются статистически независимыми. Для каждого наблюдения анализируется знак ошибки (блок *7*) и подсчитывается текущее число серий знаков ошибок (блок *8*). В качестве текущего среднего значения или медианы последовательности наблюдений при расчете ошибки используется выходной сигнал авторегрессионного фильтра. В каждом цикле алгоритма проверяется условие достижения *N* наблюдений по значению переменной наблюдений (блок *9*). Если набор последовательности из *N* наблюдений не закончен, то производится наращивание переменной наблюдений (блок *10*)
с последующим переходом к наращиванию переменной состояния, т. е. к блоку *2*. По достижению *N* при проверке конца наблюдений переходят к определению вероятности статистической независимости в законченной последовательности (блок *11*), которая производится сопоставлением экспериментального числа серий *r*, определенного в блоке *8*, с расчетными характеристиками для последовательности *N* наблюдений при их статистической независимости, получаемыми в блоке *4* после инициализации начальных установок (блок *3*). Вероятность статистической независимости умножают на переменную состояния фильтра, округляют полученную величину до ближайшего большего целого значения, которое присваивают переменной состояния фильтра, и сбрасывают переменную наблюдений (блок *12*), после чего переходят к новому набору последовательности *N* наблюдений.

Авторегрессионные фильтры скользящего среднего имеют бесконечную импульсную характеристику. В предлагаемом алгоритме ограниченное время переходного процесса фильтра, реализующего операцию в блоке *6*, обеспечивается за счет снижения весового коэффициента перед предыдущим значением (значениями) среднего при увеличении коэффициента перед последним цифровым отсчетом АЦП, что происходит при изменении переменной состояния по вероятности статистической независимости. В случае получения вероятности, близкой к нулю, коэффициент перед предыдущим значением среднего также приближается к нулю, а коэффициент перед последним цифровым отсчетом АЦП – к единице, что означает использо-

вание в качестве среднего значения фильтра последнего цифрового отсчета.

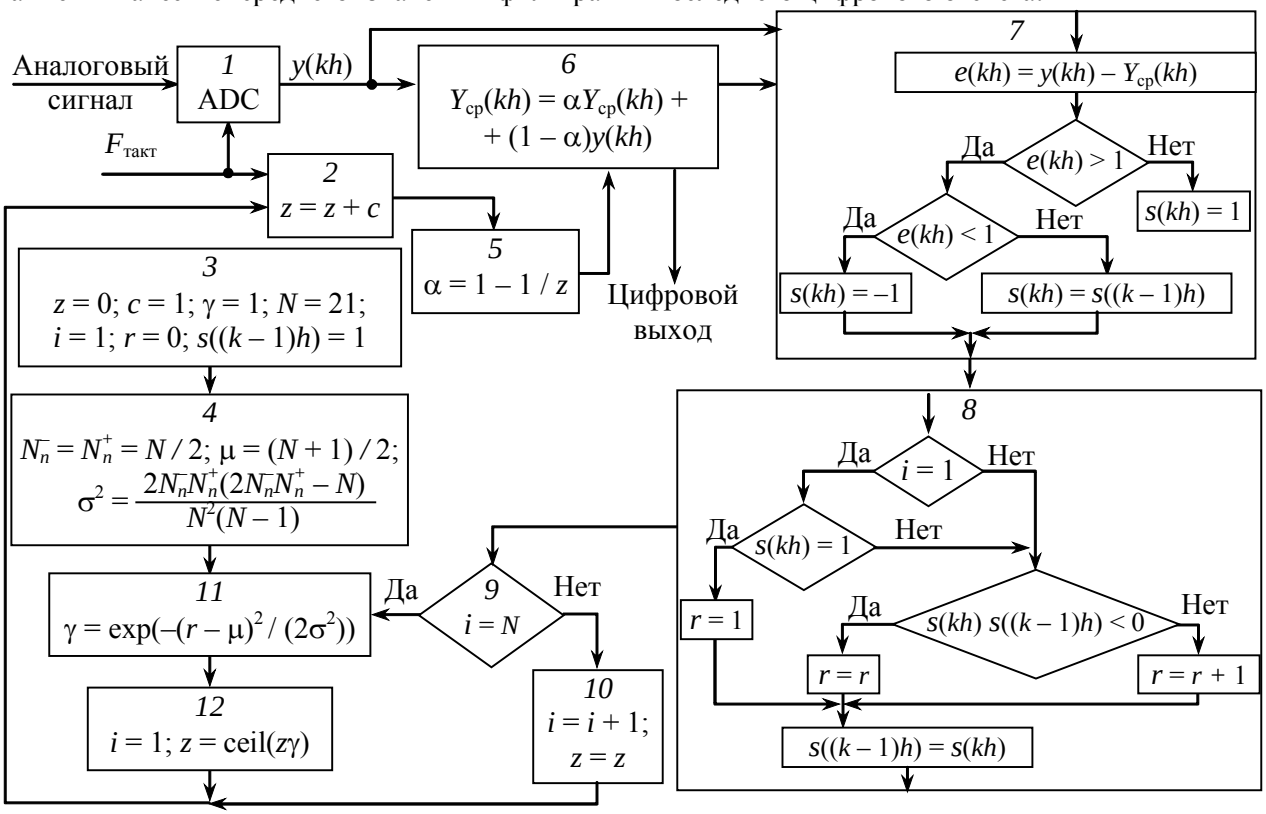


Рис. 3. Один из вариантов алгоритма работы фильтра на основании структуры, приведенной на рис. 2

Статистическая независимость последовательности данных нарушается при появлении нестационарности случайного процесса, т. е. при непостоянстве вероятностных характеристик (например, среднего значения, медианы последовательности и т. д.) случайного процесса, поэтому предлагаемый алгоритм адаптируется к случайным нестационарным процессам в случае, когда спектральные составляющие дрейфа вероятностных характеристик имеют период, превышающий период N наблюдений.

Операцию авторегрессионной фильтрации скользящего среднего выполняет экспоненциальный фильтр, являющийся фильтром первого порядка [10], работа которого определяется уравнением

$$Y_{ср}(kh) = \alpha Y_{ср}((k-1)h) + (1-\alpha)y(kh). \quad (7)$$

Модификация уравнения (7) к виду, приведенному в блоке *6* на рис. 3, связана с экономией памяти за счет среднего значения на предыдущем шаге. Возможность такой модификации обусловлена тем, что $Y_{ср}(kh)$ фактически становится $Y_{ср}((k-1)h)$ с приходом на блок *6* нового цифрового отсчета с АЦП $y(kh)$. Изменение переменной состояния в блоке *12* производится при помощи оператора округления до ближайшего большего целого – ceil. Действие оператора состоит в добавлении единицы к целой части числа в случае, когда дробная часть не равна нулю. Например, ceil(25,1) = 26; ceil(30,6) = 31; ceil(0,1) = 1. Вероятность статистической независимости процесса в блоке *11* определяется как отношение плотности вероятности, соответствующей экспериментальному r, к плотности вероятности, соответствующей среднему числу серий μ, рассчитываемому по формуле (6), при вычисленной по формуле (4) дисперсии σ^2 (т. е. в предположении статистической независимости). Такой критерий вероятности статистической независимости более удобен, так как требует меньше вычислительных средств, чем критерии с непосредственным определением уровня значимости.

Предложенный алгоритм автоподстройки цифровых фильтров может быть использован в измерительной технике для обработки информативных сигналов, в системах идентификации неизвестных устройств и системах адаптивного управления технологическими процессами, в шумоподавителях, эквалайзерах и подавителях сигнала эхо в детекторах модулированных сигналов для систем телеметрии и т. д. Применение адаптивных фильтров выходит далеко за рамки задач передачи данных. Это может быть и обработка видеоизображений, и радиолокационные задачи, и различного рода телекоммуникационные приложения, объединенные общей задачей динамической фильтрации сигнала от вносимых в него шума и искажений.

В рамках данной статьи были показаны лишь основные подходы к проблеме реализа-

ции адаптивных фильтров с использованием критерия серий. Однако даже эти относительно несложные примеры достаточно успешно решают поставленные задачи.

Заключение. Критерий серий позволяет осуществлять эффективную адаптацию параметров цифровых фильтров.

Применение критерия серий не увеличивает существенные требования к вычислительной мощности микропроцессорных устройств его реализующих.

Использование алгоритма не требует наличия существенной априорной информации о стохастических свойствах фильтруемого сигнала. Наличие нормального распределения не является обязательным условием.

Литература

1. Adaptive filter, step size control method thereof, and record medium therefor: United States pat. № 6223194 CIC6 H03H 21/00; G06F 017/10 / Shin'ichi Koike, Assignee NEC Corporation (Tokyo, JP); appl. № 09/095,103; fil. 10.06.1998; pub. 24.04.2001.

2. Method for adaptive filter adjustment in a QAM/CAP system: United States pat. № 6381623; CIC6 H04L 25/49; H04L 25/03; G06F 017/10 / Heinrich Schenk; Assignee Siemens Aktiengesellschaft (Munich, DE); appl. № 09/326,365; fil. 04.06.1999; pub. 30.04.2002.

3. Adaptive digital filter: United States pat. № 5987485; CIC5 H03H 21/00; G06F 017/10 / Spreadbury; David John; Assignee Ionica International Limited (Cambridge, GB); appl. № 08/809,132; fil. 28.04.1997; pub. 16.11.1999.

4. Method for optimizing an adaptive filter update coefficient: United States pat. № 5276707 / CIC5 H03H 21/00; H03H 007/30 / Kevin L. Baum; assignee Motorola, Inc. (Schaumburg, IL); appl. № 08/040,064; fil. 30.03.1993; pub. 04.01.1994.

5. Digital adaptive filter for a high throughput digital adaptive processor Laurence: United States pat. № 4726036; CIC5 H03H 21/00; H04B 003/14 / D. Sawyer, Patrick J. Smith; assignee Unisys Corporation (Blue Bell, PA); appl. № 07/030,302; fil. 26.03.1987; pub. 16.03.1988.

6. Способ адаптивной фильтрации и устройство для его осуществления: пат. 9322 Респ. Беларусь, МПК7 G01F17/10, H04B1/10 / И. О. Оробей, С. Е. Жарский, Д. А. Гринюк, И. Ф. Кузьмицкий, Д. А. Медяк, В. В. Сарока, М. Ф. Лукашевич; заявитель БГТУ № a 0002317; заявл. 11.12.2003; опубл. 30.06.2005 // Афіцыйны бюл. / Дзярж. Пат. Ведамства Респ. Беларусь. – 2006. – № 1. – С. 16.

7. Справочник по теории автоматического управления / под ред. А. А. Красовского. – М.: Наука, 1987. – 712 с.

8. Method and apparatus for adaptive filter tap selection according to a class: United States pat. № 6192161, CIC6 H04N 7/64; G06T 5/20 / Tetsujiro Kondo, Yasuhiro Fujimori, Sugata Ghosal, James J. Carrig, Assignee Sony Corporation (Tokyo, JP); appl. № 09/249,491; fil. 12.02.1999; pub. 20.02.2001.

9. Бендат, Дж. Прикладной анализ случайных данных / Дж. Бендат, А. Пирсол. – М.: Мир, 1989. – 540 с.

10. Олссон, Г. Цифровые системы автоматизации и управления / Г. Олссон, Д. Пиани. – СПб.: Невский Диалект, 2001. – 557 с.

УДК 663.52-007.5

Н. И. Ульянов, аспирант; И. Ф. Кузьмицкий, доцент

СИНТЕЗ АДАПТИВНОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССОМ БРАГОРЕКТИФИКАЦИИ

Article is devoted to synthesis of an adaptive control system by non-stationary objects with delay. Synthesis of adaptive systems of automatic control by quality of a product and economy of power resources and productivity with the help of the second method of Lyapunov is carried out. The object of management has essential transport delay and variable factor of transfer. For management of similar objects of the most effective are, the systems containing linear predictor Smith and providing reorganization of the managing device at changes of factor of transfer of object. The received algorithm of adaptation is physically sold. The example of application of the given algorithm for object of the management described by the equation of 2-nd order is resulted.

Введение. В настоящее время является актуальным создание систем управления технологическими объектами, оптимально использующими на каждом режиме своего функционирования все имеющиеся ресурсы (энергетические, информационные, вычислительные и др.) для достижения главной для данного режима цели при наличии множества ограничений. В полной мере это относится и к системам управления для процесса брагоректификации, для которого подлинная оптимизация возможна только в процессе функционирования, так как учитывает текущее состояние и возникшие изменения.

Брагоректификационная установка (БРУ) является сложным нелинейным, нестационарным, многомерным и многосвязным объектом управления. Поэтому для эффективного управления БРУ необходимо применять нелинейное многосвязное управление. Без этого невозможно обеспечить максимально предельные значения эксплуатационных параметров (время переходных процессов, удельный расход теплоносителя, хладагента и т. д.) и максимально задействовать функционирование всей БРУ в целом.

Важно, что технологический поток между колоннами БРУ находится в жидком состоянии и, следовательно, между колоннами нет связи по паровому потоку. Это существенно ослабляет влияние последующих колонн на режим предыдущей колонны. Благодаря указанным обстоятельствам каждую колонну (со своим дефлегматором и конденсатором) можно рассматривать как отдельный объект управления (ОУ), что в значительной мере упрощает анализ и синтез системы регулирования.

Особенностью ОУ в технологическом процессе брагоректификации является наличие транспортного запаздывания. Присутствие в ОУ запаздывания осложняет решение задачи стабилизации управляемых параметров и снижает качественные показатели автоматических систем регулирования. В целях построения высокоточных систем управления необходимо учесть эффект транспортного запаздывания объекта на этапе проектирования.

Существует много методов управления нестационарным объектом с транспортным запаздыванием. Среди множества методов управления широкое применение получили метод Смита и методы оптимального управления.

Суть метода Смита состоит в том, что, кроме главной обратной связи, в системе управления дополнительно используется одна отрицательная и одна положительная связи, охватывающие регулятор. Особенностью дополнительных связей является то, что в цепь отрицательной связи включена модель объекта без запаздывания, а в цепь положительной обратной связи – модель объекта с запаздыванием. Использование сигнала на выходе модели объекта без запаздывания позволяет регулятору прогнозировать будущее поведение системы. Эти системы получили название систем с упредителем Смита [1].

Различные подходы развиты для решения задач синтеза адаптивных систем управления нестационарными объектами с запаздыванием. Используемые методы могут быть основаны на минимизации критерия качества, на теории гиперустойчивости или теории устойчивости Ляпунова.

Основная часть. Анализ известных методов синтеза системы автоматического управления (САУ) с позиции применения для управления качеством продукта и экономии энергоресурсов на стадии ректификации в производстве ректификованного этилового спирта позволяет сделать вывод о том, что каждый из них дает удовлетворительные результаты лишь в случае совокупности свойств, присущих стадии ректификации, а это значит, что они разработаны недостаточно.

Для идентификации ОУ в рамках АСУТП на стадии ректификации в процессе производства этилового спирта на базе персонального компьютера использовался один из вариантов компенсационного метода. В этом случае математического описания сигнала не требуется. Быстродействие компенсационного метода зависит в основном от начального состояния модели и скорости сходимости алгоритма оптимизации функционала качества. Точность этого метода состоит в том, что входное воздействие $U(t)$ подается на вход идентифицируемого ОУ и его модель (МО) (рис. 1).

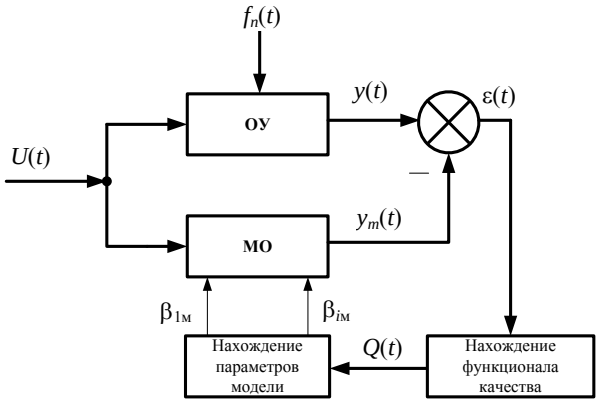


Рис. 1. Схема системы, реализующий компенсационный метод

Структура МО с настраиваемыми параметрами $\beta_{iм}$ подобна структуре реального ОУ, на который действует неконтролируемое возмущение $f_n(t)$. Выходной сигнал объекта $y(t)$ сравнивается с сигналом выхода модели $y_м(t)$, и в соответствии с выбранным функционалом качества, зависящим от ошибки $\varepsilon(t) = y(t) - y_м(t)$, осуществляется настройка параметров модели. В этом методе недостаточность информации об объекте компенсируется в результате настройки параметров модели. Для оценки степени соответствия модели реальному объекту используется, например, функционал вида

(1)

где T – интервал квазистатики объекта.

Чем меньше величина $Q(t)$, тем точнее с точки зрения этого критерия модель отражает реальный процесс. Решение задачи уточнения модели объекта при неудовлетворительных оценках неизбежно приводит к нахождению параметров $\beta_{iм}$ из условия минимума выбранного функционала. Для этого применяются, как правило, поисковые методы. Алгоритм нахождения оптимального значения вектора β, соответствующего минимуму $Q(\beta)$, задается формулой

(2)

где k – номер шага; $R(k)$ – матрица.

Элементы матрицы $R(k)$ зависят от числа шагов k и вектора β $(k - 1)$. Если выполняются условия сходимости итеративного процесса, то вектор β стремится к β^0, соответствующему точке минимума функционала $Q(\beta)$ при

Рассматриваемый объект управления качеством продукта и экономии энергоресурсов на стадии ректификации в производстве ректификованного этилового спирта по каналу управления «расход греющего пара – концентрация этилового спирта в полупродуктах (готового продукта)» можно отнести к виду объектов с одним входом и транспортным запаздыванием в управлении.

Для бражной колонны (БК) БРУ в качестве канала управления выбираем канал «расход греющего пара – концентрация этилового спирта в бражном дистилляте». Для эпюрационной колонны (ЭК) БРУ в качестве канала управления принимаем канал «расход греющего пара – концентрация этилового спирта в эпюрате». Для ректификационной колонны (РК) БРУ в качестве канала управления выбираем канал «расход греющего пара – концентрация этилового спирта в ректификате» [2].

Проведем синтез адаптивной системы автоматического управления (АСАУ) качеством продукта и экономией энергоресурсов с помощью метода функционала Ляпунова – Красовского. Объект управления имеет существенное транспортное запаздывание и переменный коэффициент передачи. Для управления подобными объектами наиболее эффективными являются системы, содержащие линейный упредитель Смита и обеспечивающие перестройку управляющего устройства при изменениях коэффициента передачи объекта.

Пусть динамика участка канала управления, включающего ОУ и усилитель с перестраиваемым коэффициентом передачи $K_с(t)$, описывается следующим уравнением:

, (3)

где $y(t)$ – выходная координата объекта; a_i – постоянные коэффициенты; $K(t)$ – переменный коэффициент передачи объекта; $U(t - \tau)$ – управляющее воздействие.

В этом случае модель ОУ, используемая в упредителе Смита, описывается формулой

, (4)

где $y_м(t)$ – выходная координата модели; a_i, $K_м$ – постоянные коэффициенты модели.

Изменение $K(t)$ ОУ должно компенсироваться изменением переменного коэффициента $K_с(t)$. Ставится задача синтеза алгоритма самонастройки коэффициента $K_с(t)$, обеспечивающего устойчивость движения объекта относительно движения модели. При этом предполагается, что справедлива гипотеза квазистационарности.

Синтез АСАУ выполним следующим образом. Обозначим ошибку рассогласования между выходными координатами модели и объекта через $\varepsilon(t)$:

(5)

Вычитая (4) из (3), получим уравнение относительно координатного рассогласования $\varepsilon(t)$:

$$\varepsilon^{(n)}(t) + \sum_{i=0}^{n-1} a_i \varepsilon^{(i)}(t) = \gamma U(t - \tau), \qquad (6)$$

где $\gamma = K_м - K_с(t)K(t)$.

Если система, описываемая уравнением (6), наблюдаема, то ее можно привести к нормальному виду, введя следующие обозначения:

$$x_1 = \varepsilon(t);\;\; x_{i+1} = \dot{x}_i(t),\;\; i = 1, 2, ..., n-1;$$

$$\dot{x}_n = -\sum_{i=0}^{n-1} a_i x_i + \gamma U(t-\tau).$$

С учетом введенных обозначений представим выражение (6) в виде

$$\dot{X}(t) = AX(t) + U(t-\tau), \qquad (7)$$

где $X(t) = [x_1(t),\;\; x_2(t),\;\; ...,\;\; x_n(t)]$;

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & 1 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ -a_0 & -a_1 & -a_2 & ... & -a_{n-1} \end{bmatrix};$$

$$U(t-\tau) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ ... \\ \gamma U(t-\tau) \end{bmatrix}.$$

Алгоритм адаптации определим из условия устойчивости движения объекта относительно движения модели. Для решения задачи применим метод Ляпунова – Красовского. Для системы (7) построим функционал в виде

$$V = KX^T PX + \lambda_1 \gamma^2 + \lambda_2 \int_{t-\tau}^{t} U^2(\sigma) d\sigma, \qquad (8)$$

где P – постоянная положительно определенная симметричная матрица размерности $n \times n$; λ_1, λ_2 – положительные числа.

Из уравнения (8) видно, что V является положительно определенным и удовлетворяет всем требованиям теоремы Н. Н. Красовского. Полная производная по времени от V на решениях системы (7) имеет вид

$$\dot{V} = K\dot{X}^T PX + KX^T P\dot{X} + 2\lambda_1 \gamma\dot{\gamma} + \lambda_2 \times$$

$$\times \left(\int_{t-\tau}^{t} U^2(\sigma) d\sigma \right). \qquad (9)$$

Выполнив промежуточные преобразования слагаемых уравнения (9), можно записать:

$$\dot{V} = KX^T (A^T P + PA) X +$$

$$+\; 2K\gamma U(t-\tau) \sum_{i=1}^{n} x_i P_{ni} + 2\lambda_1 \gamma\dot{\gamma} +$$

$$+\; \lambda_2 U^2(t) - \lambda_2 U^2(t-\tau). \qquad (10)$$

Если матрица A является гурвицевой, то имеет место следующее равенство:

$$A^T P + PA = -Q, \qquad (11)$$

где Q – положительно определенная матрица.

С учетом (11) выражение (10) примет вид

$$\dot{V} = -KX^T QX + 2K\gamma \times$$

$$\times\; U(t-\tau) \sum_{i=1}^{n} x_i P_{ni} + 2\lambda_1 \gamma\dot{\gamma} +$$

$$+\; \lambda_2 U^2(t) - \lambda_2 U^2(t-\tau). \qquad (12)$$

Устойчивость процесса перестройки $K_c(t)$ будет обеспечена, если производная $V \le 0$. Она будет отрицательно определенной всюду, если, как видно из (12), соблюдаются следующие условия:

(13)

$$-KX^T QX + \lambda_2 U^2(t) - \lambda_2 U^2(t-\tau) \le 0. \qquad (14)$$

Для выполнения условия (13) достаточно, чтобы было справедливо равенство

$$\dot{\gamma} = -\frac{K}{\lambda_1} U(t-\tau) \sum_{i=1}^{n} x_i P_{ni}. \qquad (15)$$

На практике функция управления $U(t)$ ограничена, поэтому всегда можно выбрать такой коэффициент $\lambda_2 \ge 0$, что условие (14) выполняется.

Рассмотрим неравенство (14). Для квадратичной формы справедливо следующее соотношение:

$$\eta_1 \|X(t)\|^2 \le X^T(t) QX(t) \le \eta_2 \|X(t)\|^2, \qquad (16)$$

где

$$\eta_1 = \min_i r_i(Q),\;\; i = 1, 2, ..., n; \qquad (17)$$

$$\eta_2 = \max_i r_i(Q),\;\; i = 1, 2, ..., n. \qquad (18)$$

В (17) и (18) через $r_i(Q)$ обозначены вещественные собственные числа матрицы Q, которые являются положительными числами в силу положительной определенности матрицы Q.

Аналогично можно показать:

(19)

$$\lambda_2 \eta_5 \|X(t)\|^2 \le \lambda_2 U^2(t-\tau) \le \lambda_2 \eta_6 \|X(t)\|^2, \qquad (20)$$

где

$$\eta_3 = \min_t U^2(t) \min_j r_j(P); \qquad (21)$$

$$\eta_4 = \max_t U^2(t) \max_j r_j(P); \qquad (22)$$

$$\eta_5 = \min_t U^2(t-\tau) \min_j r_j(P); \qquad (23)$$

$$\eta_6 = \max_t U^2(t-\tau) \max_j r_j(P). \qquad (24)$$

Поскольку

$$\min_t U^2(t) = \min_t U^2(t-\tau), \qquad (25)$$

$$\max_t U^2(t) = \max_t U^2(t-\tau), \qquad (26)$$

то можно записать:

$$\eta_3 = \eta_5, \ \ \eta_4 = \eta_6. \qquad (27)$$

Тогда для выражения (14) достаточно, чтобы:

$$-\eta_1 \|X(t)\|^2 + \lambda_2\eta_4 \|X(t)\|^2 - \lambda_2\eta_3 \|X(t)\|^2 \le 0, \qquad (28)$$

$$\eta_1 + \lambda_2\eta_3 = \lambda_2\eta_4. \qquad (29)$$

Таким образом, λ_2 выбирается так, чтобы оно удовлетворяло соотношению

(30)

Предполагается, что на интервале рассмотрения ОУ справедлива гипотеза квазистационарности его коэффициента усиления:

$$\dot{K}(t) \approx 0. \qquad (31)$$

Из уравнения (15) и с учетом условия (31) получим алгоритм перестройки $K_c(t)$:

(32)

Полученный алгоритм (32) физически реализуем. На рис. 2 представлена структурная схема АСАУ с упредителем Смита, реализующая алгоритм (32).

Характерной особенностью БРУ косвенного действия является то, что они представляют собой последовательное соединение нескольких колонн (бражной, эпюрационной и ректификационной). И хотя каждую колонну можно рассматривать как отдельный ОУ, обладающий детектирующими свойствами, в ряде случаев необходимо учитывать статические и динамические характеристики цепочки колонн. Это необходимо при разработке систем автоматизации, предусматривающих автоматическое согласование режимов отдельных колонн, а также при синтезе АСАУ установкой в целом [3].

Связь между колоннами БРУ осуществляется по продуктовым потокам. Уровень эпюрата в нижней части эпюрационной колонны является естественным индикатором материального равновесия потоков в установке. Поэтому при разработке системы автоматизации, обеспечивающей автоматическое согласование режимов колонн БРУ, следует располагать статической и динамической характеристиками по каналу «расход бражки – уровень эпюрата» [3].

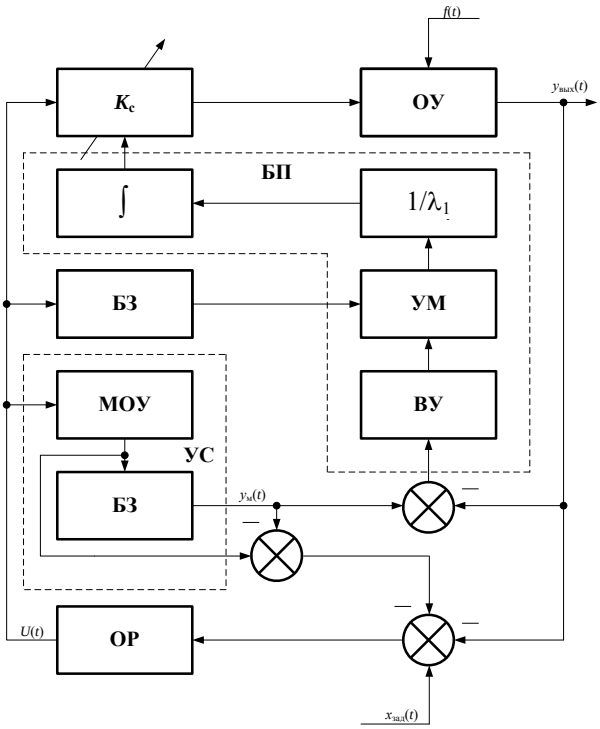


Рис. 2. Структурная схема АСАУ, синтезированная методом функционала Ляпунова – Красовского: ОР – основной регулятор; БЗ – блок задержки; МОУ – модель ОУ без запаздывания; ∫ – интегратор; K_c – усилитель с перестраиваемым коэффициентом усиления; ОУ – ОУ с временным запаздыванием τ; $1/\lambda_1$ – усилитель с коэффициентом усиления; УМ – умножитель сигналов; ВУ – вычислительное устройство, вычисляющее сумму; БП – блок подстройки; УС – упредитель Смита; $x_{зад}(t)$ – вход ОУ; $y_{вых}(t)$ – выход ОУ; $y_м(t)$ – выход модели ОУ; $U(t)$ – управляющий сигнал

Проведем синтез АСАУ производительности БРУ с помощью метода функционала Ляпунова – Красовского. Объект управления имеет существенное транспортное запаздывание и переменный коэффициент передачи. Для управления подобными объектами наиболее эффективными являются системы, содержащие линейный упредитель Смита и обеспечивающие перестройку управляющего устройства при изменениях коэффициента передачи объекта.

Алгоритм адаптации аналогичен предыдущему. Структурная схема АСАУ, содержащая линейный упредитель Смита и обеспечивающая перестройку коэффициента усиления модели ОУ, согласно определенному алгоритму адаптации, представлена на рис. 3.

Структурная схема АСАУ производительности, представленная на рис. 3, позволяет повысить точность управления продуктовыми потоками всей БРУ косвенного действия в целом.

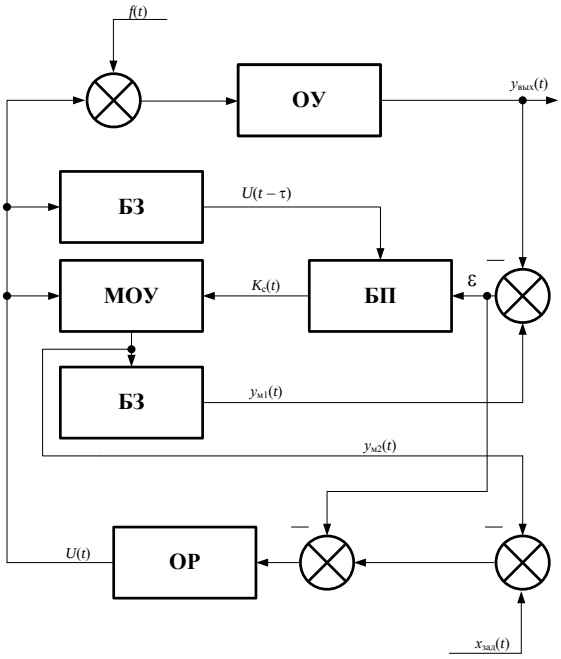


Рис. 3. Структурная схема АСАУ, синтезированная методом функционала Ляпунова – Красовского: ОР – основной регулятор; БЗ – блок задержки; МОУ – модель ОУ без запаздывания; БП – блок подстройки; ОУ – ОУ с временным запаздыванием τ; $K_c(t)$ – перестраиваемый коэффициент усиления; $x_{зад}(t)$ – вход ОУ; $y_{вых}(t)$ – выход ОУ; $y_{м1}(t)$ – выход модели ОУ с временным запаздыванием; $y_{м2}(t)$ – выход модели ОУ без запаздывания; ε – величина рассогласования; $U(t)$ – управляющий сигнал; $U(t-\tau)$ – управляющий сигнал, предшествующий на время τ

Заключение. Приведем пример применения данного алгоритма для ОУ, описываемого уравнением 2-го порядка:

$$= K_c K(t) U(t-\tau), \qquad (33)$$

где T_1, T_2 – постоянные времени объекта фиксированы и известны; K_c – перестраиваемый коэффициент; $K(t)$ – коэффициент объекта неизвестен, причем предполагается, что в течение переходного процесса производная $K(t) \approx 0$.

Модель в линейном упредителе Смита описывается уравнением

$$= K_м(t) U(t-\tau). \qquad (34)$$

Уравнение относительно ошибки рассогласования $y(t)$ и $y_м(t)$ имеет вид

(35)

где $a_0 = \dfrac{1}{T_1 T_2}$; $a_1 = \dfrac{T_1 + T_2}{T_1 T_2}$.

Введя следующие обозначения:

$$X_1 = \varepsilon; \quad X_2 = \dot{X}_1;$$

$$\dot{X}_2 = -a_1 \dot{\varepsilon} - a_0 \varepsilon + a_0 \gamma U(t-\tau),$$

представим уравнение (35) в виде

$$\dot{X}(t) = AX(t) + U(t-\tau). \qquad (36)$$

Функционал Ляпунова – Красовского выберем в виде формулы (9).

Условие (13) примет следующий вид:

$$2\gamma a_0 K(t) U(t-\tau) \sum_{i=1}^{n} x_i P_{ni} + 2\lambda_1 \gamma \dot{\gamma} \le 0.$$

Алгоритм перестройки $K_c(t)$ будет иметь вид

Элементы матрицы Q выражаются следующим образом через элементы матрицы P:

$$\begin{cases} q_1 = 2a_0 P_{21} \\ q_2 = -2(a_1 P_{22} - P_{21}) \\ P_{11} = a_1 P_{21} + a_0 P_{22} \end{cases}$$

Элементы матрицы P выбираются из условий

$$\begin{cases} P_{21} \ge 0 \\ P_{22} \ge \max\left(\dfrac{-a_1 + \sqrt{a_1^2 + 4a_0}}{2a_0} \dfrac{1}{a_1} \right) \\ P_{11} = a_1 P_{21} + a_0 P_{22} \end{cases}$$

Собственные числа матрицы Q:

$$\begin{cases} r_1(Q) = 2a_0 P_{21} \\ r_2(Q) = 2(a_1 P_{22} - P_{21}) \end{cases}$$

Таким образом, с помощью указанной выше методики могут быть определены области изменения параметров алгоритма самонастройки.

Литература

1. Кузьмицкий, И. Ф. Теория автоматического управления: учеб. пособие для студентов, специализирующихся в области автоматического управления техническими системами / И. Ф. Кузьмицкий, Г. Т. Кулаков. – Минск: БГТУ, 2006. – 476 с.

2. Ульянов, Н. И. Исследование основных каналов управления процессом брагоректификации и разработка их динамических моделей / Н. И. Ульянов // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 118–121.

3. Мандельштейн, М. Л. Автоматические системы управления технологическим процес-

УДК 681.3:665.6

И. Ф. Кузьмицкий, доцент; В. В. Лихавицкий, ассистент;
Чжай Лэй, магистрант; Го Лицзе, магистрант

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОЦЕССА РЕКТИФИКАЦИИ НЕФТИ

For application of the common principles of the theory of management to management of technological processes it is necessary to present them, as objects of the management, current determining it and describing a condition at the moment of time. The dynamic system which characteristics change under influence of revolting and managing influences refers to a so bject of management.

Введение. Ректификационная колонна, в которой отбензиненная нефть подвергается разделению на целевые фракции, является важнейшим аппаратом во всем цикле нефтепереработки. От эффективного управления колонной повышается качество и количество получаемых продуктов разделения: бензина и мазута. Повышение эффективности управления колонной может быть достигнуто улучшением показателей качества переходных процессов в системах автоматического регулирования основных технологических параметров путем оптимальной настройки автоматических регуляторов. При этом первым и важным этапом решения данных задач является анализ потоков информации об объекте управления и определение основных характеристик параметров процесса и взаимосвязей между ними. В настоящее время в Республике Беларусь на нефтеперерабатывающих предприятиях не существует математических моделей ректификационных колонн, которые бы с достаточной точностью могли использоваться для систем автоматического регулирования.

Основная часть. В качестве объекта управления рассматривается ректификационная колонна К-102. Аналитически получить математическую модель не представляется возможным, поскольку данная колонна является нестационарным объектом с распределенными параметрами. Одним из методов определения параметров математической модели является обработка данных нормальной эксплуатации. Определим основные входные и выходные информационные потоки.

1. Входные параметры x_i ($i = 1, 2, ..., n$): расход нефти (F), температура нефти (t_f).

2. Управляющие параметры u_k ($k = 1, 2, ..., r$): давление в колонне (P), расход верхнего циркуляционного орошения (ЦО) (S_1), расход 1-го ЦО (S_2), расход 2-го ЦО (S_3), температура верха колонны (t_1), температура 1-го ЦО колонны (t_2), температура 2-го ЦО колонны (t_3), температура низа колонны ($t_н$), расход фракции 140–180 (W_1), расход фракции 180–230 (W_2), расход фракции 230–360 (W_3).

3. Выходные параметры y_j ($j = 1, 2, ..., m$): температура 98% выкипания фракции 140–180 (T_1), температура 98% выкипания фракции 180–230 (T_2), температура 50% выкипания фракции 230–360 (T_3).

Примем в качестве вектора выходов вектор

$$y = (y_1, y_2, y_3) = (T_1, T_2, T_3).$$

Вектор управления имеет вид

$$u = (u_1, u_2, u_3) = (W_1, W_2, W_3).$$

С целью получения временных динамических характеристик мы будем обрабатывать параметры качества выходных продуктов процесса ректификации. Под качеством мы понимаем температуры 98% выкипания бензинов: верхнего T_1, среднего T_2 и нижнего T_3.

При расчете значений $y(t)$ с временем выборочного наблюдения за процессом 1 сут и интервалом времени между точками наблюдений 40 с принято общее количество ординат всех случайных процессов 2000 измерений.

Рассматривается связь между входной величиной $x = x(t)$ и выходной $y = y(t)$ в виде дифференциального уравнения [1]:

$$a_n \frac{d^n y(t)}{dt^n} + a_{n-1} \frac{d^{n-1} y(t)}{dt^{n-1}} + ... + a_0 y(t) =$$

$$= b_m \frac{d^m x(t)}{dt^m} + b_{m-1} \frac{d^{m-1} x(t)}{dt^{m-1}} + ... + b_0 x(t), \qquad (1)$$

где $a_0, a_1, \ldots, a_n, b_0, b_1, \ldots, b_m$ – коэффициенты (постоянные или переменные во времени); n, m – целые числа ($n \geq 0$, $m \geq 0$, $n \geq m$); $y(t)$, $x(t)$ – соответственно выход и вход системы (звена). Если в объекте имеется чисто е запаздывание, то $x = x(t - \tau)$.

При принятых выше допущениях и потарелочном рассмотрении модели ректификационную колонну представляем в виде системы, состоящей из взаимодействующих звеньев:

$$W(p) = \frac{k}{(T_1 p + 1)^{n-1} (T_2 p + 1)}, \qquad (2)$$

где $T_2 > 10T_1$, $T_2 / T_1 = q$.

Задача состоит в определении неизвестных коэффициентов уравнения по кривой разгона, являющейся реакцией системы на единичное скачкообразное возмущение.

Часто получить точную динамическую характеристику аналитически невозможно

из-за сложной взаимной зависимости величин, входящих в уравнение, и ее определяют экспериментально. При этом для упрощения расчетов апериодические звенья высоких порядков заменяют комбинацией этих звеньев – чистого запаздывания и апериодического первого порядка:

$$W(p) = \frac{ke^{-p\tau}}{Tp+1}, \qquad (3)$$

с учетом которой можно получить расчетную характеристику зависимости управляющих параметров от экспериментально полученных данных для проверки и уточнения математической модели.

Коэффициенты модели, полученные методами статистического анализа, оказались неадекватными.

Динамика линейного объекта может быть описана специальными функциями времени – весовой функцией. Эта функция является решением дифференциального уравнения при нулевых начальных условиях

$$q(t,\tau) = A_i\delta(t-\tau). \qquad (4)$$

Эта реакция зависит от переменных t, τ. Весовая функция линейной системы представляет собой реакцию этой системы в момент t на единичный импульс, действующий на систему в момент τ.

Физически любая функция времени $u(t)$ формально может быть представлена как комбинация импульсов или скачков. Это приводит к интегралу свертки, который для случая постоянных коэффициентов и нулевых начальных условий может быть записан в виде

$$y(t) = \int_0^{\infty} q(\tau)u(t-\tau)d\tau = \int_{-\infty}^{t} q(t-\tau)u(\tau)d\tau. \qquad (5)$$

Переходя к дискретной форме записи и записывая обозначения входных и выходных переменных, получим:

$$T_i(t) = \sum q_i(t-k\Delta\tau)W_i(k\Delta\tau)\Delta\tau, \qquad (6)$$

где $i = \overline{1;3}$.

На основании данного уравнения были рассчитаны весовые функции по каналам $W_1 - T_1$, $W_2 - T_2$, $W_3 - T_3$. Данные зависимости были аппроксимированы полиномами 4-го порядка и уравнением вида

$$q(t) = C_0 e^{-C_1 t}\sin(C_2 t + C_3), \qquad (7)$$

где C_1, C_2, C_3, C_4 – неизвестные коэффициенты аппроксимирующего уравнения.

Была составлена программа для определения неизвестных коэффициентов и построены графики сравнения выходных характеристик, которые приведены ниже (рисунок).

а

б

в

Рисунок. Графики сравнения экспериментальных и расчетных значений по следующим каналам: *а* – $W_1 - T_1$; *б* – $W_2 - T_2$; *в* – $W_3 - T_3$

Результаты сравнения экспериментальных данных и значений, рассчитанных по уравнениям (6) и (7), показали, что присутствует невязка более 30%. Следовательно, данный метод неприменим для определения управляющих воздействий.

Для некоторых классов нелинейных объектов эти требования выполняются при использовании рядов Вольтерра. Используя ряды Вольтерра, ядра которых представляют собой весовые функции высших порядков, можно получить описание нелинейного объекта, допускающее ясную физическую интерпретацию. Этот метод имеет большое достоинство, связанное с тем, что нелинейная система рассмат-

ривается как непосредственное обобщение линейного случая, хотя сам объект может существенно отличаться от линейного. Иначе говоря, метод с использованием рядов Вольтерра интерпретирует линейные объекты как подкласс нелинейных объектов.

Если учесть квадратичные члены или члены более высоких порядков, то становится очевидным взаимодействие двух импульсов.

Преобразуем (5) в ряд Вольтерра вида

$$y(t)=\int_0^t q_1(\tau)u(t-\tau)d\tau+\int_0^t\int_0^t q_2(\tau_1,\tau_2)u(t-\tau_1)\times$$
$$\times u(t-\tau_2)d\tau_1 d\tau_2+..., \qquad (8)$$

где q_i – весовые функции i-го порядка; u_i – управления.

Применим следующую формулу для весовой функции:

$$q(t-\tau)=\frac{1}{T}e^{-\frac{t-\tau}{T}}. \qquad (9)$$

В результате получим следующее выражение:

$$y(t)=\int_0^t q(\tau)u(t-\tau)d\tau=\int_0^t q(t-\tau)u(\tau)d\tau=$$
$$=\frac{1}{T}\int_0^t e^{-\frac{t-\tau}{T}}u(t-\tau)d\tau. \qquad (10)$$

Переходя к дискретной форме записи, получим:

$$y(t)=\frac{1}{T}\sum e^{-\frac{t-\tau}{T}}u(\tau)\Delta\tau. \qquad (11)$$

Неизвестные параметры T и τ в последнем уравнении были определены методом наименьших квадратов. Полученные результаты показали, что ошибка не превышает 20%, что вполне приемлемо при использовании линейной записи интеграла свертки.

Применение метода второго порядка позволит определить связь температуры 98% выкипания фракции 140–180 (T_1) от расхода фракции 140–180 (W_1):

$$y_1(t)=\frac{\Delta\tau_1\Delta\tau_2}{T}\sum e^{-\frac{t-\tau}{T}}u(t-\tau_1)u(t-\tau_2). \qquad (12)$$

В результате получены коэффициент усиления, постоянные времени и запаздывание.

По данному алгоритму составлена и реализована программа проведения имитационных экспериментов в пакете Matlab.

```
F=data(:,1);
tF=data(:,2);
MF=max(F);
MtF=max(tF);
F=F/MF;
tF=tF/MtF;
n=10;
DT=4;
K=n*DT;
T=30000;
dT1=40;
dT2=80;
t=1000;
nk=ceil(t/DT/n)*n+1;
tay2=80;
tay1=40;
for j=tay2/DT+1:n:nk
for i=tay1/DT+1:n:nk
y(i,j)=(dT1*dT2/T)*exp(-.025*((i-1)*dT1-
tay1))*F(i-1)*tay1*F(j-1)*tay2;
end
end
sum(sum(y))
```

После сравнения рассчитанных и экспериментальных значений погрешность измерения оказалась меньше 10%, следовательно, этот метод можно использовать в расчетах процесса ректификации нефти.

Заключение. Для расчетов по каналу температура 98% выкипания фракции 180–230 (T_2) от расхода фракции 180–230 (W_2) с учетом расхода фракции 140–180 (W_1) необходимо использовать выражение

$$y_2(t)=\int_0^t q_1(\tau)u_1(t-\tau)d\tau+\int_0^t q_2(\tau)u_2(t-\tau)d\tau+$$
$$+\int_0^t\int_0^t q_{11}(\tau)u_1(t-\tau_1)u_2(t-\tau_2)d\tau_1 d\tau_2+$$
$$+\int_0^t\int_0^t q_{22}(\tau)u_1(t-\tau_1)u_2(t-\tau_2)d\tau_1 d\tau_2+$$
$$+\int_0^t\int_0^t q_{12}(\tau)u_1(t-\tau_1)u_2(t-\tau_2)d\tau_1 d\tau_2. \qquad (13)$$

Литература

1. Эйкхофф, П. Основы идентификации систем управления / П. Эйкхофф. – М.: Мир, 1975.

УДК 658.012.011.56

А. И. Якимов, канд. техн. наук

ОБ ИССЛЕДОВАНИИ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ПЕРЕХОДНОГО ПРОЦЕССА В ИМИТАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ПРОИЗВОДСТВЕННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПРОМЫШЛЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ

The structure of a complex system simulation software package BelSim with a base imitating model of an industrial enterprise (BIMIE) is presented. BIMIE includes such processes as supply, organization of production, production distribution and financial management of enterprise. The list of problems solved with BIMIE is found out, and features of research of its characteristics are described. An automated technology of estimation of duration of transient in the imitating model with a trend of response in a stationary mode is found out.

Введение. Промышленное предприятие представляется многоуровневой иерархической системой с координирующими элементами, принимающими решения на каждом из уровней в соответствии со своим положением в иерархии управления. Метод имитационного моделирования ERP-системы управления промышленным предприятием использует декомпозицию системы на подсистемы, процессы и активности; позволяет обеспечить очень важное сходство структуры модели и объекта исследования на основе процессного способа имитации [1]. Реализация метода предполагает построение базовой имитационной модели промышленного предприятия (БИМПП) с последующим уточнением в модели объектов системы [1, 3].

Состав ПТКИ BelSim. Программно-технологический комплекс имитации сложных систем (ПТКИ) BelSim позволяет реализовать метод имитационного моделирования производственно-экономической деятельности промышленных предприятий. В состав комплекса входит следующее программное обеспечение: построения функциональной модели системы на основе технологии IDEF0; интегрированной среды разработки приложений на языке C++; системы имитационного моделирования PSTL; планирования, проведения и обработки результатов имитационных экспериментов; решения оптимизационных задач; анализа и отображения данных; интеграции имитационных моделей в комплексную информационную систему; организации распределенных вычислений.

В подсистеме планирования, проведения и обработки результатов имитационных экспериментов обмен данными между элементами подсистемы организован на основе иерархических структур, физически представленных в виде файлов в формате XML, доступ к которым реализован через стандартный интерфейс XML DOM L evel 3 с использованием библиотеки MSXML 4.0. Блок ввода/вывода информации реализован в виде отдельного приложения Experiment Designer на основе Microsoft .NET Framework 1.1. Блок создания плана эксперимента, блок формирования данных для отдельных опытов и блок предварительного статистического анализа реализованы в виде макросов DesignOfExperiment и ExperimentData в специализированном пакете статистического анализа STATISTICA 6.0 (рис. 1).

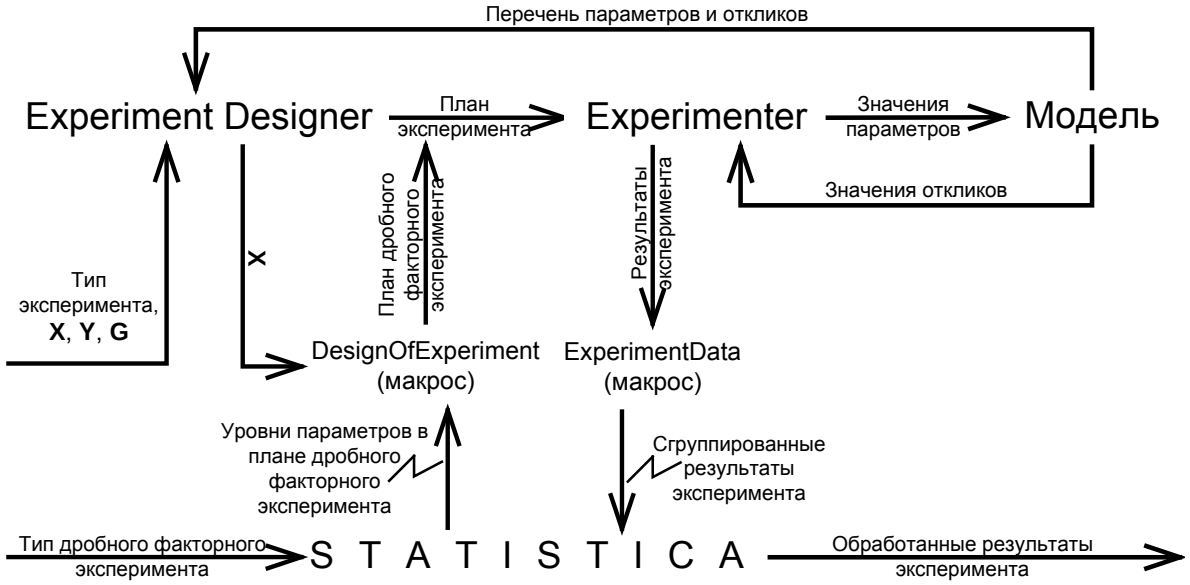


Рис. 1. Схема постановки имитационных экспериментов

Базовая имитационная модель промышленного предприятия (БИМПП). Использование технологии IDEF0 на этапе содержательного описания, или построения вербальной модели, позволяет составить описание системы, помогая определить предметную область одновременно эксперту и разработчикам модели; моделировать изменения в системе, формализовать информационные потоки и используемые ресурсы, представить логику сложных переходов в системе. При разработке модели использован системный подход к анализу сложной многоуровневой системы.

Процессы снабжения, организации производства, сбыта продукции и управления финансами предприятия, описание окружающей среды представлены следующими группами параметров: характеристики производственного процесса; текущее финансово-экономическое состояние предприятия; алгоритм функционирования системы управления предприятием; структура персонала и параметры системы оплаты труда; характеристики производственных фондов; характеристики финансовых ресурсов; описатели контрактов; параметры системы налогообложения; показатели денежно-кредитной системы государства; характеристики спроса на продукцию; характеристики предложения материальных и энергетических ресурсов.

Для всех процессов разработаны алгоритмы функционирования. Например, алгоритм процесса «Поставка ресурсов» описывает функциональные действия при выполнении контракта на поставку ресурсов. При этом выделены три основных блока: предварительная оплата, поставка ресурсов и оплата по факту поставки, отсрочка платежа. В том случае, если контрактом предусматривается предварительная оплата, осуществляется проверка наличия необходимых денежных средств на расчетном счете предприятия ($S_{пред} > S_{р/с}$). Если необходимая сумма отсутствует, фиксируется нехватка денежных средств в размере ($S_{пред} - S_{р/с}$) и выполнение процесса приостанавливается с помощью оператора WAIT_WHILE ($S_{пред} > S_{р/с}$). При следующей активизации процесса необходимая сумма снимается с расчетного счета и управление вновь передается на управляющую программу моделирования (УПМ) вызовом оператора WAIT ($T_{пред}$), где $T_{пред}$ – срок предварительной оплаты. Если же контракт не предусматривает предварительную оплату, то выполняется оператор WAIT ($T_{пост}$), где $T_{пост}$ – период времени с момента подачи заявки до поставки ресурсов. Далее в составе алгоритма процесса следуют операторы, модифицирующие величину имеющихся складских запасов, что соответствует операции поставки ресурсов. Группы операторов, реализующие оплату по факту поставки и отсрочку платежа с синхронизацией по объему наличных денежных средств, соответствуют группе операторов для представления предварительной оплаты. Последним в алгоритме процесса следует оператор END, который завершает описание данного процесса, и по нему УПМ удаляет процесс из списка процессов.

Метод имитационного моделирования с применением БИМПП обеспечивает решение следующих задач: оценка влияния алгоритмов организации бизнес-процессов в информационной системе (ИС) предприятия и их параметров на финансово-экономические показатели предприятия для поиска путей реинжиниринга бизнес-процессов; рациональный выбор состава, структуры и параметров системы управления производственными процессами для поиска путей снижения себестоимости продукции; оценка выбора альтернативных вариантов – целесообразности запуска отдельного производства на краткосрочный период при повышенном спросе на продукцию или равномерного выпуска продукции с хранением ее на складе; оценка целесообразности закупки сырья в период низких цен с последующим хранением на складе или ритмичной закупки сырья в течение заданного периода; оценка эффективности заключения контрактов на поставку ресурсов, реализацию готовой продукции с учетом экономических условий контракта; минимизация длительности переходного процесса при смене ассортимента выпускаемой продукции, сокращение потерь при переходных процессах, снижение себестоимости выпускаемой продукции; оптимальное распределение производственной нагрузки по цехам промышленного предприятия.

Исследование свойств БИМПП. Общепринято *стационарность* режима моделирования характеризовать некоторым установившимся равновесием процессов в модели, когда при дальнейшей имитации новой информации о системе не получают. Под *устойчивостью* результатов имитации, как правило, понимают сходимость контролируемого параметра моделирования к определенной величине при увеличении времени моделирования варианта сложной системы [4]. Обычно устойчивость результатов имитации оценивают дисперсией отклика. Если эта дисперсия при увеличении времени моделирования $T_м$ не увеличивается, значит, результаты моделирования устойчивы [5].

Исследованию методов определения периода разгона и длины прогона модели уделяется значительное внимание, при этом делается попытка автоматизации определения указанных параметров моделирования [6, 7]. С. Робинсон (S. Robinson, 2002) [8] отмечает 26 подходов к определению переходного процесса модели,

распределяя их по группам: графические методы, эвристические подходы, статистические методы, тестирование со смещением параметров инициализации, гибридные методы. При этом следует отметить, что до настоящего времени, как отмечает Дж. С. Карсон (J. S. Carson, 2003) [9], отсутствуют общие правила для определения длины прогона и числа повторений опытов. В каждом случае все определяется моделью.

Особенность, выявленная при исследовании переходного процесса в БИМПП по известным технологиям [4], заключается в наличии разнородных по интенсивности переходных процессов: краткосрочные контракты, переоценка основных средств и т. д. При исследовании использованы средства мониторинга ПТКИ BelSim [1] с применением пакета STATISTICA 6.0, позволяющие в процессе имитации осуществлять сбор статистики по основным откликам БИМПП и строить диаграммы по собранной статистике. Диаграммы построены по всем откликам и по каждому графику определен момент наступления стационарного режима, максимальный из которых принят за момент окончания переходного режима (рис. 2).

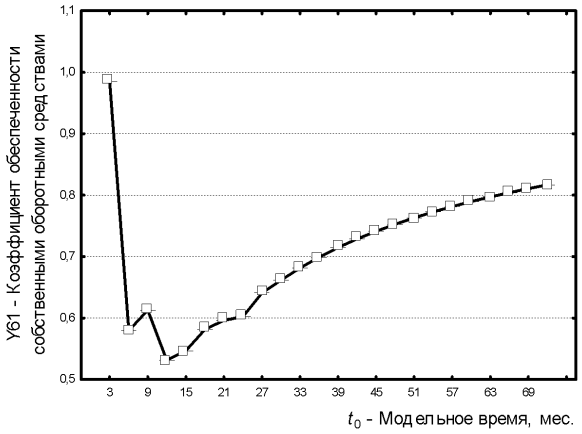


Рис. 2. Переходный процесс отклика *Y*61 при детерминированных исходных данных с условиями имитации: период времени – 72 мес.; интервал сбора статистики – 3 мес.

Особенность проведенных исследований, представленных на рис. 2, заключается в том, что параметры внешней и рабочей нагрузки с вероятностными характеристиками приняты детерминированными. Модель имеет переходный режим длительностью 12 мес. (модельного времени).

БИМПП позволяет исследовать, например, влияние алгоритмов организации бизнес-процессов в информационной системе предприятия и их параметров на финансово-экономические показатели предприятия для поиска путей реинжиниринга бизнес-процессов. В ходе комплексного анализа находят рациональный вариант состава и структуры ИС на основе суперпозиции интегральных показателей качества функционирования отдельных подсистем ИС и с учетом ограничений, накладываемых на каждую исследуемую подсистему другими подсистемами сложной системы. Если некоторые процессы БИМПП, выполняющие одинаковые функции, реализованы на основе различных алгоритмов или имеют различный состав и структуру, то необходимо исследовать свойства БИМПП для каждого изучаемого варианта, что является особенностью исследования модели для промышленного предприятия. Например, для БИМПП существует несколько алгоритмов реализации процессов планирования продаж и производства или управления запасами ресурсов. Выбор различных алгоритмов приводит к разному составу процессов модели с отличающимися свойствами. При исследовании нескольких бизнес-процессов с различными вариантами их алгоритмов длиной переходного процесса БИМПП считается *максимальное* из полученных значений.

Технология оценки длительности переходного процесса в БИМПП с трендом отклика в стационарном режиме. Практика исследования БИМПП показывает, что поведение откликов имитационной модели характеризуется наличием тренда в стационарном режиме. Например, стоимость запасов на складе постоянно увеличивается с учетом индекса инфляции.

В практике исследования имитационных моделей, как правило, наблюдают отклики, которые в стационарном режиме приходят к установившемуся значению. Использование общепринятой методики [4] приводит к значительным трудностям установления длительности переходного процесса в имитационных моделях с трендом в стационарном режиме.

Значение отклика в стационарном режиме с учетом тренда на интервале $[T_i, T_{i+1}]$ определяется следующим выражением:

$$Y_{i\text{ст}} = Y_{i\text{ст}}(T_i) + c_i t \mid$$

$$\mid \forall t \in [T_i + T_{i+1}] \,\&\, \exists t = T_i;\, c_i t = 0. \qquad (1)$$

Для нахождения длины переходного процесса принимают во внимание значения тренда $Y_{i\text{ст}}(T_i)$ в момент T_i и $Y_{i\text{ст}}(T_{i+1})$ в момент T_{i+1}. Оценивают максимальное $Y_{i\max}(T_i)$ и минимальное $Y_{i\min}(T_{i+1})$ отклонения отклика относительно тренда. Если отклонения отклика Y_i не превышают допустимых значений на величину до 5 %, то середину интервала $[T_i, T_{i+1}]$ принимают за оценку длительности $T_{\text{п.п}}$ переходного процесса БИМПП.

Методика определения длительности переходного процесса БИМПП реализуется следующей последовательностью шагов (рис. 3).

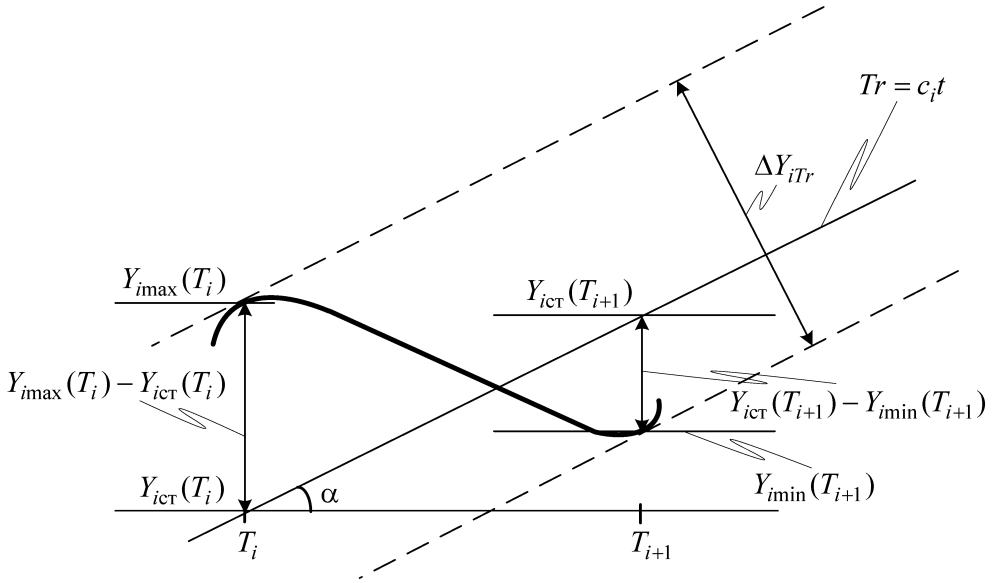


Рис. 3. Графическая модель оценки длительности переходного процесса с учетом тренда в стационарном режиме

Шаг 1. Для локального максимума отклонения отклика $Y_{i\max}(T_i)$ фиксируют момент времени T_i и находят отклонение $\Delta Y_i(T_i)$ от значения тренда $Y_{i\text{ст}}(T_i)$:

$$Y_{i\max}(T_i),\ Y_{i\text{ст}}(T_i) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta Y_i(T_i) = Y_{i\max}(T_i) - Y_{i\text{ст}}(T_i). \qquad (2)$$

Шаг 2. Для соседнего локального минимума отклонения отклика $Y_{i\min}(T_{i+1})$ фиксируют момент времени T_{i+1} и определяют отклонение $\Delta Y_i(T_{i+1})$ от значения тренда $Y_{i\text{ст}}(T_{i+1})$:

$$Y_{i\min}(T_{i+1}),\ Y_{i\text{ст}}(T_{i+1}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta Y_i(T_{i+1}) = Y_{i\text{ст}}(T_{i+1}) - Y_{i\min}(T_{i+1}). \qquad (3)$$

Шаг 3. Находят отклонение отклика ΔY_{iTr} относительно тренда:

$$\Delta Y_{iTr} = (\Delta Y_i(T_i) + \Delta Y_i(T_{i+1}))\cdot\cos\alpha, \qquad (4)$$

где α – угол наклона линии тренда в стационарном режиме относительно оси абсцисс.

Шаг 4. Шаги 1–3 выполняют, пока не будет реализовано условие характеристического предиката:

$$\mathrm{P}\left(\frac{\Delta Y_{iTr}}{\Delta Y_{i\text{ст}}(T_i)}100\% \le \varepsilon\right) = 1, \qquad (5)$$

где ε – допустимая погрешность отклонения отклика от линии тренда в стационарном режиме, %.

Шаг 5. Принимают за оценку длительности $T_{\text{п.п}}$ переходного процесса ИМ середину интервала $[T_i, T_{i+1}]$:

$$T_{\text{п.п}} = \frac{T_i + T_{i+1}}{2}. \qquad (6)$$

Полученное значение $T_{\text{п.п}}$ учитывают для определения начала сбора статистики имитации и при оценке устойчивости БИМПП [10].

Одним из методов выделения тренда является подбор подходящей кривой. При этом в качестве математических моделей используют различные функции: уравнения прямой (см. рис. 3), экспоненты, параболы и др.

Для описания динамических рядов и выделения тренда целесообразно использовать уравнение, предложенное В. В. Нешитым [11]:

$$y = y_0(1+\alpha u t)^{\frac{1}{u}} = (A + Bt)^{\frac{1}{u}}, \qquad (7)$$

где $A = y_0^{\,u}$; $B = \alpha u y_0^{\,u}$.

Уравнение (7) включает как частные случаи множества функций, в том числе прямую при $u = 1$ и экспоненту при $u \to 0$.

Для нахождения оценок параметров уравнения (7) его приводят к виду

$$y^u = A + Bt. \qquad (8)$$

Обозначив $y^u = Y$, записывают (8) в следующем виде:

$$Y = A + BT \qquad (9)$$

и оценки параметров A и B при заданном u находят по методу наименьших квадратов:

$$B = \frac{n\sum_i T_i Y_i - \sum_i T_i \sum_i Y_i}{n\sum_i T_i^2 - \left(\sum_{ii} T_i\right)^2}, \qquad (10)$$

$$A = \frac{1}{n}\left(\sum_i Y_i - B\sum_i T_i\right). \qquad (11)$$

Значения параметра u задаются с некоторым шагом $\Delta u = 0{,}1$ или $\Delta u = 0{,}001$, или некоторым другим в зависимости от требуемой точности аппроксимации. При каждом заданном значении параметра u и вычисленных оценках

параметров A, B необходимо вычислять коэффициент корреляции и индекс корреляции. При достижении наибольшего значения коэффициента корреляции (или индекса корреляции) вычислительный процесс останавливают.

Заключение. Для автоматизации определения длительности переходного процесса имитационной модели предложена технология, в соответствии с которой принимают во внимание значения тренда $Y_{iст}(T_i)$ в момент T_i и $Y_{iст}(T_{i+1})$ в момент T_{i+1}. Оценивают максимальное $Y_{imax}(T_i)$ и минимальное $Y_{imin}(T_{i+1})$ отклонения отклика относительно тренда. Если отклонения отклика Y_i не превышают допустимых значений на величину до 5%, то середину интервала $[T_i, T_{i+1}]$ принимают за оценку длительности $T_{п.п}$ переходного процесса модели.

Литература

1. Якимов, А. И. Имитационное моделирование в ERP-системах управления / А. И. Якимов, С. А. Альховик. – Минск: Бел. наука, 2005. – 198 с.

2. Якимов, А. И. Технология имитационного моделирования сложных многоуровневых систем / А. И. Якимов // Моделирование-2006: материалы Междунар. конф., Киев, 16–18 мая 2006 г. / Ин-т проблем моделир. в энергетике им. Г. Е. Пухова НАН Украины. – Киев, 2006. – С. 455–460.

3. Альховик, С. А. Имитационная модель промышленного предприятия для ERP-системы управления / С. А. Альховик, А. И. Якимов // Вестник Могилевского государственного технического университета. – 2004. – № 2(7). – С. 11–16.

4. Максимей, И. В. Имитационное моделирование на ЭВМ / И. В. Максимей. – М.: Радио и связь, 1988. – 232 с.

5. Левчук, В. Д. Программно-технологические комплексы имитации сложных дискретных систем: монография / В. Д. Левчук, И. В. Максимей. – Гомель: Изд-во ГГУ им. Ф. Скорины, 2006. – 263 с.

6. Robinson, S. Automated Analysis of Simulation Output Data / S. Robinson // Proceedings of 2005 Winter Simulation Conference [Электронный ресурс]. – 2005. – Режим доступа: http://www.informs-sim.org/wsc05papers/088.pdf. – Дата доступа: 12.06.2007.

7. Steiger, N. M. Performance Evaluation of ASAP3 for Steady-state Output Analysis / N. M. Steiger, E. K. Lada, J. R. Wilson // Proceedings of 2005 Winter Simulation Conference [Электронный ресурс]. – 2005. – Режим доступа: http://www.informs-sim.org/wsc05papers/090.pdf. – Дата доступа: 12.06.2007.

8. Robinson, S. A. Statistical Process Control Approach for Estimating the Warm-up Period / S. Robinson // Proceedings of 2002 Winter Simulation Conference [Электронный ресурс]. – 2002. – Режим доступа: http://www.informs-sim.org/wsc02papers/055.pdf. – Дата доступа: 12.06.2007.

9. Carson, J. S. Introduction to Modeling and Simulation / J. S. Carson // Proceedings of 2003 Winter Simulation Conference [Электронный ресурс]. – 2003. – Режим доступа: http://www.informs-sim.org/wsc03papers/002.pdf. – Дата доступа: 12.06.2007.

10. Якимов, А. И. Оценка длительности переходного процесса имитационной модели с трендом отклика в стационарном режиме / А. И. Якимов // Инновационные технологии управления в экономике 2007: материалы респ. науч.-практ. конф., Брест, 24–25 апр. 2007 г. / Брест. гос. ун-т им. А. С. Пушкина. – Брест, 2007. – С. 45.

11. Нешитой, В. В. Статистический анализ и регулирование технологических процессов на базе обобщенных распределений с параметром сдвига: метод. рекомендации / В. В. Нешитой. – Минск: БелГИСС, 2001. – 40 с.

УДК 504.064.36

А. И. Бракович, ассистент

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАЗМЕЩЕНИЯ ДАТЧИКОВ КОНТРОЛЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О РАСКРАСКЕ ГРАФА

The mathematical model of the control sensors for the atmospheric air state arrangement on the basis of NP-difficult problem solution about the graph coloring is proposed. This model is differed from analogs by the fact that the calculation speed for developed model is approximately two times higher. The model can work with the maps sized to 100×100 cells, while analogs – with maps 50×50 of cells. The model also differs by the presence of additional constraints for the sensors arrangement inside the cluster, for averting the group of sensors in one place on the map, while the analogs place the sensors inside the cluster randomly.

Введение. Для проведения мониторинга выбросов загрязняющих веществ в атмосферу от стационарных источников важное значение имеет выбор необходимых точек контроля для размещения датчиков, контролирующих содержание выбрасываемых веществ в атмосферу вблизи санитарно-защитной зоны предприятия. Чем большее количество датчиков будет установлено, тем точнее будут полученные результаты. Однако это также приведет к значительному увеличению затрат, связанных с их установкой и последующей обработкой полученных результатов. Таким образом, рациональное размещение датчиков контроля позволит сэкономить значительные средства.

Необходимость организации контроля загрязнения атмосферного воздуха в зоне интенсивного антропогенного воздействия определяется предварительными экспериментальными (в течение 1–2 лет) и теоретическими исследованиями с использованием методов математического и физического моделирования. Такой подход позволяет оценить степень загрязнения той или иной примесью атмосферного воздуха в городе или любом другом населенном пункте, где имеются стационарные и передвижные источники выбросов вредных веществ.

Обычно расположение источников выбросов и их параметры известны или их можно определить. Зная метеорологические показатели, в том числе «розу ветров», можно с использованием математических и физических моделей рассчитать поля концентраций загрязняющих веществ в атмосферном воздухе для любой ситуации. Но адекватность принятых моделей реальным ситуациям все равно должна проверяться экспериментально.

При размещении постов наблюдений предпочтение отдается районам жилой застройки с наибольшей плотностью населения, где возможны случаи превышения установленных пороговых значений гигиенических показателей ПДК. Наблюдения должны проводиться за всеми примесями, уровни которых превышают ПДК. В обязательном порядке измеряются основные, наиболее часто встречающиеся загрязняющие воздух вещества: пыль, диоксид серы, оксид углерода, оксиды азота. Выбор других веществ, требующих контроля, определяется спецификой производства и выбросов в данной местности, частотой превышения ПДК [1].

В настоящей статье предлагается для выбора мест размещения датчиков использовать подход, основанный на размещении датчиков контроля за состоянием атмосферного воздуха на основе решения NP-трудной задачи о раскраске графа и понятия «кластер». Основные подходы к решению NP-трудной задачи о раскраске графа описаны в [2]. В [3] предложен метод на основе проективных геометрий и полей Галуа, где указано, что датчик контроля располагается внутр и кластера. Однако одним из недостатков данного метода является то, что на начальном этапе создания методики сбора информации о загрязнении окружающей среды необходимо располагать математической моделью загрязнения территории рассматриваемым веществом, которая имитировала бы процесс измерения качества воздуха в приземном слое атмосферы в любой заданной точке области. Для получения модели необходимо разработать информационную сеть, в узлах которой должны содержаться данные многолетних наблюдений в зависимости от календарного времени, погодных условий, ветрового режима и других факторов. Таким образом, при отсутствии данных многолетних наблюдений такая модель не позволяет решать требуемую задачу.

Основная часть. С целью формализации процедуры принятия решения о требуемом количестве источников информации для описания загрязнения территории культурно-промышленного комплекса с заданной точностью, а также для вычисления координат их рационального размещения предложено рассматривать некоторую замкнутую область S, задаваемую массивом пар смежных точек границы области $M = [(x_i, y_i)]$, $i = 1, 2, \ldots, n$. Область S может представлять собой, например, санитарно-защитную зону предприятия, зону влияния, а также контур карты города, что позволяет визуально соотносить участки области S с местоположением конкретных транспортных магистралей, промышленных или культурных объектов

на территории комплекса [3]. На начальном этапе создания методики сбора информации о загрязнении окружающей среды необходимо располагать либо математической моделью загрязнения территории города рассматриваемым веществом $Z = f(F_1, F_2, \ldots, F_k)$, которая имитировала бы процесс измерения качества воздуха в приземном слое атмосферы в любой заданной точке области S, либо конкретными числовыми значениями приземной концентрации загрязняющих веществ.

Можно выделить следующие этапы решения задачи определения оптимального числа датчиков и рационального их размещения на территории города, для которого разрабатывается система мониторинга:

1) выделение замкнутой области S факторного пространства, границы которой определяются контуром карты-схемы культурно-промышленного комплекса;

2) выбор и обоснование значения евклидовой метрики d, определяющей точность описания области S;

3) заполнение ячеек цифровыми значениями приземной концентрации загрязняющего вещества:

$$\overline{\nu}_{i,j} = \nu^1_{i,j}, \nu^2_{i,j}, \ldots, \nu^t_{i,j}; \qquad (1)$$

4) определение евклидова расстояния между ячейками $d_{(\alpha,\beta)(\xi,\chi)}$:

$$d_{(\alpha,\beta)(\xi,\chi)} = \sqrt{\sum_{k=1}^{t} (\nu^k_{\alpha,\beta} - \nu^k_{\xi,\chi})^2}. \qquad (2)$$

Значения евклидова расстояния можно использовать для разбиения области S на кластеры (зоны), представляющие некоторые типовые области загрязнения. На основании S, ρ, d строится 0,1-матрица $B = [b_{ij}]$, такая, что $b_{ij} = 1$ в том и только в том случае, когда расстояние d_{ij} между ячейками i и j не превосходит d, и $b_{ij} = 0$ в противном случае.

Процедура определения необходимого числа датчиков и рационального их размещения на исследуемой территории для оценки экологической обстановки с заданной точностью сводится к решению известной NP-трудной задачи о раскраске графа, алгоритм решения которой описан в работе [2]. Теоретически NP-трудная задача может быть сведена к многократному решению ее специального варианта.

1. Стартовой точкой алгоритма решения задачи является выбор и обоснование величины отклонения $\Delta\mu$-й координаты вектора ν_{ij} относительно ядра кластера. Таким образом, ячейки попадают в один и тот же кластер, если расстояние между ними по каждой координате не превышает соответствующего отклонения $\Delta\mu$ ($\mu = 1, t$). На основании этого система получает решение и сравнивает его с оптимальным для NP-полной задачи или ее специального варианта.

2. Строится матрица B, в которой заполнение строк и столбцов происходит следующим образом. Если на карте-схеме в ячейках i и j значения приземных концентраций загрязняющего вещества отличаются более чем на d, то $b_{ij} = 1$, иначе $b_{ij} = 0$.

3. Формируется матрица B' исключением из B строки, содержащей максимальное количество единиц. Затем требуется вычеркнуть и столбец с одноименным номером. Исключение необходимо проводить до тех пор, пока подматрица не превратится в нулевую. Как только это произошло, номера строк или столбцов относятся к аналогичному кластеру, которому присваивается первый порядковый номер.

4. Вычеркиваются эти строки и столбцы из исходной матрицы B. Если получившаяся матрица является нулевой, то количество кластеров равно двум: ячейки, относящиеся к первому кластеру, найдены на предыдущем этапе, а номера ячеек, относящиеся ко второму кластеру, – это соответственно номера строк или столбцов нулевой матрицы B. Если получившаяся матрица не является нулевой, то необходимо повторить пункты 3 и 4.

5. Необходимо решить задачу выбора оптимального места размещения датчика контроля внутри ячеек, образовавших кластер. Решение может быть разным: например, начать с кластеров, содержащих только одну ячейку, а затем расставлять их так, чтобы датчики, по возможности, не располагались в соседних ячейках [2].

Основным отличием данного метода размещения пунктов контроля от имеющихся аналогов является то, что для его использования не требуется наличие данных о многолетних наблюдениях распределения загрязняющих веществ в атмосфере и математических моделей, описывающих загрязнение на выделенной территории. Кроме того, например, в работах [3] имелась возможность выбора мест размещения датчиков только на территории города Минска. Предлагаемый метод позволяет решать поставленную задачу на любой территории.

Для проведения вычислительного эксперимента возьмем санитарно-защитную зону предприятия размером 100×100 м. Количество разбиений по каждому направлению одинаково и составляет 4 клетки по 25 м. В каждой ячейке предварительно рассчитаны значения концентраций диоксида азота в каждой точке на карте-схеме при случайных значениях метеопараметров. Задача заключается в нахождении оптимальных мест размещения датчиков контроля для последующего мониторинга окружающей среды в районе санитарно-защитной зоны промышленного предприятия. Допустим, что в ре-

зультате вычисления значения приземных концентраций диоксида азота в каждой ячейке равны представленным в табл. 1.

Таблица 1

Карта-схема с рассчитанными значениями концентраций, мг/м^3

Номер координаты	1	2	3	4
1	0,7	0,4	0,9	0,8
2	0,5	1,0	0,2	0,4
3	0,6	0,7	0,5	0,3
4	0,9	0,2	0,9	0,6

Зададим нумерацию ячеек на карте-схеме, как это показано в табл. 2.

Таблица 2

Карта-схема с нумерацией ячеек

Номер координаты	1	2	3	4
1	a_1	a_2	a_3	a_4
2	a_5	a_6	a_7	a_8
3	a_9	a_{10}	a_{11}	a_{12}
4	a_{13}	a_{14}	a_{15}	a_{16}

Далее необходимо определить значение евклидова расстояния d, т. е. число, на которое будут различаться результаты для отнесения их в различные кластеры. Это число должен задавать эксперт, руководствуясь при этом тем, что чем меньше это число, тем в итоге большее количество датчиков понадобится для мониторинга и тем точнее будут результаты. Однако малое значение евклидова расстояния приведет к необходимости установки слишком большого количества датчиков и возрастанию стоимости проведения последующего мониторинга. Проанализировав данные рассуждения, примем значение евклидова расстояния равным 30%, т. е. результаты, имеющие большее расхождение, относятся к разным кластерам.

На следующем этапе формируем матрицу B, такую, что если на карте-схеме в ячейках i и j значения концентраций загрязняющего вещества отличаются более чем на d, то $b_{ij} = 1$, иначе $b_{ij} = 0$. Результат представлен в табл. 3.

Находим строку, содержащую наибольшее число единиц, в нашем случае – это строка 7, и вычеркиваем ее и соответствующий ей столбец из данной матрицы. В результате получаем матрицу без 7-й строки и 7-го столбца. Далее опять находим строку с максимальным числом единиц. Это строка 14. Вычеркиваем ее и соответствующий 14-й столбец. Операцию повторяем до тех пор, пока не получим нулевую матрицу (табл. 4).

Таблица 4

Вид матрицы *B* после всех преобразований

Номер ячейки	a_1	a_3	a_4	a_{10}	a_{13}	a_{15}
a_1	0	0	0	0	0	0
a_3	0	0	0	0	0	0
a_4	0	0	0	0	0	0
a_{10}	0	0	0	0	0	0
a_{13}	0	0	0	0	0	0
a_{15}	0	0	0	0	0	0

Номера строк или столбцов указывают на то, что ячейки с данным номером попадают в первый кластер. Это номера 1, 3, 4, 10, 13 и 15.

Для нахождения принадлежности оставшихся ячеек к определенным кластерам построим новую матрицу B, не содержащую строки и столбцы с этими номерами (табл. 5).

Таблица 3

Вид матрицы *B*

Номер ячейки	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8	a_9	a_{10}	a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	a_{15}	a_{16}
a_1	0	1	0	0	0	1	1	1	0	0	0	1	0	1	0	0
a_2	1	0	1	1	0	1	1	0	1	1	0	0	1	1	1	1
a_3	0	1	0	0	1	0	1	1	1	0	1	1	0	1	0	1
a_4	0	1	0	0	1	0	1	1	1	0	1	1	0	1	0	0
a_5	0	0	1	1	0	1	1	0	0	1	0	1	1	1	1	0
a_6	1	1	0	0	1	0	0	1	1	1	1	1	0	1	0	1
a_7	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	1	0	1	1
a_8	1	0	1	1	0	1	1	0	1	1	0	0	1	1	1	1
a_9	0	1	1	0	0	1	1	1	0	0	0	1	1	1	1	0
a_{10}	0	1	0	0	1	1	1	1	0	0	0	1	0	1	0	0
a_{11}	0	0	1	1	0	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1	0
a_{12}	1	0	1	1	1	1	0	0	1	1	1	0	1	0	1	1
a_{13}	0	1	0	0	1	0	1	1	1	0	1	1	0	1	0	1
a_{14}	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	1	0	1	1
a_{15}	0	1	0	0	1	0	1	1	1	0	1	1	0	1	0	1
a_{16}	0	1	1	0	0	1	1	1	0	0	0	1	1	1	1	0

Таблица 5

Вид матрицы *B* после второго преобразования

N	a_2	a_5	a_6	a_7	a_8	a_9	a_{11}	a_{12}	a_{14}	a_{16}
a_2	0	0	1	1	0	1	0	0	1	1
a_5	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0
a_6	1	1	0	0	1	1	1	1	1	1
a_7	1	1	1	0	1	1	1	0	0	1
a_8	0	0	1	1	0	1	0	0	1	1
a_9	1	0	1	1	1	0	0	1	1	0
a_{11}	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0
a_{12}	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1
a_{14}	1	1	1	0	1	1	1	0	0	1
a_{16}	1	0	1	1	1	0	0	1	1	0

Аналогичные действия по удалению строк и столбцов, содержащих максимальное количество единиц, проводим и с данной матрицей. Нулевая матрица в этом случае содержит в себе строки и столбцы с номерами 5, 11 и 16. Данные ячейки относятся ко второму кластеру.

Новая матрица *B* без ячеек 5, 11 и 16 представлена в табл. 6. Получаем, что ячейки с номерами 7, 12 и 14 относятся к третьему кластеру. Проделав все последующие действия, получаем, что к четвертому кластеру относятся ячейки 2 и 8. К пятому – ячейка 6, к шестому – ячейка 9. На карте-схеме кластеры обозначены соответствующими римскими цифрами (табл. 7).

Таблица 6

Вид матрицы *B* после третьего преобразования

Номер ячейки	a_2	a_6	a_7	a_8	a_9	a_{12}	a_{14}
a_2	0	1	1	0	1	0	1
a_6	1	0	0	1	1	1	1
a_7	1	1	0	1	1	0	0
a_8	0	1	1	0	1	0	1
a_9	1	1	1	1	0	1	1
a_{12}	0	1	0	0	1	0	0
a_{14}	1	1	0	1	1	0	0

Таблица 7

Карта-схема с текущими кластерами

Номер координаты	1	2	3	4
1	I	IV	I	I
2	II	V	III	IV
3	VI	I	II	III
4	I	III	I	II

На последнем этапе необходимо выбрать, в какую из ячеек кластера следует поместить датчик. Рекомендуемым правилом является размещение датчиков в несмежных ячейках, начиная с кластеров с наименьшим количеством ячеек. В нашем случае это размещение имеет вид, представленный в табл. 8.

Таблица 8

Карта-схема с итоговым размещением датчиков

Номер координаты	1	2	3	4
1			I	
2		V		IV
3	VI			
4		III		II

Заключение. Предложена математическая модель размещения датчиков контроля за состоянием атмосферного воздуха на основе решения NP-трудной задачи о раскраске графа [2], отличающаяся от аналогов тем, что скорость расчетов по разработанной модели примерно в 2 раза выше. Модель может работать с картами размером до 100×100 ячеек, в то время как аналоги – с картами до 50×50 ячеек. Модель отличается наличием дополнительных ограничений на размещение датчиков внутри кластера для предотвращения группировки датчиков в одном месте на карте-схеме, тогда как в моделях-аналогах датчики внутри кластера располагаются случайным образом.

При решении задачи размещения датчиков на заданной территории было получено, что на основе предварительно определенного евклидова расстояния необходимо разместить шесть датчиков контроля за состоянием атмосферного воздуха в районе, ограниченном областью каждого из шести кластеров.

Литература

1. Большаков, А. М. Оценка и управление рисками влияния окружающей среды на здоровье населения / А. М. Большаков, В. Н. Крутько, Е. В. Пуцилло. – М.: Эдиториал УРСС, 1999. – 256 с.
2. Герман, О. В. Алгоритм булевой оптимизации на 0,1-матрице / О. В. Герман, В. Г. Найденко, Е. И. Германович // Вычислительная математика и математическая физика. – 1993. – № 2. – С. 28–33.
3. Колесников, В. Л. Компьютерное моделирование и оптимизация химико-технологических систем: учеб. пособие для вузов / В. Л. Колесников, П. П. Урбанович, И. М. Жарский. – Минск: БГТУ, 2004. – 532 с.

УДК 519.6

Н. А. Жиляк, аспирант

ЛОГИКО-КОМБИНАТОРНЫЙ ПОДХОД К ВЫБОРУ ОПТИМАЛЬНЫХ СТРУКТУР СЛОЖНЫХ ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

The paper considers the issue of unification of the basic algorithm of synthesis of real-time computation structures. The said algorithm suggests multiple execution of a significant number of its blocks because the optimum structure is selected according to this algorithm from an aggregate of viable options at the final stage of algorithm execution. The memory required for storage of data on alternative options depends upon the number of these options which is NP-exhaustion of all combinations of functional devices which satisfy the requirements of real-time computation processing.

Thus one of key tasks to be solved in designing complex technical objects, the real-time systems being a part of them, is the shooting for labor and time saving solutions. Suggested is the method based on the combinatory logic in selecting optimum structures out of an aggregate of correct options.

Введение. Широкий круг задач науки, производства и других отраслей хозяйственной деятельности требует оперативной обработки больших массивов данных. Это задачи из отраслей энергетики, гидро- и радиолокации, радионавигации, сейсмические, геологические, биомедицинские, биохимические, космические исследования, автоматизация научного эксперимента, управление технологическими процессами и объектами, моделирование сложных технических систем, исследования технических объектов в процессе их производства и эксплуатации и т. д. Решение проблемы требует специализированных вычислительных структур (устройств и систем) реального времени.

Большинство реальных процессов и систем описывается более сложными математическими моделями, реализация которых подразумевает создание специализированных, или функционально-ориентированных вычислительных структур (ВС), реализующих соответствующие алгоритмы.

Возможности формализации процесса проектирования таких систем представляются с использованием теории синтеза вычислительных систем реального времени [1].

Данная теория позволяет синтезировать вычислительные структуры в условиях жестких требований к временным параметрам алгоритмов на основе практически любых математических моделей, заданных аналитическим выражением во временной области или алгоритмом ее реализации, обеспечить высокие технические показатели проектируемых вычислительных структур, в первую очередь, загруженности и ускорения за счет распараллеливания и конвейеризации его путей, автоматизировать процесс синтеза вычислительных систем реального времени. На основе теории синтеза вычислительных структур был разработан базовый алгоритм синтеза вычислительных структур реального времени (ВСРВ) [2].

Предложенный алгоритм предполагает многократное выполнение значительного числа его блоков, так как выбор оптимальной структуры из множества работоспособных вариантов в соответствии с данным алгоритмом осуществляется на заключительном этапе выполнения алгоритма, при этом объем памяти, требуемой для хранения информации об альтернативных вариантах, и трудоемкость алгоритма пропорциональны числу этих вариантов, которое представляет NP-полный перебор всех комбинаций функциональный устройств (ФУ), удовлетворяющих требованиям реализации вычислительного процесса в реальном времени [1].

Таким образом, одной из центральных задач, решаемых при проектировании сложных технических объектов, к которым относятся СВРВ, является поиск снижения трудоемкости проектирования. Для решения данной задачи предлагается метод, основанный на логико-комбинаторном подходе к выбору оптимальных структур из множества правильных вариантов.

Основная часть. В соответствии с теорией синтеза ВСРВ [2] множество альтернативных вариантов структуры проектируемого объекта может быть неявно представлено в виде множества векторов назначения R вида

$$[\vec{R}] = (r_1, r_2, \ldots, r_i, \ldots, r_I), \quad (1)$$

где $i = 1,\ldots, I$, где I – количество вершин графа вычислительного алгоритма (ГВА) реализации математической модели проектируемого объекта; $r_i = j$ – номер функционального устройства из множества $Z = \{z_1, z_2, \ldots, z_i, \ldots, z_I\}$ экземпляров классов $Z_{n|n = 1\ldots N}$ типовых элементов, реализующих в совокупности все операции некоторого класса задач, т. е. элемента $z_k^{(n)}$ из подкласса $Z_n \leftrightarrow \varphi_n \leftrightarrow \nu_i$, т. е. класса элементов, реализующих функцию φ_n, отождествленную с вершиной ν_i ГВА; N – мощность множества Z_n.

При этом в общем случае может иметь место пересечение подмножеств (рис. 1):

$$z_n : Z = \bigcap_{n=1}^{N} Z_n. \qquad (2)$$

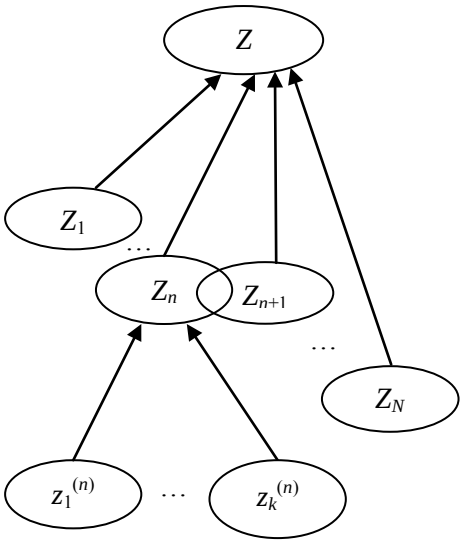


Рис. 1. Иерархия технических средств, используемых при синтезе сложного технического объекта

На данном рисунке $z_k^{(n)}$ – k-й элемент множества Z_n.

Для $z_k^{(n)}$ справедливо равенство

$$Z_n = \bigcup_{k=1}^{K_n} z_k^{(n)}. \qquad (3)$$

Каждый объект $z \in Z$ характеризуется m-кортежами вида

$$\langle \tau_n^{(j)}, \alpha_n^{(j)}, \beta_n^{(j)}, \ldots, \varpi_n^{(j)} \rangle, \qquad (4)$$

где $\tau_n^{(j)}$ – время реализации j-м ФУ n-й операции; $\alpha_n^{(j)}$, $\beta_n^{(j)}$, $\varpi_n^{(j)}$ – атрибуты, соответствующие техническим характеристикам j-го ФУ (потребляемая энергия, стоимость, масса, габариты и т. п.), учитываемые выборочно в зависимости от постановки задачи проектирования.

Из вышесказанного следует, что назначение ФУ каждой конкретной вершине ГВА определяется неоднозначно из условия удовлетворения определенных требований, среди которых при проектировании ВСРВ первостепенным является значение требования реализации вычислительного процесса в реальном времени. Как показано в (1), этому требованию соответствуют ФУ, для которых выполняется неравенство

$$\tau_i^{(j)} \le \Delta t_{\text{зад}}, \qquad (5)$$

где $\tau_i^{(j)}$ – время реализации j-м ФУ операции, отождествленной с i-й вершиной; $\Delta t_{\text{зад}}$ – некоторый заданный интервал времени, определяемый требованиями реализации процесса в РВ.

Очевидно, что неоднозначность отношения

$$z_k^{(n)} : \tau_i^{(n)} \le \Delta t_{\text{зад}} \leftrightarrow V_i \qquad (6)$$

предполагает множественность вариантов назначения ФУ вершинам ГВА, которая может быть оценена множеством векторов назначения, формируемых из матрицы соответствия [1]:

$$M = [R] = \prod_{i=1}^{I} \sum_{i=1}^{I} d_{ij}, \qquad (7)$$

где [R] – мощность множества векторов назначения; d_{ij} – элемент матрицы соответствия.

В связи с вышесказанным трудоемкость алгоритма синтеза ВСРВ складывается из следующих компонент:

$$Q^{\text{Б}} = Q_{\text{Л}} + Q_r M, \qquad (8)$$

где $Q^{\text{Б}}$ – трудоемкость базового алгоритма; $Q_{\text{Л}}$ – трудоемкость линейной ветви алгоритма; Q_r – трудоемкость обработки вектора временной развертки (ВВР); M – число повторений цикла обработки ВВР, определяемое оценкой множества (7).

В соответствии с одним из центральных положений теории синтеза вычислительных структур реального времени для каждого вектора из множества (1) должна выполняться процедура определения множеств свертываемых вершин. Предположим, что граф вычислительного алгоритма или нагруженный граф (так называемый граф базовой структуры) содержит дуги (i, k), (j, k), (l, n), (m, n), (s, t), (q, t) (рис. 2), при этом в соответствии с выбранным на одном из более ранних этапов синтеза вектором назначения $r_k = r_n = r_t$, т. е. $\nu_k \leftrightarrow z_j$, $\nu_n \leftrightarrow z_j$, $\nu_t \leftrightarrow z_j$.

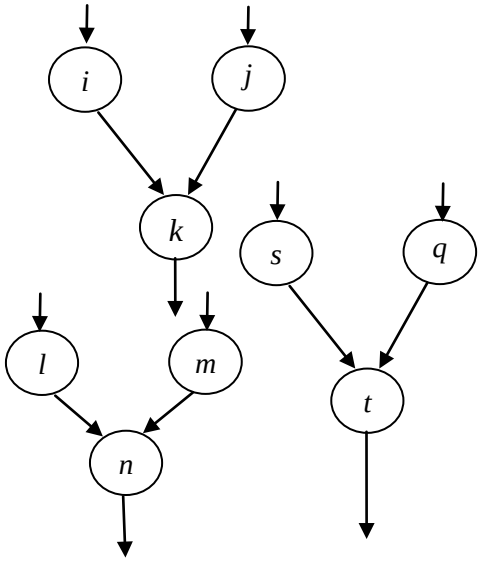


Рис. 2. Фрагмент ГВА

Тогда возможны следующие варианты множества свертываемых вершин:

$S_0^{(1)} = 0$ – пустое множество (отсутствие свертки);

$$S_1^{(1)} = (k, n);\ S_2^{(1)} = (k, t); \qquad (9)$$

$$S_3^{(1)} = (t, n);\ S_4^{(1)} = (k, n, t).$$

В общем случае справедливо следующее утверждение.

Если существуют $(I, k), (l, n), \ldots, (s, t)$ и $k, n, \ldots, t \subset S$, то возможно преобразование

$$(I, k) \xrightarrow{\text{ДВ}} (I, \nu), (\nu, k); (l, n) \xrightarrow{\text{ДВ}} (l, w), (w, n); \ldots; (s, t) \xrightarrow{\text{ДВ}} (s, p); (p, t), (\nu, w, p) = S^1,$$

т. е. добавленные вершины образуют новые множества свертываемых вершин, каждой из которых назначается ФЭ одного типа (один экземпляр $a^{(k)}{}_e$). ДВ – операция добавления вершины.

В силу вышесказанного каждый из векторов $\vec{R}$ является порождающим для нового множества векторов назначения и соответствующих им структур, что позволяет на одном из ранних этапов синтеза свести задачу проектирования к выбору нескольких оптимальных вариантов по критериям, представленным кортежем (4).

Задача формализации этого важнейшего этапа проектирования сложных технических объектов (выбор оптимального варианта структуры) может быть решена с помощью аппарата булевых логических функций [3].

Характеристической булевой функцией (ХБФ) множества альтернативных вариантов называется такая булева функция $f(z_1, \ldots, z_n)$, что простая импликанта этой функции равна единице тогда и только тогда, когда ее аргументы $Z_1{}^1, \ldots, z_1{}^n$ представляют собой правильный вариант структуры.

Установим взаимно однозначное соответствие между ФЭ и аргументами характеристической функции:

$$z_i \leftrightarrow b_i. \qquad (10)$$

Тогда перечисление всех вариантов структуры проектируемого объекта можно представить в виде дизъюнкции всех простых импликант ХБФ, т. е. сокращенной дизъюнктивной нормальной формы:

$$F(b_1{}^{q1}, \ldots, b_n{}^q) = (b_1{}^{(1)} \wedge b_2{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge b_{n1}{}^{(1)}) \vee$$
$$\vee (b_1{}^{(2)} \wedge b_2{}^{(2)} \wedge \ldots \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge b_n{}^{(2)}) \vee$$
$$\vee \ldots \vee b_n{}^{(Q)}). \qquad (11)$$

Операцией конъюнкции связываются переменные, включаемые совместно в один из вариантов структуры, функция дизъюнкции соответствует операции выбора одного из альтернативных вариантов.

С ростом числа альтернативных вариантов целесообразно использовать особенные скобочные нормальные формы характеристической булевой функции. Для ее формирования достаточно выполнить операцию факторизации и использовать правила булевой алгебры, в частности: $x \wedge x \wedge \ldots \wedge x = x$. Для приведенного примера (9) получим

$$F(b_1{}^{(q)}, \ldots, b_{Nq}{}^{(q)}) =$$
$$= (b_\alpha{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge b_\beta{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_\gamma \wedge \ldots \wedge b_i{}^{(2)} \wedge$$
$$\wedge \ldots \wedge b_i{}^{(3)}) \vee (b_\alpha{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge b_\beta{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge b_\gamma \wedge \ldots \wedge b_i{}^{(1)}$$
$$\wedge$$
$$\wedge b_j{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge b_i{}^{(2)}) \vee (b_\alpha{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge b_\beta{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge$$
$$\wedge b_i{}^{(2)} \wedge b_\gamma \ldots \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge \ldots) \vee (b_\alpha \wedge \ldots \wedge b_\beta \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge$$
$$\wedge b_\gamma \ldots \wedge \ldots \wedge b_i{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge b_j{}^{(1)} \wedge \ldots b_i{}^{(1)} \wedge \ldots \wedge b_j{}^{(1)}) =$$
$$b_\alpha \wedge b_\beta \wedge$$
$$\wedge \ldots \wedge b_\gamma \wedge [(b_i{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(2)} \wedge b_i{}^{(3)}) \vee (b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge$$
$$\wedge b_i{}^{(2)}) \vee (b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(2)} \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)}) \vee (b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(1)}$$
$$\wedge$$
$$\wedge b_j{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)})] =$$
$$b_\alpha : b_\beta \wedge \ldots \wedge b_\gamma \wedge [(b_i{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(2)} \wedge b_i{}^{(3)}) \vee$$
$$\wedge (b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)} \wedge b_i{}^{(2)}) \vee (b_i{}^{(1)} \wedge b_j{}^{(1)})].$$
$$(12)$$

Данное выражение содержит неисчерпывающее количество всех возможных вариантов из NP-полного перебора; некоторые импликанты могут дублировать друг друга, представляя, тем не менее, разные варианты структуры.

Выбор оптимального варианта в простейшем случае может решаться пр и следующей постановке оптимизационной задачи:

$$\mathrm{Pb} \to \min,\ Az_n \le \alpha, \qquad (13)$$

где $\mathrm{P} = (\mathrm{P}_1, \ldots, \mathrm{P}_n)$ – вектор весов элементов $Z_i \in Z$; b – вектор булевых переменных, обозначающих отдельные элементы из множества Z; $Az_n \le \alpha$ – система ограничений для атрибутов проектируемого объекта.

Например, процедура построения варианта структуры с минимальным суммарным весом f-элементов, составляющих структуру, может быть осуществлена следующим образом:

1) замена в формуле ХБФ – $b_i \to P_i$;

2) замена логических функций на арифметические: конъюнкция $\to$ арифметическое сложение, дизъюнкция $\to$ функция взятия минимума.

Предположим особенная скобочная нормальная форма имеет вид

$$f(z_1, \ldots, z_{13}) = z_1\, z_3 [z_{13}(z_7 \vee z_8 \vee z_{12} z_6) \vee$$
$$\vee z_6 z_{11}(z_7 \vee z_8 \vee z_{10} \vee z_{12}) \vee z_{10} \vee z_{12}) \vee$$
$$\vee (z_4 \vee z_5 z_2 \vee z_9)(z_7 \vee z_8 \vee z_{12} z_6 \vee z_{10})]. \qquad (14)$$

Пусть веса f-элементов, выражение в условных единицах равны: $p_1 = 0$, $p_2 = 5$ $p_3 = 4$, $p_4 = 7$, $p_5 = 8$, $p_6 = 3$, $p_7 = 6$, $p_8 = 4$, $p_9 = 6$, $p_{10} = 4$, $p_{11} = 5$, $p_{12} = 3$. Тогда, чтобы зафиксировать варианты подструктур, получающихся в процессе вычислений, значениям весов приписываются сложные индексы в виде подформул соответствующих подструктур. Ради краткости в этих подформу-

лах указываются только индексы переменных $z_5(I = 1, \ldots, n)$ вместо самих переменных. Тогда в соответствии с формулой (8) можно записать:

$$\min p_f = p_3 + \min(p_{13} + \min(p_7, p_8, p_{12} + p_6),$$
$$p_6 + p_{11} + \min(p_7, p_8, p_{10}, p_{12}),$$
$$\min(p_4, p_5 + p_2, p_9) + \min(p_7, p_8, p_{12} + p_6, p_{10})) =$$
$$= 4_3 + \min(3_{13} + 4_8, 3_6 + 5_{11} + 4_{8\vee 10}, 6_9 + 4_{8\vee 10}) =$$
$$= 4_3 + \min(7_{13\cdot 8}, 12_{6\cdot 11(8\vee 10)}, 10_{9(8\vee 10)}) =$$
$$= 4_3 + 7_{13\cdot 8} = 11_{3\cdot 13\cdot 8}.$$

Таким образом, минимальный вес $z = 11$ имеет вариант $z_1 z_3 z_{13} z_8$.

В процессе получения оптимального решения выполнено суммирование тринадцати величин и взятие минимума от семнадцати величин. Этот метод может быть применен после реализации процедуры базового алгоритма «Определение множества свертываемых вершин».

Эффективность использования рассмотренной методологии выбора оптимальной структуры оценивается таким образом:

$$Э = \frac{Q^{Б} - Q^{М}}{Q^{Б}} 100\%, \qquad (15)$$

где $Q^{Б}$ определена по выражению (8);

$$Q^{М} = Q_{Л} + Q_r M, \qquad (16)$$

где Q_r – трудоемкость частного алгоритма реализации рассмотренной методики (формирования сокращенной дизъюнктивной нормальной формы, преобразование сокращенной дизъюнктивной нормальной формы в особенную скобочную нормальную форму, оптимизация на одной из начальных стадий проектирования); M – количество импликант в особенной скобочной нормальной форме.

Заключение. Использование данного метода выбора из множества альтернативных вариантов проектируемого объекта позволит на одной из ранних стадий проектирования ограничить число рассматриваемых вариантов структуры и тем самым снизить трудоемкость проектирования и объем памяти, требуемой для хранения информации о множестве альтернативных вариантов структуры проектируемого объекта.

Применение специализированных вычислительных средств в составе автоматизированных систем управления, контроля, испытаний, моделирования, обучения и др. содействует обеспечению выполнения этими системами своих функций в реальном масштабе времени, повышает точность обработки данных и формирования воздействий на объект исследования, снижает себестоимость систем. Создание систем автоматизированного проектирования средств вычислительной техники позволит поднять эту отрасль на качественно новый уровень, обеспечить в сочетании с лучшими мировыми образцами САПР автоматизацию всех стадий проектирования ВС и других технических систем. Предложенные методы представления и синтеза математических моделей для вычислительных структур, синтеза вычислительных структур реального времени и средств управления нашли применение при разработке программного обеспечения безбумажного самописца – регистратора РМ-2201. Данный прибор разработан в ОАО «МНИПИ» с использованием новых технологий в рамках государственной научно-технической программы «Радиоэлектроника, телекоммуникации, приборостроение».

Электронный самописец осуществляет сбор, обработку и архивирование результатов измерения.

Алгоритм функционирования системы составлен таким образом, чтобы обеспечить надежное функционирование всей системы в целом. Основными требованиями к системе являются бесперебойный сбор данных, запись измеренных данных на флэш-диск, своевременная сигнализация оператора о превышении сигналом уставки, запись данных в базу данных. Все эти требования приходилось учитывать при проектировании алгоритма функционирования системы.

Одной из важнейших задач системы является опрос датчиков. Поэтому данная операция осуществляется независимо от стадии, на которой находится выполнение программы в данный момент времени. Опрос датчиков проводится в соответствии с требованием к системе относительно периода опроса датчиков с целью получения корректных результатов.

Таким образом, предложенный метод позволяет повысить производительность вычислительных процессов, ориентированных на реализацию заданных функций прибора, что в свою очередь дает положительный экономический эффект при реализации регистратора РМ-2201, выпускаемого серийно ОАО «МНИПИ».

Литература

1. Жиляк, Н. А. Базовый алгоритм синтеза вычислительных структур реального времени / Н. А. Жиляк, А. С. Кобайло // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 147–150.

2. Кобайло, А. С. Единичные функции для математических моделей вычислительных процессов / А. С. Кобайло. – Минск: БГУИР, 2001.

3. Анкудинов, Г. И. Синтез структуры сложных объектов. Логико-комбинаторный подход / Г. И. Анкудинов. – Л.: Изд-во Ленинград. ун-та, 1986.

УДК 519.6

С. И. Акунович, канд. техн. наук; Н. А. Жиляк, аспирант

БАЗОВЫЙ АЛГОРИТМ СИНТЕЗА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СТРУКТУР РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ ДЛЯ ТЕПЛОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

Discussed are some aspects of implementation of a unified basic algorithm of synthesis of real-time computation structures in the PM-2201 electronic recorder designed for DC current and voltage measurements via 6, 9, 12 or 15 decoupled channels as well as for measurements of non-electric values converted to electric signals of DC current and resistance. Measurement results are further processed, displayed, collected and stored; emergency situations are announced.

Development of hardware and software was one of the main tasks in designing the instrument. Basically, software for the PM-2201 recorder comprises one of the algorithms providing for computer resources share. A novel algorithm and the software utilizing this algorithm provide for thermo EMF-to-temperature processing and conversion. All that resulted in saving labor and instrument computing resources.

Введение. Республика Беларусь обладает развитой структурой машиностроительных предприятий, предприятий стройиндустрии, теплоэнергетического и нефтехимического профилей, предприятий по переработке и производству сельскохозяйственной продукции и фармацевтической индустрии. Для этих отраслей основной формой эксплуатационного контроля является измерение, обработка, визуализация и активный допусковый контроль длительных реализаций технологических процессов. В настоящее время на большинстве предприятий Республики Беларусь и странах СНГ применяются бумажные электромеханические самописцы, находящиеся в эксплуатации с начала 80-х гг. К существенным недостаткам бумажных регистраторов можно отнести большую трудоемкость проведения ретроспективного анализа информации с бумажной ленты, отсутствие возможности оперативного накопления данных в долговременном архиве на машинных носителях информации; сложность проведения оперативного синхронного анализа данных по нескольким каналам с привязкой ко времени и дате съема информации.

Основная часть. Появление на мировом рынке безбумажных электронных регистраторов и опыт их эксплуатации в различных отраслях промышленности позволили отчетливо обрисовать тенденцию их развития и сформировать технические требования на современном этапе.

К наиболее важным эксплуатационным характеристикам любого промышленного прибора можно отнести степень многофункциональности и универсальности, получаемые не за счет избыточности, а за счет аппаратно-программной агрегатируемости. Реализация этих требований возможна при использовании современных встроенных промышленных компьютеров.

Безбумажный самописец-регистратор PM-2201 – электронный самописец, осуществляющий сбор, обработку и архивирование результатов измерения, разработан в ОАО «МНИПИ» с использованием новых технологий и представляет собой современный прибор, не уступающий по своим техническим характеристикам и функциональным возможностям приборам аналогичного класса таких известных фирм, как YOKOGAWA, JUMO и SIEMENS.

Регистратор измерительный многоканальный PM-2201 предназначен для измерения по 6, 9, 12 или 15-ти гальванически изолированным каналам силы и напряжения постоянного тока, а также неэлектрических величин, преобразованных в электрические сигналы постоянного тока, и сопротивления постоянному току, для обработки результатов измерений, их визуализации, сбора, хранения и сигнализации аварийных ситуаций [1].

Отображение измерений производится по группам каналов. Количество каналов в группе – от 1 до 6. Скорость обновления отображения в каждой группе выбирается пользователем из списка: 1, 2, 3, 5, 10, 15, 30 с, 1, 2, 3, 6 мин.

Запись в архив происходит в соответствии с настройками пользователя. Пользователь имеет возможность сохранять мгновенные значения результатов измерений с назначенным периодом записи, а также средние значения за минуту или час и экстремальные значения за минуту или час. Также предоставляется возможность ограничения размера файлов и автоматическое удаление старых архивов.

Настройка измерительных (аналоговых) каналов включает в себя:

– набор идентификатора канала (на виртуальной клавиатуре);
– назначение вида сигнала и диапазона;
– назначение уставок;
– выбор шкалы для графиков и гистограмм;
– выбор цвета отображения канала;
– выбор ширины линии для графика.

Для каждого канала (аналогового или математического) можно назначить до четырех

уставок. В данной версии программы доступными являются четыре состояния.

1. Сигнал выше уставки. Для данного типа уставки назначается значение уставки, время задержки *T* и гистерезис.

Значение гистерезиса можно задавать по абсолютной величине (в выбранных единицах измерения) или в процентах от разности верхней и нижней границ диапазона измерений.

Если значение гистерезиса равно нулю, событие «Вход в зону нормы (из максимума)» регистрируется, когда измеренное значение станет меньше, чем значение уставки.

Если значение гистерезиса больше нуля, то событие «Вход в зону нормы (из максимума)» регистрируется только тогда, когда измеренное значение станет меньше, чем значение уставки минус абсолютное значение гистерезиса.

2. Сигнал ниже уставки. Аналогично пункту 1 назначается значение уставки, время задержки *T* и гистерезис.

Если время задержки равно нулю, событие «Превышение уставки по минимуму» регистрируется, когда измеренное значение станет равным или ниже значения уставки.

Если время задержки больше нуля, то событие «Превышение уставки по минимуму» регистрируется через время *T* после момента, когда измеренное значение станет равным или ниже значения уставки, и если измерения остаются ниже значения уставки в течение этого периода времени.

Значение гистерезиса можно задавать по абсолютной величине (в выбранных единицах измерения) или в процентах от разности верхней и нижней границ диапазона измерений.

Если значение гистерезиса равно нулю, событие «Вход в зону нормы (из минимума)» регистрируется, когда измеренное значение станет выше, чем значение уставки.

Если значение гистерезиса больше нуля, то регистрируется событие «Вход в зону нормы (из минимума)» только тогда, когда измеренное значение станет больше, чем значение уставки плюс абсолютное значение гистерезиса.

3. Скорость изменения сигнала по возрастанию. Проверяется величина измеренных значений за определенный интервал времени. Событие регистрируется, если величина возрастания становится больше или равной указанному значению.

4. Скорость изменения сигнала по убыванию. Проверяется величина измеренных значений за определенный интервал времени. Событие регистрируется, если величина убывания становится больше или равной указанному значению.

Прибор регистрирует следующие события, которые отображаются в таблице обзора сигнализаций (журнал событий), записываются в файл (если установлен соответствующий режим) и подают сигнал на включение или выключение реле (номер реле указывает пользователь в настройках канала).

Многофункциональность и универсальность прибора достигается, в частности, за счет использования компьютера с тактовой частотой 500–800 МГц (на этих тактовых частотах в настоящее время не требуется принудительного охлаждения процессора, что очень важно для промышленного использования). Также применяются модули с универсальными измерительными входами, позволяющими производить измерение постоянного напряжения и тока, сопротивления постоянному току, что даст возможность подключать почти все используемые на практике первичные датчики, преобразующие неэлектрические сигналы в электрические, в частности термоЭДС в температуру от термоэлектрических преобразователей (ТП).

Одно из основных и наукоемких звеньев рассматриваемого прибора – это разработка программно-аппаратного комплекса прибора.

Программная часть регистратора РМ-2201 включает в себя один из алгоритмов, позволяющих реализовать наиболее оптимальное распределение машинных ресурсов. В свою очередь программное обеспечение, созданное на основе предложенного алгоритма, обеспечило обработку и преобразование термоЭДС в температуру, что ускорило процесс производства и освободило другие не менее важные машинные ресурсы прибора [2].

При отладке программного обеспечения была обеспечена работа аналоговых каналов, которые содержат настройки на виды измерений, например на измерение термоЭДС типа B, S, R, T, L, N, E и т. д. Зависимости выдаваемого ими электрического сигнала от температуры описываются полиномом высокой степени, т. е. номинальной статической характеристикой (НСХ), аппроксимируемой полиномами 8–14-й степени.

Алгоритм обработки сигналов от ТП создан на основе теории синтеза вычислительных систем реального времени. Теория синтеза вычислительных систем реального времени позволила синтезировать вычислительную систему обработки сигналов от ТП в условиях жестких требований к временным параметрам на основе полиномов, заданных аналитическим выражением во временной области и алгоритмом их реализации, обеспечивающих высокие метрологические показатели регистратора РМ-2201 за счет распараллеливания и конвейеризации реализации его путей. Исходя из предложенной теории, вершинами исходного графа алгоритма представляются полиномы, описывающие зависимость термоЭДС от температуры в градусах Цельсия, которые требуются для измерения ЭДС при определенной постановке задачи. При этом с помощью

предложенных данных назначаются уровни временной иерархии вершинам графа вычислительного алгоритма реализации математической модели процесса и условия реализуемости пути графа в реальном масштабе времени.

Обобщенный алгоритм, основанный на базовых положениях данной теории, представляет последовательность процедур реализации частных алгоритмов синтеза [3].

Вычислительная структура реального времени осуществляет вычислительный процесс общего вида

$$Y = F(X, Z, C), \qquad (1)$$

где Y, X, Z – множество соответственно выходных, входных и промежуточных переменных; C – множество констант.

Алгоритм решения задачи предполагает выполнение следующих процедур.

1. Формирование графа вычислительного алгоритма:

$$F(X, \ldots, C) \to G\,(V, E), \qquad (2)$$

где множество вершин V соответствуют множеству операций отдельных фрагментов алгоритма, множество E-ребер – информационным связям. Граф G может быть описан матрицей инцидентности, которая имеет I вершин, J дуг и элементы a_{ij}.

2. Определение полных путей графа вычислительного алгоритма (путь, связывающий одну из вершин первого яруса с одной из концевых вершин графа).

Полным путем L_ν графа алгоритма будем называть путь, связывающий вершину $\nu \leftrightarrow x_n$, $x_n \in X$ с вершиной ν:

$$\nu \leftrightarrow y_m,\ y_m \in Y, \qquad (3)$$

где ν – дуги графа вычислительного алгоритма; y_m – ряд входных переменных.

3. Назначение уровней временной иерархии вершинам графа вычислительного алгоритма.

Уровнем γ временной иерархии подмножества вершин графа $V = (G, V)$ называется их приоритет, соответствующий требуемой скорости обработки данных каждой из вершин данного подмножества и определяемый следующим образом:

$$\forall \nu_I \leftrightarrow V : \nu_I \leftrightarrow \Delta t\,(\varphi_j) = \Delta t(\gamma) | \gamma = 1, \ldots, \Gamma,$$

$$\Delta t(\gamma) = \min(\Delta t(\varphi \subset \Phi)),$$

,

$$\Gamma \leftrightarrow \min \Delta t(\varphi_j) \vee C, \qquad (4)$$

где $\Phi = X \cup Y \cup Z \leftrightarrow V$; $\Phi(j) = \cup\varphi_j \leftrightarrow \Delta t(\gamma)$ – подмножества переменных модели (1) мощностью K_ν.

Подмножество вершин V_ν графа алгоритма $V = (V, E)$, для которого найдено соответствие

$$V(\gamma) \leftrightarrow \Delta t(\gamma), \qquad (5)$$

называется множеством вершин γ-го уровня временной иерархии.

Интервал времени $\Delta t(\gamma)$, для которого установлено соответствие

$$\Delta t(\gamma) \leftrightarrow V(\gamma) : G = G(V, E),\ V(\gamma) \subset V, \qquad (6)$$

называется шагом дискретизации γ-го уровня временной иерархии.

4. Назначение функциональных устройств вершинам графа базовой структуры («нагруженный» граф), формирование векторов назначения вида

$$R = \left\{ \vec{R}^{(1)}, \vec{R}^{(2)}, \ldots, \vec{R}^{(w)} \right\},\ w = \prod_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} d_{ij}, \qquad (7)$$

векторов размером I, элементы которых $r_i^{(u)} = j$; $d_{ij} = 1$, $j = 1, \ldots, J$, $I = 1, \ldots, I$, $u = 1, \ldots, w$, $R^{(-n)} \neq R^{(-m)} \forall n \neq m$; $n, m = 1, \ldots, w$ называются множеством векторов назначения.

Если вершина ν_i принадлежит множеству вершин $V(\gamma) \leftrightarrow \Delta t(\gamma)$, то данной вершине может быть назначено функциональное устройство в виде термопары, для которого выполняется условие

$$\tau^j = (\gamma) \leftrightarrow \Delta t(j), \qquad (8)$$

где τ^j – время обработки j-м устройством операции, отождествленной с вершиной ν_i.

Все последующие шаги алгоритма (5–17) должны быть выполнены для каждого из найденных векторов назначения, множество которых определяется из выражения (8).

5. Формирование вектора реализации (элемент τ_I равен времени выполнения операции, отождествленной с i-й вершиной функционального устройства (в нашем случае – термопарой), назначенного в соответствии с вектором назначения).

6. Формирование графа алгоритма с буферной памятью для систем, рассчитанных на использование средств с различными уровнями временной иерархии.

7. Формирование усеченных путей Υ-х уровней временной иерархии. J-м усеченным путем γ-го уровня временной иерархии называется путь γ-го уровня временной иерархии, для множества вершин V которого справедливо

$$V(j, \gamma) = V_L(\gamma) \setminus \bigcup_{k=1}^{j-1} V(k, \gamma). \qquad (9)$$

8. Определение конвейеризируемых путей и ступеней конвейера.

В ступень конвейера должны входить ФУ, для которых суммарное время выполнения операций меньше или равно его циклу.

9. Определение множества свертываемых вершин (для неконвейеризированных путей).

10. Построение вычислительного графа алгоритма (добавление вершин при необходимости введения служебных устройств (мультиплексоры)).

11. Проверка реализуемости вычислительной структуры реального времени (выполнение условия реализуемости пути графа алгоритма в РМВ).

12. Формирование вектора временной развертки.

13. Формирование вектора требований к памяти для хранения промежуточных результатов (с регистровыми файлами, индексы положительных элементов данного вектора являются номерами дуг, требующих выполнения операции добавления вершины, которой назначается блок памяти).

14. Анализ реализуемости вычислительной структуры (наличие отрицательных элементов в данном векторе указывает на нереализуемость ВС на выбранном векторе назначения).

15. Разработка графа вычислительной структуры.

16. Построение функционала временной развертки (определяет программу взаимодействия функциональных устройств, составляющих вычислительную систему, на одном цикле ее функционирования).

17. Выбор из множества работоспособных синтезированных структур структуры, наилучшим образом удовлетворяющей заданным критериям оптимальности [4].

Заключение. В результате реализации алгоритма, основанного на теории синтеза вычислительных систем реального времени, будут сформированы:

– граф вычислительной структуры, транспонируемый в структурную схему проектируемой системы, и спецификация его вершин;

– вектор назначения, который может стать основой создания принципиальных схем;

– функционал временной развертки, являющийся основой синхронизации проектируемой системы и создания средств управления данной системой; представление процессов формирования управляющих сигналов в виде функционала временной развертки позволит формировать управляющие сигналы для управления регистратором многоканальным РМ-2201 и технологическими процессами.

Алгоритм функционирования системы составлен таким образом, чтобы обеспечить надежное функционирование всей системы в целом. Основными требованиями к системе являются бесперебойный сбор данных, запись измеренных данных на флэш-диск, своевременная сигнализация оператора о превышении сигналом уставки, запись данных в базу данных. Алгоритм, выполняемый на персональном компьютере, реализуется параллельно основному алгоритму и входит в состав общего алгоритма функционирования системы.

Основной причиной выбора данного регистратора для построения информационно-измерительной системы является то, что прибор не уступает зарубежным аналогам по функциональности, имеет значительно меньшую стоимость и полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к системе. Его стоимость в два, а по сравнению с некоторыми моделями и в три, раза ниже стоимости вышеперечисленных самописцев. А так как регистрирующее устройство является наиболее дорогостоящим элементом системы, то выбор самописца с меньшей стоимостью позволит существенно сократить стоимость системы в целом.

Литература

1. Носенко, В. А. Специализированные информационно-измерительные системы / В. А. Носенко, А. В. Дзюба, А. И. Денис // Доклады Национальной академии наук Беларуси. Минск. – 2005. – Т. 49, № 4.

2. Никифорова, З. С. Роль измерительно-информационных систем в повышении технического уровня и качества выпускаемой продукции / З. С. Никифорова, С. А. Попоудина, А. В. Дзюба. – Минск: БелНИИТИ, 1983. – 13 с. – (Обзорная информация).

3. Жиляк, Н. А. Базовый алгоритм синтеза вычислительных структур реального времени / Н. А. Жиляк, А. С. Кобайло // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 147–150.

4. Шпаковский, Г. И. Архитектура параллельных ЭВМ / Г. И. Шпаковский. – Минск: Университетское, 1989. – С. 24–36.

УДК 681.325.3

Д. В. Шиман, ассистент

КОМПЬЮТЕРНАЯ ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕДАЧИ ИНФОРМАЦИИ НА ОСНОВЕ ПЕРЕМЕЖИТЕЛЯ И ДВУМЕРНОГО ЛИНЕЙНОГО ИТЕРАТИВНОГО КОДА С ОБЪЕДИНЕННЫМИ ДВОЙНЫМИ ДИАГОНАЛЬНЫМИ ПРОВЕРКАМИ

The article describes the computer simulation model of the information transmissions on the basis of interleaving and two-dimensional linear iterative code with the united dual diagonal checks. This complex information transformation makes it possible to correct repeated errors with smaller expenditures of time and simplicity of the algorithm correction. In model is realized the opportunity of management by throughput of the channel, likelihood characteristics of the errors arising at data transmission, and also definition of amount of not corrected erroneous bit after decoding.

Введение. Как известно, при передаче и хранении информации все больше факторов влияют на ее качество, внося в последовательности данных различного рода ошибки. Для поиска и исправления таких ошибок используются разнообразные методы. Наиболее эффективными из таких методов являются те, которые базируются на применении помехоустойчивых корректирующих кодов, перемежении символов исходной последовательности и степени группирования [1–3].

С увеличением кратности ошибки усложняется алгоритм ее обнаружения и исправления, что влечет дополнительную задержку во времени при передаче данных.

Одним из направлений решения проблемы является комплексное преобразование передаваемой информации, состоящее из нескольких этапов. На первом этапе необходимо избавиться от группирующихся ошибок путем преобразования их в одиночные, а на втором – с помощью соответствующих кодов, которые позволяют исправить все или большинство ошибок. Отсутствие статистических данных о кратности и интенсивности ошибки, возникающей в канале передачи данных, а также трудность и относительно высокая стоимость проведения реальных экспериментов послужили причиной создания компьютерной имитационной модели.

Основная часть. Для исследования эффективности комплексного преобразования данных в разработанной компьютерной модели выполнена имитация двух схем передачи информации (рис. 1). Процесс передачи информации проходит через эти две схемы параллельно.

Компьютерная имитационная модель передачи информации реализована в среде Delphi 7. За основу исходных данных взят массив, заполненный двоичной информацией случайным образом. Кодер построен на основе ранее разработанного усеченного двумерного линейного итеративного кода с объединенными двойными диагональными проверками [4]. Кодирование информации осуществляется путем добавления проверочных бит к информационной последовательности. Формирование проверочных бит матрицы размерностью $k1$ строк на $k2$ столбцов по вертикали, горизонтали и двум диагоналям производится путем суммирования по модулю два всех информационных символов каждого из направления. По своим корректирующим способностям данный код позволяет исправить только одиночные и двойные ошибки. Декодер построен на основе синдромного декодирования, являющегося одним из наиболее распространенных методов коррекции ошибок блочными кодами. Данный декодер считается декодером максимального правдоподобия при декодировании жестких решений.

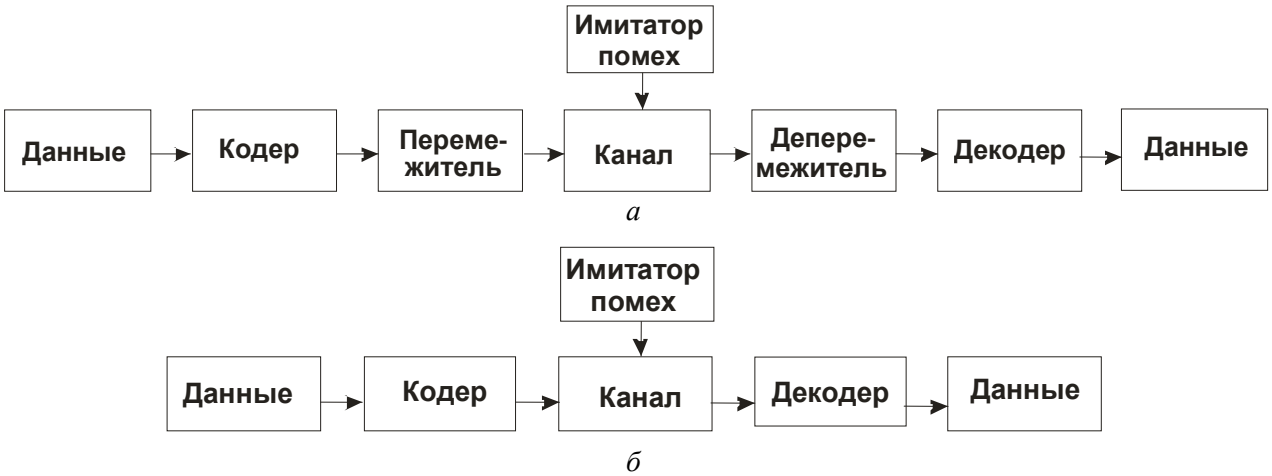


Рис. 1. Схемы передачи информации:
а – на основе кодера и перемежителя; *б* – на основе кодера

На основе ранее разработанного псевдослучайного метода перемежения построены блоки перемежитель и деперемежитель [5]. Процедура перемежения состоит в перестановке символов кодированной последовательности до ее модуляции и восстановлении исходной последовательности после демодуляции. Перестановка позволяет так разнести рядом стоящие символы, чтобы они оказались разделены группой других символов, передаваемых в том же блоке данных. Данная операция не вносит избыточности, а только изменяет порядок следования символов или бит. В разработанном методе перемежение (деперемежение) основано на использовании матрицы, строки и столбцы которой формируются последовательностью входных символов. Для удобства реализации метода матричные расчеты преобразованы в линейные:

$$adr_k \leftarrow \left(\left(\left(\operatorname{int}\left(\frac{k}{n2-1}\right)+1\right)^{d1} \bmod n1\right)-1+\right.$$

$$+\left(\left(\left(k \bmod (n2-1)+1\right)^{d2} \bmod n2\right)-1\right)\times$$

$$\left.\times\,(n2-1)=v,\right.$$

где int – целочисленное деление; k – адрес памяти $\left(0 \le k \le (N-1)\right)$; $n2$ – длина столбцов; $n1$ – длина строк; $d1$, $d2$ – степенные коэффициенты. В приведенном соотношении учитывается тот факт, что считывание символов осуществляется по столбцам. Данная формальная запись означает, что v-й бит входной последовательности будет считан на выходе под k-м номером (adr_k), что позволяет определить местоположение бит в выходной последовательности без перемежения строк и столбцов. Данная запись используется и при деперемежении с небольшой модификацией (заменой степенных коэффициентов $d1$, $d2$ на $e1$, $e2$). Реализация определения местоположения бита выполнено следующей функцией:

```
 function TPsevdo.Pos(const i : integer; const R :
TRec) : integer;
var
  PosA, PosB : Integer;
  S : AnsiString;
begin
  PosA := (Power((i div (R.n)) + 1, R.e, (R.nr + 1)) mod
(R.nr + 1)) – 1; // определение строкового местоположения бит после перемежения строк
PosB := (Power((i mod (R.n)) + 1, R.d, (R.n + 1)) mod
(R.n + 1)); // определение столбчатого местоположения бит после перемежения столбцов
  PosB := (PosB – 1) * R.nr;
  Result := PosA + PosB; //определение позиции выходного бита
end;
```

Power – функция, реализующая возведение в степень типа x^y:

```
function TPsevdo.Power(const A, B : Integer; const
AMod : Integer = 0) : Integer;
var  i : integer;
begin
  Result := 1;
  if B > 0 then
    begin
    for i := 1 to B do
      begin
      Result := Result * A;
      if AMod <> 0 then
        Result := Result mod AMod;
      end;   end;
end;
```

Для удобства эксплуатации модели создан интерфейс пользователя, вид которого отображен на рис. 2.

Перед началом моделирования необходимо определить начальные параметры модели. В окне *Входные данные* нужно осуществить выбор пропускной способности моделируемого канала передачи данных из наиболее распространенных на практике. Одними из таких каналов являются волоконно-оптические каналы, характеризующиеся малым ослаблением сигнала и высокой степенью защищенности от внешних электромагнитных помех [6]. Далее следует определить объем передаваемой информации в мегабайтах, выбрать длину информационного слова для усеченного двумерного линейного итеративного кода с объединенными диагональными проверками в битах. В окне *Зашумленность канала* необходимо указать вероятность появления ошибки для каждого вида ошибок (одиночных, двойных, тройных и т. д.).

В начале моделирования, исходя из значения длины информационного слова кода, определяется оптимальное количество строк и столбцов проверочной матрицы с точки зрения избыточности. Оптимальной матрицей является квадратная матрица, в которой $k1$ строк равно $k2$ столбцов. Данное утверждение доказано в работе [1]. В случае, если невозможно сформировать квадратную проверочную матрицу, то необходимо воспользоваться матрицей, близкой к квадратной. Данное решение реализовано следующим образом:

```
  S := $FFFFFFFF;
  while i >= 1 do
    begin
   if fInputData.edBlockSize.Value mod i = 0 then
   if fInputData.edBlockSize.Value * 3 + i + i * fInputData.edBlockSize.Value < S  t hen // определение блока с минимальным количеством проверочных символов
          begin
          k1 := i;
          k2 := fInputData.edBlockSize.Value div i;
          S := k2 * 3 + k1 + k1 * k2;
          Data_and_Likdd_k1 := k1;
          Data_and_Likdd_k2 := k2;
          end; // определение значений k1 строк и k2 столбцов
    Dec(i);
       fProcessInfo.pbProcess.Progress :=
fProcessInfo.pbProcess.Progress + 1;
       end;
```

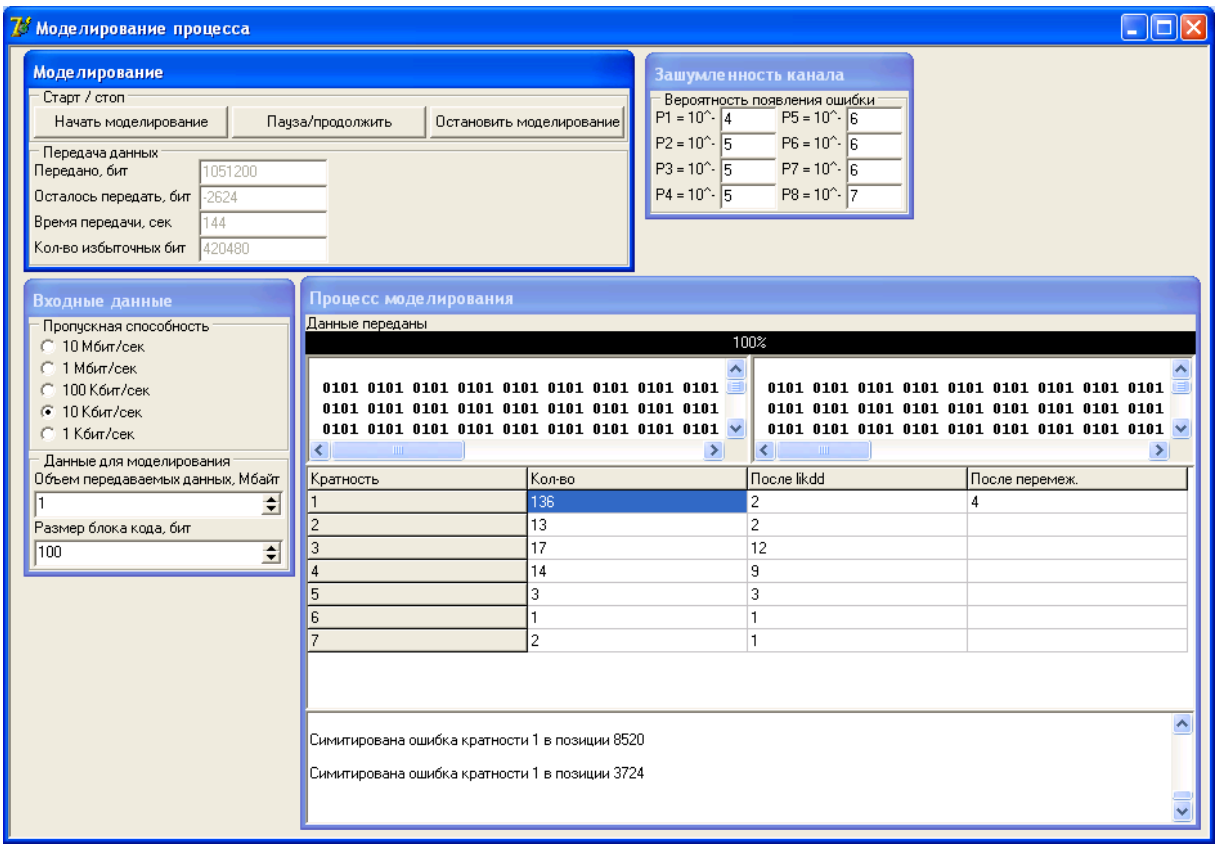


Рис. 2. Интерфейс компьютерной имитационной модели

Определяется размер передаваемого пакета данных, равный количеству кодовых последовательностей (информационное слово + проверочные символы), входящих в этот пакет, и не превышающий пропускную способность канала.

В окно *Размер блока перемежителя* заносятся все варианты размеров перемежителей и возможные степенные коэффициенты в зависимости от пропускной способности канала и размера пакета передаваемой информации. Так, первой цифрой является количество строк, второй – количество столбцов, третьей – степенной коэффициент для перемежения строк, четвертой – степенной коэффициент для перемежения столбцов, пятой – степенной коэффициент для деперемежения строк, шестой – степенной коэффициент для деперемежения столбцов (рис. 3). Выбирая из предложенных вариантов, необходимо помнить, что разница между вариантами заключается в изменении минимального расстояния разнесения бит информационной последовательности.

Процесс моделирования можно контролировать путем нажатия на кнопки *Начать моделирование*, *Пауза/продолжить*, *Остановить моделирование*. В процессе моделирования выводится в окно *Моделирование* информация о количестве переданной информации, времени, затраченном на ее передачу, количестве переданных проверочных символов. Количество и кратность ошибок, имитированных во время эксперимента, отображается в таблице окна *Процесс моделирования*. Также в этой таблице показывается количество неисправленных ошибок и их кратность для каждой схемы моделирования (после likdd – на основе кодера и без перемежителя, после перемеж – на основе кодера и перемежителя). В нижней части окна ведется история выбранных начальных параметров модели, имитированных и неисправленных ошибок, их кратность и позиция. Данная информация записывается в файл.

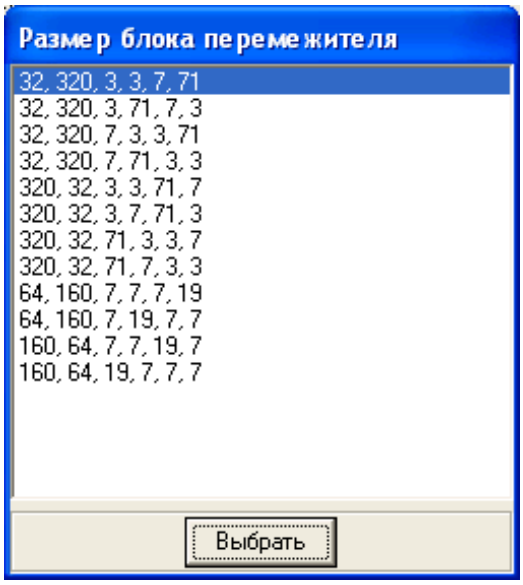


Рис. 3. Окно *Размер блока перемежителя*

В ходе проведения экспериментов выяснилось, что не всегда выбранная длина информационного слова кода и параметры процесса перемежения способны корректировать ошибки, возникающие в процессе передачи информации. Так, при средней вероятности появления ошибки, равной 10^{-5}, на 1 Мбайт передаваемой информации с размером блока перемежения 32×32, пропускной способностью 1 кбит/с, длиной информационного слова 100 моделью имитируется в среднем 300 ошибок. Из общего количества ошибок в среднем 90 не исправляется при использовании схемы передачи данных без перемежителя и 20 ошибок – с перемежителем. Изменяя в модели только размер блока перемежения на 32×320 и пропускную способность канала на 10 кбит/с, получим уменьшение неисправленных ошибок в схеме с использованием перемежителя в среднем до 1 при неизменном объеме передаваемой информации. Другим способом сокращения неисправленных ошибок является уменьшение длины информационного слова усеченного двумерного линейного итеративного кода с объединенными диагональными проверками, но при этом увеличивается объем передаваемой информации. Данный факт объясняется не совсем оптимальным выбором начальных параметров модели.

Заключение. Разработанная компьютерная модель передачи информации показала, что выбранный вариант комплексного преобразования передаваемой информации на основе перемежителя и двумерного линейного итеративного кода с объединенными двойными диагональными проверками позволяет корректировать все или практически все ошибки при меньших затратах времени и простоте алгоритма коррекции.

Литература

1. Урбанович, П. П. Избыточность в полупроводниковых интегральных микросхемах памяти / П. П. Урбанович, В. Ф. Алексеев, Е. А. Верниковский. – Минск: Наука и техника, 1995. – 263 с.
2. Мак-Вильямс, Ф. Теория кодов, исправляющих ошибки / Ф. Мак-Вильямс, Н. Слоэн; пер . с англ.; под ред. Л. А. Басалыго. – М.: Связь, 1979. – 746 с.
3. Скляр, Б. Цифровая связь. Теоретические основы и практическое применение / Б. Скляр; пер. с англ. – 2-е изд. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2003. – 1104 с.
4. Шиман, Д. В. Метод псевдоравномерно-го перемежения символов турбокода / Д. В. Шиман // Труды БГТУ. Сер VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2005. – Вып. XIII. – С. 168–170.
5. Шиман, Д. В. Свойства и параметры линейных итеративных кодов с двойными диагональными проверками / Д. В. Шиман, Д. М. Романенко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 151–154.
6. Гуров, И. П. Основы теории информации и передачи сигналов / И. П. Гуров. – СПб.: BHV, 2000. – 97 с.

УДК 681.324

Д. Карчмарски, аспирант; М. Плонковски, аспирант; Е. В. Лисица, студентка

МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМ КРИПТОПРЕОБРАЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИИ НА ОСНОВЕ НЕЙРОСЕТЕВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

This article is devoted to a new key-exchange protocol, which is based on mutually learning neural networks. The convergence process of points and improvement ways of this system are considered. Comparison of efficiency of geometric attack has been lead at use of architecture TPM and TPCM. Also the reliability of this protocol is analyzed and the methods of advance the level of its security is considered. The software has been developed for experimental studying neural protocol, allowing estimating its speed, reliability and safety at various parameters (learning rules, amounts of perceptrons K, and amounts of inputs N, synaptic depths of weight).

Введение. В основе нейросетевой криптографии лежит принцип использования искусственных нейронных сетей и их способности синхронизироваться в процессе «обучения». Стороны A и B используют нейронные сети, характеризующиеся одинаковой архитектурой и набором параметров, но обладающие различным для каждой из сторон, случайно заданным, начальным вектором весовых коэффициентов. На каждом шаге «обучения» стороны A и B обмениваются открытой информацией, касающейся состояния их нейронных сетей (значениями входов и выходов), и при необходимости изменяют скрытые значения весовых коэффициентов, согласно выбранному правилу «обучения». Цель нейронной криптографии заключается в возможности синхронизации сторон A и B друг с другом раньше атакующей стороны C. Полученные в результате синхронизации весовые коэффициенты могут быть использованы в качестве ключа в симметричных системах шифрования.

1. Процесс обучения нейронных сетей. Каждая нейронная сеть, применяемая в нейронной криптографии, характеризуется тремя величинами (K, N, L) и имеет архитектуру TPM (tree parity machine), состоящую из двух слоев [1]. Входной слой содержит K персептронов, каждый из которых характеризуется N-элементным вектором входных значений ($[x_{K,1}, x_{K,2}, ..., x_{K,N}]$) и N-элементным вектором весовых коэффициентов ($[w_{K,1}, w_{K,2}, ..., w_{K,N}]$, где $w_{K,N} \in [-L; L]$). Выходы нейронов ($[y_1, y_2, ..., y_K]$) составляют K значений, которые равны скалярному произведению вектора входных значений на вектор весов. Пороговая биполярная функция активации возвращает величину –1 при отрицательных значениях выходных величин и 1 при нулевых и положительных. Выходной слой содержит элемент o, являющийся выходом целой архитектуры TPM. Значение выхода равно произведению величин, полученных во входном слое, т. е. $o = y_1 y_2 \ldots y_K$.

В начальный момент времени обе стороны A и B инициализируют векторы весов. Затем на каждом шаге обучения t генерируются вектора входных значений и вычисляются значения выхода целой архитектуры TPM. Активизация весов (синхронизация сетей) происходит тогда, когда выходные значения обеих сетей одинаковы ($o^A = o^B$), и активизируются веса только тех нейронов, значение на выходе которых равно значению на выходе целой архитектуры TPM:

а) если $o y_K > 0$, то

$$w_{ij} = w_{ij} - o x_{ij};$$

б) если $|w_{ij}| > L$, то

$$w_{ij} = sign(w_{ij}) L, \qquad (1)$$

где $i = 1, 2, \ldots, K$.

2. Анализ процесса сходимости точек. Пусть w_i является точкой в N-мерном пространстве. Когда точка в процессе «обучения» совершает свободное движение, изменяются все ее координаты. Однако если точка находится на границе N-мерного пространства (т. е. хотя бы одна координата точки w_i равна $\pm L$), то она не имеет возможности свободно перемещаться и, следовательно, изменять все свои координаты. Это означает, что точки с различными координатами в процессе «обучения» могут сойтись, и значения их координат совпадут.

Пример 1. Пусть заданы следующие параметры: $K = 3$, $N = 2$, $L = 3$. В начальный момент времени все пространство заполняется точками. Пусть вход ной вектор на каждом из 5 шагов «обучения» последовательно принимает следующие значения: (1, –1), (1, 1), (1, 1), (–1, –1), (1, –1). Тогда движение точек будет происходить таким образом как показано на рис. 1. Из рис. 1 видно, что после каждого движения образуются «пустые» промежутки, т. е. места, которые можно исключить из множества всех возможных решений. Точки двигаются из середины к границам области.

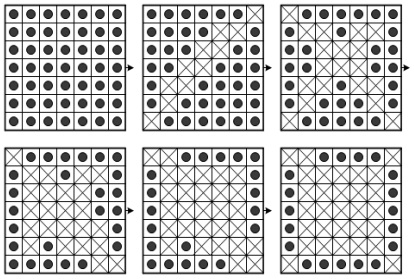


Рис. 1. Сходимость (накладывание) точек и образование «пустых» промежутков в пространстве

После 13 шагов «обучения» пространство может выглядеть следующим образом (рис. 2).

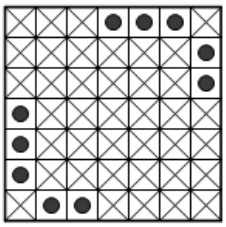


Рис. 2. Сходимость (накладывание) точек и образование «пустых» промежутков в пространстве после 13 шагов

На основании проведенных наблюдений можно сделать вывод, что чем больше шагов совершается в процессе «обучения», тем больше «пустых» промежутков возникает в пространстве. Количество возможных решений r равно произведению количества точек, оставшихся в каждом из рассматриваемых пространств:

$$r = r_1 r_2 \ldots r_K. \qquad (2)$$

В пространстве, определенном параметрами (K, N, L), количество возможных решений вычисляется по следующей формуле:

$$(2L+1)^{NK}. \qquad (3)$$

Для того чтобы уменьшить количество решений в каждом из K пространств, точкам присваивается следующее значение:

$$\frac{1}{(2L+1)^N}. \qquad (4)$$

Значение (4) – это вероятность того, что данная точка находится в определенном месте в пространстве. В начальный момент времени все точки имеют одинаковое значение вероятности. Если точки совершают несвободное движение и накладываются друг на друга, то значения их вероятности суммируются. Благодаря этому возможен более точный выбор потенциальных решений.

Для достижения поставленной цели исследования предположим, что во время синхронизации весов персептронов для обеих сторон A и B создается список, содержащий точки из каждого пространства. Этот список сортируется, согласно величине вероятности этих точек.

Обозначим величиной d_i позицию точек в списке. Тогда значение максимальной глубины $d_{\max}$ равно:

$$d_{\max} = \max(d_1, d_2, \ldots, d_K). \qquad (5)$$

В этом случае мы будем в состоянии достичь максимально возможных результатов испытания:

$$d_{\max}{}^{K}. \qquad (6)$$

Пример 2. Пусть заданы следующие параметры нейронной сети: $K = 3$, $N = 3$, $L = 4$. Согласно формуле (3), количество возможных величин весовых коэффициентов составляет 9^{12}. Было проведено 85 испытаний, результаты которых представлены в табл. 1.

Таблица 1

Статистика результатов проведенных испытаний

R	$A(d_{\max})$	R	$A(d_{\max})$
1	34	71–80	1(2)
2	12	81–90	1(2), 1(5)
3	5	101–200	1(1)
4	4	201–300	2(1), 1(3)
6	2	401–500	1(5)
8	4	1 001–2 000	1(2), 1(5)
11–20	3(1), 1(3)	2 001–3 000	1(6)
21–30	1(1), 1(3)	3 001–4 000	1(2)
31–40	2(1)	7 001–8 000	1(5)
41–50	1(2), 1(3)	>60 000	1(5)

Здесь R – количество решений, $A(d_{\max})$ – количество испытаний, проведенных с данным количеством решений (максимальная глубина вычислена по формуле (5)). Для $R < 10$ пропущена величина $d_{\max}$.

На основании полученных данных можно сделать вывод, что, определив величину $d_{\max}$, согласно формуле (5), мы значительно уменьшим количество необходимых решений. Так, например, для испытания, которому соответствовало свыше 60 000 решений, при использовании формулы (6) число решений не превышало значения 5^3.

Изменение величин весовых коэффициентов является детерминированным процессом, что позволяет атакующей стороне подражать этим изменениям. Один из возможных способов улучшения системы – это введение элемента случайности, при котором даже в случае небольшого значения величины N способ определения «пустых» промежутков, а также суммирования соответствующих вероятностей был бы непрактичен.

3. Сравнение эффективности геометрической атаки при использовании архитектур ТРМ и ТРСМ. Рассмотрим алгоритм геометрической атаки на процесс синхронизации при использовании архитектур ТРМ и ТРСМ и покажем, что архитектура ТРСМ является более безопасной.

Геометрическая атака при использовании архитектуры ТРМ. Рассмотрим действия атакующей стороны C в случае простого наблюдения. На каждом шаге синхронизации атакующая сторона пробует синхронизировать свои

скрытые весовые коэффициенты, согласно полученным значениям входов и выходов сетей A и B. В случае, если выходы сетей равны ($o^A = o^B$ и $o^A = o^C$), атакующая сторона обновляет свои веса. Однако если $o^A = o^B$ и $o^A \neq o^C$, то атакующая сторона вынуждена пропустить данный раунд и не обновлять веса, так как направление движения, скорее всего, будет ошибочным.

Предположим, что вектора весовых коэффициентов стороны C и A близки по значениям друг с другом. Это означает, что выход какого-то одного вектора сети C будет отличаться от выхода такого же вектора в сети A. Проблема заключается в поиске этого вектора в сети C. Все выходы векторов сети – это числа, принадлежащие множеству $\{-1, 1\}$ и полученные в результате действия функции активации (знака) $\sigma = sign(w_i x_i)$. Следовательно, вероятность ошибки максимальна для векторов, выходная величина которых близка к 0. Таким образом, для поиска «ошибочного» вектора необходимо найти такой вектор, величина выхода которого имеет наименьшее значение ($y_K = \min$), и заменить эту величину на противоположную по знаку. Эти действия необходимо выполнить в том случае, когда $o^A \neq o^C$. Итак, классический алгоритм геометрической атаки выглядит следующим образом.

1. Если стороны A и B имеют различные значения выхода ($o^A \neq o^B$), то атакующая сторона не обновляет свои весовые коэффициенты и пропускает этот раунд так же, как и стороны A и B.

2. Если стороны A, B и C имеют одинаковые значения выхода ($o^A = o^B = o^C$), то все сети обновляют свои весовые коэффициенты, согласно выбранному правилу «обучения».

3. Если стороны A и B имеют одинаковые значения выхода, но $o^A \neq o^C$, то атакующая сторона выбирает персептрон с наименьшим значением выходной величины и изменяет эту величину на противоположную по знаку. Далее проводится «обучение» сети с учетом произведенной замены.

Рассмотренная атака дает возможность атакующей стороне C синхронизироваться быстрее, чем A и B, на 70% (табл. 2).

Геометрическая атака при использовании ТРСМ. Рассмотрим эффективность геометрической атаки при применении архитектуры ТРСМ. Поскольку в данной архитектуре вектор входных значений содержит комплексные числа, то в рассмотренный выше классический алгоритм необходимо внести дополнительные изменения.

В этом алгоритме мы ищем вектор, выходное значение которого находится ближе всего к одной из линий деления плоскости. Причем этот вектор не может быть выбран случайно. В рассмотренном ранее классическом алгоритме было необходимо и достаточно найти вектор с наименьшим значением выходной величины. При использовании архитектуры ТРСМ важно учитывать, что функция знака возвращает числа, принадлежащие множеству $\{1, i, -1, -i\}$, и, следовательно, область искомых векторов должна ограничиваться только теми векторами, для которых изменение выходной величины гарантированно не нарушит равенство $o^A = o^C$.

Алгоритм геометрической атаки при использовании архитектуры ТРСМ выглядит следующим образом.

1. Если стороны A и B имеют различные значения выхода ($o^A \neq o^B$), то атакующая сторона не обновляет свои весовые коэффициенты и пропускает этот раунд так же, как и стороны A и B.

2. Если стороны A, B и C имеют одинаковые значения выхода ($o^A = o^B = o^C$), то все сети обновляют свои весовые коэффициенты в соответствии с выбранным правилом «обучения».

3. Если стороны A и B имеют одинаковые значения выхода, но $o^A \neq o^C$, то атакующая сторона выбирает такой вектор w_i, для которого значение $||\mathrm{Re}(\alpha_K)|-|\mathrm{Im}(\alpha_K)||$ является наименьшим (или ближайшим к одной из линий деления плоскости). Область поиска вектора ограничивается теми векторами, для которых изменение или перенос выходной величины в соседнюю плоскость не нарушит равенство $o^A = o^C$. Перемещение осуществляется путем умножения выходной величины на i или $-i$ в зависимости от его направления. Далее проводится «обучение» сети с учетом произведенной замены.

В табл. 2 представлен сравнительный анализ количества шагов, необходимых для синхронизации и проведения геометрической атаки при различных архитектурах нейронных сетей.

Таблица 2

Сравнительный анализ количества шагов, необходимых для синхронизации и проведения геометрической атаки при различных архитектурах нейронных сетей

Архитектура	Время синхронизации сети A и B (количество шагов)	Время геометрической атаки на сети A и B (количество шагов)
ТРМ	222,9	387,6
ТРСМ	2324,4	1 000 000*

* 1 000 000 – это максимальное число шагов, при котором атакующая сторона C не смогла синхронизироваться со сторонами A и B.

Из полученных данных следует, что геометрическая атака представляет существенную угрозу при использовании обычной архитектуры ТРМ и является абсолютно неэффективной для ТРСМ архитектуры построения нейронных сетей.

4. Программная реализация нейросетевого протокола. Для экспериментального изучения нейросетевого протокола было разработано программное средство, позволяющее оценить его быстродействие, надежность и безопасность при различных параметрах (правилах «обучения», количестве персептронов K, количестве входов N, синаптической глубине весовых коэффициентов). На рис. 3 представлено окно программы, которое содержит поля для ввода желаемых значений параметров и выбора правил «обучения».

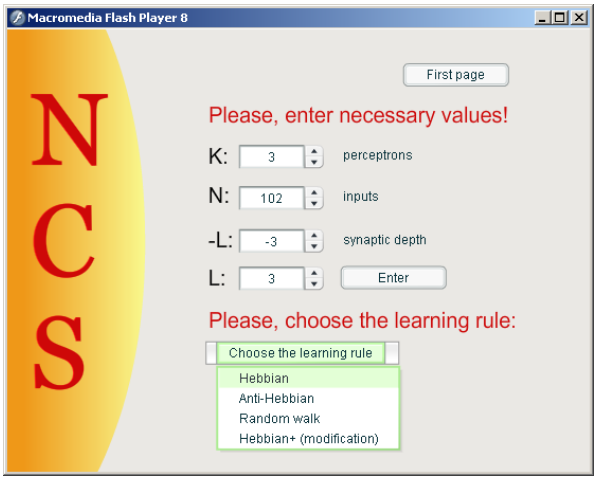


Рис. 3. Интерфейс программы.
Задание входных параметров и правила обучения

Кроме процесса синхронизации двух сетей A и B, в программе также были реализованы два вида атак: простая атака (Simple Attack) и геометрическая атака (Geometric A ttack). Результаты эксперимента показали, что при $K = 3$, $N = 5$, $L = 3$ и использовании правила «Hebbian» геометрическая атака эффективна в 30 случаях из 100. Однако при этом же наборе параметров и использовании правил «Anti-Hebbian» и «Modified H ebbian» эффективность атаки значительно снизилась.

Также результаты эксперимента подтвердили наличие экспоненциальной зависимости вероятности успешной атаки от значения синаптической глубины – с ее увеличением вероятность успешной атаки понижается по экспоненте (рис. 4).

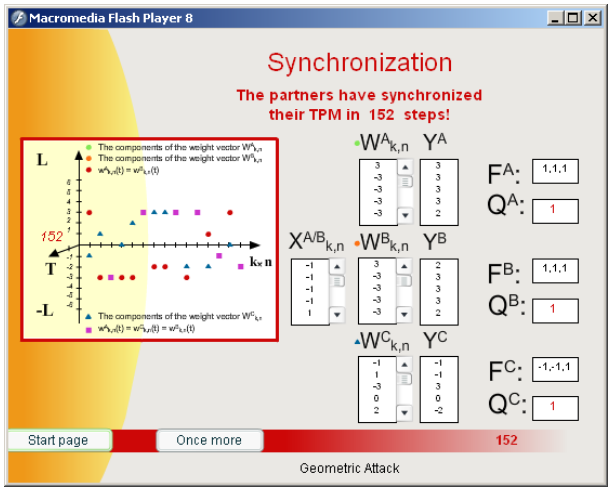


Рис. 4. Интерфейс программы. Результат работы

Заключение. Из анализа полученных данных (табл. 2) можно сделать выво д что пр и использовании архитектуры TPM геометрическая атака может представлять серьезную угрозу для безопасности нейросетевого протокола. Однако при использовании архитектуры TPCM геометрическая атака бесполезна, что подтверждается очень большим количеством шагов (>1 000 000), необходимых атакующей стороне для синхронизации. Следовательно, нейронные сети TPCM архитектуры характеризуются более высоким уровнем безопасности процесса синхронизации, чем сети, основанные на архитектуре TPM [2].

Литература

1. Klimov, A. Analysis of Neural C ryptography / A. Klimov, A. Shamir, A. Mityaguine // ASIACRYPT. – 2002. – Vol. 2501. – P. 288–298

2. Плонковски, М. Криптографическое преобразование информации на основе нейросетевых технологий / М. Плонковски, П. П. Урбанович // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2005. – Вып. XIII. – С. 161–164.

УДК 004.4'2

Е. В. Кабак, аспирант

ИНФОРМАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО КОНТЕНТА СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО СОЗДАНИЯ И МОДИФИКАЦИИ КОМПЬЮТЕРНЫХ СРЕДСТВ ОБУЧЕНИЯ

The article is devoted to a consideration of an information model of a content organization used in a computerized system named «Sphere» assigned for creation and modification of computerized course wares. This model is an extended version of the model, which is offered by SCORM. SCORM is an international e-learning standard. Special attention in this article is given to a designing of a course structure and Activity Tree building. LMS uses Activity Tree data to control and organize the learning process. We consider, that the account of basic provisions of SCORM will promote introduction of software products of the educational appointment focused first of all on functional compatibility.

Введение. Рассмотренные в [1, 2] проблемы, существующие в области электронного обучения и разработки инструментальной среды автоматизированного проектирования и модификации компьютерных средств обучения, выявили необходимость создания четкой информационной модели представления и визуализации учебного контента, обеспечивающей необходимую функциональную совместимость и возможность повторного использования учебных материалов.

В настоящей статье представлена информационная модель организации учебного контента, являющаяся дополнением модели, предложенной стандартом SCORM. Такое дополнение стало возможным благодаря тому, что SCORM базируется на синтаксисе XML. Это позволяет проектировщикам и разработчикам вводить собственные имена элементов и их атрибутов, расширяя тем самым стандартную модель.

Стандарт SCORM – основной стандарт в области проектирования и организации образовательного контента, модель, определяющая и стандартизирующая содержание и классификации, виды хранения и представления содержания в электронном образовании. В результате своего развития, связанного с развитием сети и распространением дистанционного обучения, SCORM соединил и улучшил разработанные ранее стандарты и спецификации, создав четкую модель распространения образовательного контента, основанную на LMS (Learning Management System, системе управления обучением) [3].

Информационная модель, учитывающая основные положения стандарта SCORM, обеспечит детальную спецификацию учебных объектов, будет способствовать внедрению программных продуктов, основанных, прежде всего, на функциональной совместимости.

Основная часть. В общем случае проектирование и разработка учебного курса представляет собой последовательное прохождение стадий анализа, проектирования, разработки (реализации) и оценки [4].

На стадии анализа проектировщик курса выполняет:

– упорядочивание и систематизацию информации об объектах, явлениях, фактах, понятиях, операциях;

– подготовку демонстрационных объектов, моделей, операций с ними;

– отбор дополнительной методической информации;

– отбор и формулировку вопросов, задач, заданий и т. д.

Другими словами, формируется содержимое проектируемого курса, на основе которого будет определена совокупность учебных тем. Совокупность тем курса может быть также сформирована на основе рабочей программы. Далее создается собственно структура курса (рис. 1).

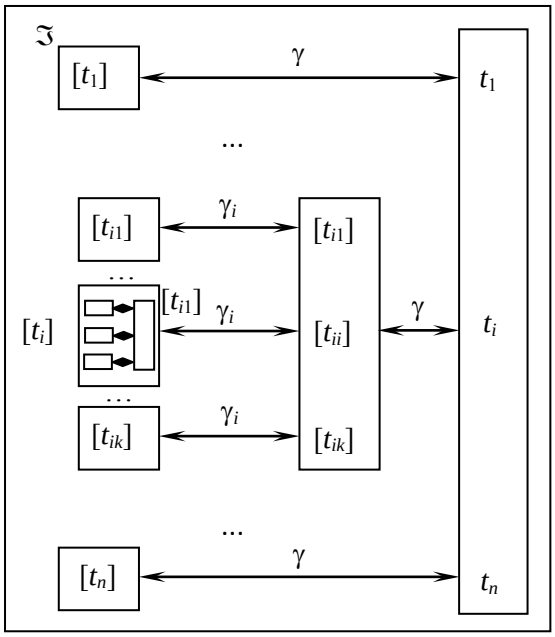


Рис. 1. Разбиение множества A

Пусть A – множество элементов (учебных тем) курса. Определим на A систему классификации путем последовательного и согласованного моделирования основных семантически связанных совокупностей единиц (элементов A). Представим множество A непересекающимися подмножествами $A_1, A_2, \ldots, A_n$, называемыми классами эквивалентности, которые соответствуют

некоторому разбиению курса, например, на главы или разделы. Это означает, что для A определено отношение эквивалентности P.

Обозначим класс эквивалентности $[a] = A_i$, где $a \in A_i$ [5]. Совокупность всех смежных классов множества A по эквивалентности P обозначим через A/P (фактор-множество). Тогда каноническим отображением множества A является однозначное отображение α: $A \to A/P$, при котором каждый элемент $a \in A$ переходит в содержащий его смежный класс $[a]$. Пусть $T \equiv A/P$.

Сопоставим каждому смежному классу $T_i \in T$ индекс класса $t_i \in A$, т. е. существенный признак класса, и выделим подмножество $\Im = \{t_i\}$, $\Im \subset A$. Таким образом формируем названия классов. Следовательно, исходное множество A, на котором определено множество $\Im = \{t_i\}$, может быть представлено в виде: β: $A \to \Im$, где β – отношение подобия, т. е. $x \in [t] \subset A \Leftrightarrow x^{\beta} = t$.

Смежные классы A по P – суть полные прообразы в A типов из $\Im$. Ставя каждому элементу из $\Im$ в соответствие его полный прообраз из A, получим взаимно однозначное отображение γ множества типов $\Im$ на фактор-множество A/P, γ: $\Im \to A/P$.

Образованные таким образом классы в свою очередь тоже могут быть делимыми.

Классы образуют иерархию. Пусть δ – отношение строгого порядка, определенного на множестве. Тогда в общем случае, если $[t_i] \supset [t_j]$, то $t_i \delta t_j$. Если $t \delta t_i$ и $t_i \delta t_j$, то $t \sigma t_j$, где σ – отношение строгого порядка. Если $t \sigma t_i$, то t_i принадлежит маршруту $\langle t \rangle$ с началом в t [6].

Таким образом, строится модель или схема курса через определение его структуры из исходного множества учебных объектов.

Отметим, что структура курса может быть представлена в виде дерева. Построенное дерево может быть использовано для представления структуры курса и для хранения данных, необходимых для управления процессом обучения.

Итак, на стадии анализа формируется схема описания курса, которую в общем виде можно представить следующим образом:

– название курса;
– авторы курса (организация);
– тип/технология обучения;
– предметная область курса;
– знания и навыки, которыми должен овладеть обучаемый в процессе изучения курса (цель обучения);
– участники процесса обучения (в общем случае – обучаемый);
– собственно *структура курса* с перечислением названий глав, разделов, тем, учебных страниц и т. д., представляющая собой *сценарий обучения*, используемый по умолчанию;
– особые требования;
– собственно учебный материал, который будет представлен в курсе и др.

Сценарий обучения – последовательность шагов, описывающих взаимодействие между пользователем и объектом (учебным курсом) [7].

Сценарий обучения, характеризующийся последовательным переходом системы (обучаемого) от одного образовательного ресурса к другому является простейшим примером изучения учебного материала. Однако может потребоваться обеспечение возможности выбора пользователем собственного пути изучения. В этом случае LMS должна располагать всей необходимой информацией. Более сложная последовательность также может определяться статусом образовательного ресурса, успеваемостью и достижениями самого ученика, а также учебным сообществом, к которому относится обучаемый.

Требуемое поведение и функциональность LMS, ветвление и порядок изучения дисциплины рассматриваются в терминах дерева деятельности (ДД) [8, 9].

Концептуальное дерево деятельности – иерархическая структура данных, управляющая продвижением обучаемого по учебному материалу.

Оно строится на основе секции <*organization*> метафайла курса и внешне соответствует структуре курса (рис. 2).

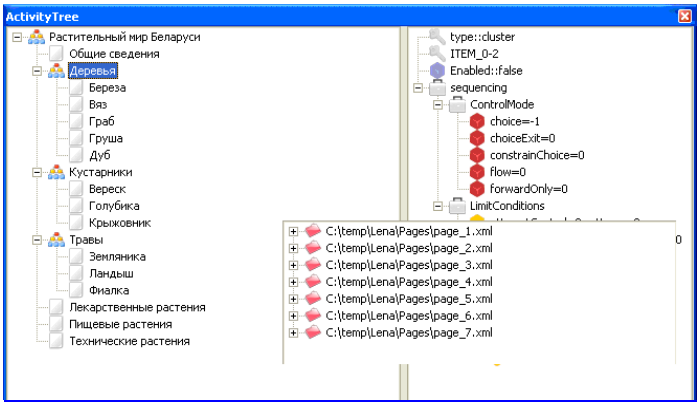


Рис. 2. Дерево деятельности учебного курса

Однако каждая вершина этого дерева, кроме собственно названия темы, хранит дополнительную информацию, используемую при управлении процессом обучения. Следовательно, построение дерева деятельности – процесс упорядочения учебного материала в соответствии с принятой информационной моделью.

Каждая вершина дерева может быть вершиной одного из следующих типов: а) «кластер» и б) «лист». Такое разделение обусловлено различиями в функционировании и наборе хранимых данных упомянутых типов вершин.

Кластер – особая форма учебного действия, имеющая подчиненные действия. Кластер характеризуется возможностью обладать сложной иерархической структурой.

Лист – вершина ДД, не имеющая потомков. Листья в отличие от кластеров могут содержать ссылки на физические файлы (файл страницы, файл метаданных, файлы дополнительных ресурсов и т. д.) и быть связанными в случае необходимости с одной или несколькими учебными целями, которые обучаемый должен достичь в процессе обучения.

Одной из наиболее важных характеристик листа является его выполнение в контексте родительского элемента.

Таким образом, любая вершина ДД представляет собой в некотором смысле модуль инструкций.

Все учебные действия независимо от их типа имеют следующие характеристики:

– точка входа/выхода;

– четко определенные условия входа/выхода.

Формально любой кластер ДД может быть представлен кортежем $<M, L, P, S>$.

M – режим кластера, определяющий порядок прохода кластера.

Можно выделить 4 основных режима:

1) «поток» – последовательный переход с возможностью повторения. Такой проход по элементам кластера можно представить «линейным графом с элементарными циклами» вида: $\rightarrow \overset{0}{C}_{i-1} \rightarrow \overset{0}{C}_{i} \rightarrow \overset{0}{C}_{i+1} \rightarrow$ и описать системой условных предикатов: $C_i \rightarrow$ (p= «повторить») C_i / (p= «далее») C_{i+1} / (p= «вернуться») C_{i-1} [4];

2) «только вперед» – проход возможен только в направлении «вперед»: $C_i \rightarrow$ (p= «повторить») C_i / (p= «далее») C_{i+1};

3) «выбор» – в этом случае обучаемый может получать различные последовательности «кадров»;

4) «переход по выбору» – разрешает (запрещает) нелинейные переходы по структуре курса.

L – множество ограничений на доступ к вершине: ограничение по количеству попыток изучения темы или прохождения теста, по дате и времени, по проходному баллу и т. д.

P – в общем случае условия, оцениваемые системой при работе с вершиной ДД.

Пусть U – множество условий, заданных на множестве ДД, A – определенное на ДД множество допустимых действий системы. Тогда можем определить отношение H такое, что $(x, y) \in H, x \in U, y \in A$.

Условия, определяемые для вершины, можно разделить на два класса:

– условия, оцениваемые системой при входе в вершину;

– условия, оцениваемые системой при выходе из вершины.

Каждому классу условий соответствует своя совокупность допустимых действий.

Пусть P – множество условий, заданных на множестве ДД. P_i – условие, заданное для i-й вершины, т. е. $P_i \in P$. P_i можно представить: $P_i = \{c_1, c_2, \ldots, c_n\}$, где c_i – i-я часть условия P_i. Для P_i можно записать $[P_i, \times, +, \rceil]$ тип $<n, n, n>$ [5].

S – множество возможных состояний кластера: активный, неактивный и т. д.

Любой лист дерева деятельности может быть представлен кортежем $<L, P, S, F, O>$, где L, P, и S означают то же самое, что и для кластера.

F – множество файлов, связанных с соответствующим листом дерева (файл страницы, файл метаданных, файлы дополнительных ресурсов, файл теста).

O – учебная цель, которая должна быть достигнута в процессе изучения соответствующей листу темы курса.

Таким образом, данные, хранимые в вершинах построенного дерева деятельности, могут быть использованы системой управления обучением для организации и контроля учебным процессом.

Особую роль в используемой информационной модели играют метаданные. Метаданные – способ единого описания учебных объектов для их поиска, каталогизации и возможности повторного использования.

Метаданные предусмотрены для всех компонентов модели контента. Определение общей концептуальной схемы данных обеспечивает связывание учебных объектов, а так как метаданные обладают высокой степенью семантической интероперабельности, трансформация этих связей будет протекать без затруднений [10]. Сама идея использования метаданных, по мнению ряда разработчиков учебного контента, имеет огромный потенциал.

Однако есть аспекты, которым SCORM не уделяет достаточного внимания. Это вопросы программной реализации дерева деятельности, хранения данных между отдельными сессиями

обучения, взаимодействия ролей в процессе обучения и т. д. На все эти вопросы в ходе разработки конкретного программного средства должны быть получены ответы самими разработчиками.

Заключение. Таким образом, можем сделать вывод, что использование и программная реализация информационной модели, учитывающей основные положения стандарта SCORM, обеспечат детальную спецификацию учебных объектов, будут способствовать внедрению технологии обучения и программных продуктов, основанных, прежде всего, на функциональной совместимости.

Полученные в процессе разработки программного средства «Сфера» результаты формируют теоретическую и практическую базу для создания инструментальных сред автоматизации процессов создания и модификации компьютерных обучающих средств по различным учебным дисциплинам, обеспечивающим в свою очередь повышение эффективности обучения за счет использования различных форм представления учебного материала, организации самостоятельной работы обучаемых.

Разработанные механизмы организации учебного контента позволят значительно сократить время разработки указанного класса систем за счет независимого проектирования отдельных учебных фрагментов от содержимого курса.

Литература

1. Романцевич, Е. В. Проблемы и приоритетные направления разработки системы автоматизированного проектирования и создания компьютерных средств обучения / Е. В. Романцевич // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2006. – Вып. XIV. – С. 171–173.

2. Романцевич, Е. В. Особенности программной реализации системы автоматизированной разработки компьютерных обучающих программ «Сфера» / Е. В. Романцевич // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 143–146.

3. SCORM 2004 2nd Edition Overview, Advanced Distributed Learning [Electronic resource]. – 15 July 2004. – Mode of access: http://www.adlnet.org.

4. Савельев, А. Я. Подготовка информации для автоматизированных обучающих систем: метод. пособие для преподавателей и студентов вузов / А. Я. Савельев, В. А. Новиков, Ю. И. Лобанов. – М.: Высшая школа, 1986. – 176 с.

5. Куликовский, Л. Ф. Теоретические основы информационных процессов: учеб. пособие для вузов по спец. «Автоматизация и механизация процессов обработки и выдачи информации» / Л. Ф. Куликовский, В. В. Мотов. – М.: Высшая школа, 1987. – 248 с.

6. Зёма, Т. Г. Проблемы моделирования семантики в интеллектуальных информационных системах / Т. Г. Зёма, Н. А. Ярмош. – Минск: Институт технической кибернетики НАН Беларуси, 1998. – 42 с.

7. IMS Learning Design Best Practice and Implementation Guide [Electronic resource]. – 20 January 2003. – Mode of access: http://www.imsglobal.org.

8. SCORM Sequencing and Navigation, Version 1.3.1 [Electronic resource]. – 22 July 2004. – Mode of access: http://www.adlnet.org.

9. IMS Simple Sequencing Behavior and Information Model v 1.0 Final Specification, IMS Global Learning Consortium, Inc. [Electronic resource]. – 3 March 2003. – Mode of access: http://www.imsglobal.org.

10. SCORM Content Aggregation Model, Version 1.3.1 [Electronic resource]. – 22 July 2004. – Mode of access: http://www.adlnet.org.

УДК 519.872

О. Ф. Зирко, лаборант; А. С. Кобайло, канд. техн. наук

BMAP-МОДЕЛИ СИСТЕМ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ С ОГРАНИЧЕННЫМ ПРОСТРАНСТВОМ ПРИ КОМПЛЕКСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ ТРЕБОВАНИЙ

The idea of using BMAP-models became very popular in many-parameter structures. In this paper it is created the Queuing system with limitations to expectation time and space for complex format of querying requirement. To decision of problems the analysis suggests building model and complicates the new algorithm for work in models of BMAP systems with complex requirements. This article may be helped to prove the results of new methods of analyses model with the complex exponent requirements. The new function algorithm constructed in such way is incompletely specified. In practices it help to analyze some problems of many-parameter structures and for constructing components that are arguments of the complexion Queuing system.

Введение. Среди последних разработок моделей теории массового обслуживания (ТМО) большую популярность приобрели системы массового обслуживания (СМО) типа BMAP, которые рассматривают потоки, одновременно поступающие в систему входных требований с переменной интенсивностью, и предусматривают гибкое управление требованиями посредством управляющего процесса (УП). Эти особенности расширяют возможности BMAP-модели при использовании СМО в ряде прикладных задач.

Однако при обзоре различных методов построения и решения BMAP-моделей необходимо выделить следующие недостатки:

– как правило, все исследуемые характеристики зависят только от одной величины – времени, что исключает возможность управления требованиями по другим существенным параметрам;

– в системах, в которых требуется увеличение пространства, расширение происходит исключительно за счет счетных компонент количества требований $\eta(t) = \{1, 2, \ldots, N\}$ либо состояний $i, j = \{0, 1, \ldots, W\}$.

Ограничения, безусловно, упрощают расчеты, но построение реальных моделей с помощью BMAP-систем, получение оптимальной точности результатов требуют введения дополнительных переменных и анализа многопараметрических систем управления.

Стремление отойти от однопараметрических структур СМО стало основой для разработки метода построения BMAP-моделей с комплексными требованиями.

Материалом для анализа послужили:

1) расчеты и анализ характеристик известных BMAP-систем;

2) расчеты и анализ характеристик СМО типа M/M/n/m(V) с ограничением на пространство (ранее объем);

3) введение комплексного представления характеристик в СМО;

4) расчеты и анализ характеристик СМО при комплексном представлении требований типа M/M/n/m(τ, | V |) с ограничением на время ожидания и пространство.

На базе классических систем был составлен алгоритм формирования BMAP-модели с комплексным представлением требований, свойства которых (преимущества и недостатки) были рассмотрены в статье [1]. Введение их было связано с объединением многопараметрических структур при моделировании реальных процессов для упрощения расчета вероятностных характеристик. Сами модели СМО с комплексными требованиями стали обобщением моделей с ограниченным пространством и временем (ожидания, пребывания либо временем обслуживания), так как характеристика требования представляется в виде

$$Z_k(t) = T_k(t) \pm i\,\xi_k(t), \qquad (1)$$

где $T_k = \mathrm{Re}(Z_k)$ – коэффициент, связанный с временными характеристиками (временем ожидания, обслуживания либо поступления); $\xi_k = \mathrm{Im}(Z_k)$ – коэффициент относительного размера (далее пространство), представляющий безразмерную величину, согласованный с суммарным объемом и количественными характеристиками СМО.

Необходимо отметить, что пространство ξ_k в основном отличается от ранее введенного объема относительностью размера, т. е. представленной в задаче в виде безразмерного действительного числа, определенного на всем промежутке от $-\infty$ до $+\infty$.

В данной статье изучены изменения модели BMAP/G/n/m(τ, | V |) с ограниченным временем ожидания и пространством $\xi_k < |V|$ при комплексном представлении требований, а также рассмотрены различные подходы для поиска стационарных характеристик системы.

Основная часть. Имеется n-линейная BMAP-СМО с ограниченным временем ожидания и пространством при фиксированных местах в очереди ожидания обслуживания. Рассматриваемая система BMAP/G/n/m(τ, | V |) является обобщением системы M/G/n/m(τ, | V |). В отличии от марковских СМО в BMAP-системах описываются потоки требований, собранные в отдельные «группы-пачки», а время обслуживания

контролируется УП. Таким образом, в СМО поступает N независимых BMAP-потоков, состоящих из $\eta(t)$ запросов с интенсивностью поступления $\lambda_{KN}(t)$. На основе этих значений формируется далее матрица интенсивностей входного потока Λ. Каждое входное требование зависит от двух величин, характеризующих время ожидания в очереди и пространство. Все требования, находящиеся в СМО в произвольный момент времени t, перенумерованы в порядке поступления FIFO, поэтому в СМО в каждом N-потоке находится $\eta(t)$ требований с номерами $k = 1, \eta(t)$. В системе имеется n обслуживающих приборов и m мест ожиданий обслуживания, время ожидания ограничено величиной $\tau > 0$, а исследуемое пространство требований – величиной V такой, что сумма отображений $\xi(t, \xi_k) < |V|$. Каждый обслуживающий прибор имеет свою интенсивность обслуживания μ_n. На основе этих значений формируется матрица интенсивности обслуживания требований M.

Рассмотрим описанную выше СМО, в которой входное требование представимо по формуле (1), т. е. каждое входное требование характеризуется параметром $Z_k(t)$.

Для процесса BMAP/G/n/m будем считать, что $T_k(t)$ – коэффициент, характеризующий время, прошедшее от момента t до момента требования, находящегося на k-м месте из очереди в результате поступления на ОП или потери (катастрофы) ($k = n + 1, ..., \eta(t)$). Величина $T_k(t)$ имеет смысл, если $\eta(t) > 1$, тогда в СМО можно вводить процесс $(\eta(t), Z(t))$, для которого время ожидания составляет

$$\tau = \begin{cases} 0, & 0 < k < n \\ T_k(t), & n < k \le n + m \end{cases} \qquad (2)$$

Каждый из элементов параметра $Z_k(t)$ – $T_k(t)$ и ξ_k имеет свою функцию распределения $B(T)$ и $L(\xi)$ соответственно [1, 2]. Обозначим через P_k матрицу, каждый элемент которой представляет собой вероятность того, что в момент t в очереди находятся k требований размером ξ_k:

$$P_k(T_k, \xi_k) = (P_k, Z_k) =$$
$$= P_1(T_k, \xi_k) + (P_2, T_k, \xi_k) =$$
$$= A_k \exp(i\varphi). \qquad (3)$$

Причем $A_k = [A_{ij}]$ является безусловной вероятностью матрицы состояний, в которых в СМО находятся k требований. Каждый элемент матрицы представляет состояние A_{ij}, в которое перешла система (состоянии j) при условии, что в предыдущий момент времени t УП находился в состоянии $i \neq j$, $i, j = \overline{0, W}$. Поскольку $i, j \in \overline{0, W}$, то в целом размерность матрицы A_k равна $W \times W$.

Если $k \le n$, то все требования поступают в СМО и начинают обслуживаться, т. е. нет потерь, связанных с ограничением времени ожидания. Обслуживание процесса изменяется в следующие моменты: при окончании обслуживания; при появлении новых требований; при уходе требований вследствие катастрофы.

Требование теряется при следующих ситуациях:

– при поступлении в СМО $\eta(t - 0) = n + m$;

– при условии $-V > \xi(t - 0) + \xi_k > V$;

– при достижении в очереди максимального значения времени ожидания $\tau_{\max}$.

Количество элементов в каждом векторе равно количеству требований, поступивших в систему в k-й поток.

Найдем вероятность того, что в момент времени $t + \Delta t$ очередь свободна. Введем следующие матрицы:

1) для $(n + 1) \le k \le m$ прежде всего введем матрицу $F'_k(t, T_k)$, каждый элемент которой равен вероятности того, что в момент t в СМО поступило $\eta(t) = k$ требований и от момента t до момента выхода из очереди k-го требования пройдет $dT_{n+1}, dT_{n+2}, \ldots, dT_k$ время;

2) для выражения УП очередью введем матрицу $\Gamma(t)$, в которой каждый элемент $\gamma_{ij}(k, t)$ адекватен времени, прошедшему от момента t до момента выхода k-го требования из системы; УП находится в момент выхода в состоянии j при условии, что в момент t УП находился в состоянии $i \neq j, i, j = \overline{0, W}$;

3) для определенного пространства введем матрицу $G(t, \xi_k)$, каждый элемент которой равен функции $g_k(t, \xi_k)d\xi_k$, означающей вероятность того, что в момент t в СМО поступило k требований, а само пространство заключено в границы $\xi_k - \xi_0 = d\xi_k$:

$$g^{(k)}(t, \xi_k)d\xi_k = P\{\eta(t) = k, \xi(t) \in [\xi_k, \xi_k + d\xi_k]\}.$$

Очевидно, что для вещественного параметра существует вероятность $P_k(t)$ такая, что

$$P_k(Z_k, \xi_k) = \int_{-V}^{V} G^{(k)}(t, \xi_k)\, d\xi_k \qquad (4)$$

Учитывая специфику исследуемой СМО, а именно наложенные на нее ограничения (2), состояние системы в некоторый момент времени t_k определяется:

– УП – $A(t)$, регулирующим переходы из состояния i в состояние j, $i \neq j$, $i, j = \overline{0, W}$;

– числом, находящихся в момент времени t запросов $\eta(k)$;

– суммарным пространством $\xi(t)$;

– матрицей времени ожидания $\Gamma(t)$.

Тогда можно считать, что система BMAP/G/n/m с ограниченным суммарным пространством требований V и ограниченным временем ожидания описывается процессом

$$\begin{cases}(\text{УП}, \eta(k), \varsigma(t)); 0 < \eta(t) \le n, \ i, \ j \in [0, \ldots, W], \\ (\text{УП}, \eta(k), \Gamma(t), \xi(t)); 0 < \eta(t) < \infty \ t; i \ne j\end{cases} \quad (5)$$

Следующим шагом после описания конкретного процесса является вывод матрицы перехода. В BMAP-СМО переходы контролируются УП. В интервале $(t, t + dt)$ могут произойти следующие переходы:

$$\|A_0\| \to \|A_0\|, \|A_1\| \to \|A_0\|, \|A_0\| \to \|A_1\|, \quad (6)$$

$$\|A_n\| \to \|A_n\|, \|A_n\| \to \|A_{n-1}\|, \|A_n\| \to \|A_{n+1}\|. \quad (7)$$

Анализируя состояния, можно получить матрицу переходов. В данной статье не приводится анализ состояний, а представляются только результаты, на основе которых получаем систему интегрально-дифференциальных уравнений (ДУ):

– при $k \le n$

$$\frac{dP_0(Z)}{dZ} = -\Lambda \circ P_0(Z) \circ L(V) + M \circ P_1(Z), \quad (8)$$

$$\frac{dP_1(Z)}{dZ} = -\Lambda \circ P_0(Z) \circ L(V) - \Lambda \circ \int_{-V}^{V} P_1(Z)dZ - M \circ P_1(Z) + 2M \circ P_2(Z), \quad (9)$$

$$\frac{dP_k(Z)}{dZ} = \Lambda \circ \int_{-V}^{V} P_{k-1}(Z)dZ - \Lambda \circ \int_{-V}^{V} P_k(Z)dZ - (kM \circ P_k(Z)) + F'_{n+1}(0); \quad (10)$$

– при $k > n$

$$\frac{dP_k(Z)}{dZ} = \Lambda \circ \int_{-V}^{V} P_{k-1}(Z)dZ - \Lambda \circ \int_{-V}^{V} P_k(Z)dZ + \int_0^{\tau} \ldots \int_0^{x_n} F'_k(Z) \circ \exp(-i\Lambda \circ Z)dZ + \int_0^{\tau} \ldots \int_0^{x_n} F'_{k+1}(Z) \circ \exp(-i\Lambda \circ Z)dZ, \quad (11)$$

$$\frac{dP_{n+m}(Z)}{dZ} = \Lambda \circ \int_{-V}^{V} P_{n+m-1}(Z)dZ + \int_0^{\tau} \ldots \int_0^{x_{n+m-1}} F'_{n+m}(Z) \circ \exp(-i\Lambda \circ Z)dZ. \quad (12)$$

Учитывая, что $\rho = \lambda / (n\mu)$ – загрузка системы, при $\rho < \infty$ существуют пределы, не зависимые от начальных условий, для которых

$$P_k = \lim_{z \to \infty} P_k(Z), \ k = 0, 1, \ldots, n + m. \quad (13)$$

Для существования пределов матрице $P_k(Z)$ необходимо и достаточно быть аналитической, т. е. должна дифференцироваться по Z и по каждой из компонент одновременно. Кроме того, для исследуемой системы BMAP/G/n/m(τ, $|V|$) должны выполнятся условия (1)–(3), а именно:

1. Инфинитезимальная матрица $D = \Lambda P(k)$ и УП $A_k(t)$ не зависят от занимаемого пространства.

2. Загрузка BMAP-систем при $\rho < \infty$. Для систем BMAP/G/n/m $\rho(k) = G^{(k)} \circ D^{-1}$.

3. Для системы должен существовать предел

$$G^{(k)} = \lim_{z \to \infty} G^{(k)}(Z) \quad (14)$$

и должны выполняться равенства

$$L(V) = 1, \quad (15)$$

$$L^{(k)}(V) = \int_{-V}^{V} L^{(k-1)}(V - \xi_k)d\xi_k. \quad (16)$$

В этом случае для ДУ (8)–(12) будет существовать стационарный режим работы. Из уравнения (14) и условия (2) следует, что

$$G^{(1)} P_1(Z) = \rho P_0(Z) \circ G^{(0)}. \quad (17)$$

Учитывая специфику комплексных чисел, будем считать, что

$$\int_{-V}^{V} P_1(Z)dZ = \sum_{k=1}^{N} \text{Вычет}[P(T, \xi)], \quad (18)$$

где T_k, ξ_k – особые точки функции $P(T, \xi)$, расположенные в верхней полуплоскости. Вероятность P_1 имеет два полюса

$$\xi_{0,1} = (P_0 \circ G^{(k)}(V))^k. \quad (19)$$

Предполагая стационарность процессов в особых точках и подставляя (17)–(19) в формулы (8)–(12), получим следующие результаты:

– для $k \le n$

$$0 = 2\pi i \, \text{Вычет}[G^{(1)} \circ \sum_{k=1}^{\eta(t)} P(Z, Z_k)] + \frac{2M}{n} \circ G^{(2)} \circ P_2 - \Lambda \circ P_0(Z) \circ G^{(0)} - M \circ P_1(Z) \circ G^{(1)}, \quad (20)$$

$$0 = \pi i \, \text{Вычет}[\Lambda \circ G^{(k-1)} \circ \sum_{k=1}^{\eta(t)} P_{k-1}(Z, Z_{k-1})] - 2\pi i \, \text{Вычет}[G^{(k)} \circ \sum_{k=1}^{\eta(t)} P_k(Z, Z_k)] - \frac{kM}{n} \circ G^{(k)} \circ P_k(Z) + G^{(n+1)} \circ F'_{n+1}(0); \quad (21)$$

– для $k > n$

$$0 = \pi i \, \text{Вычет}[\Lambda \circ G^{(k-1)} \circ \sum_{k=1}^{\eta(t)} P_{k-1}(Z, Z_{k-1})] - 2\pi i \, \text{Вычет}[G^{(k)} \circ \sum_{k=1}^{\eta(t)} P_k(Z, Z_k)] + G^{(k)} \circ \int_0^{\tau} \ldots \int_0^{x_n} F'_k(Z) \circ \exp(-i\Lambda \circ Z)dZ + G^{(k+1)} \circ \int_0^{\tau} \ldots \int_0^{x_n} F'_{k+1}(Z) \circ \exp(-i\Lambda \circ Z)dZ, \quad (22)$$

$$0 = \text{Выч}[\Lambda \circ G^{(n+m-1)}(\ ), \circ \sum_{k=1}^{\eta(t)} \ ] \ P_{n+m-1} \ Z \ Z_{n+m-1} +$$

$$+ G^{(n+m)} \circ \int_0^{\tau} \int_0^{x_n} F'_{n+m}(Z) \circ \exp(-i\Lambda \circ Z) dZ. \quad (23)$$

Учитывая значения полюсов вычета, в результате подстановок из уравнений (20), (21) получим вероятности для $k < n$

$$P_k = \frac{(\rho)^k n i}{k!} \circ P_0 \circ \Big(\sum_{k=1} G^{(k-1)} + i \sum_{k=1} G^{(k)} \Big). \quad (24)$$

Аналогично для $k > n + 1$, учитывая, что

$$\text{Выч}[P_n(Z)\pi, Z_n] = (2\ i\ (1[\frac{n^n \rho^{n+1}}{n!} -$$

$$-\exp(\tau) nM \circ \ ] \circ P_0 \circ G^{(n+1)} \quad (25)$$

получим

$$F'_{n+1}(Z) = \frac{\Lambda \circ (n\rho)^n}{n!} \circ \exp(-nM \circ Z) \circ P_0 \circ G^{(n+1)}.$$

Подставляя значения в уравнения (22), (23), найдем вероятность

$$P_{n+1}(Z) = \int_0^{\tau} \ldots \int_0^{x_n} F'_{k+1}(Z) dZ =$$

$$= \frac{n^n \rho^{n+1}}{n!} \circ \exp(-nM \circ Z) \circ P_0 \circ G^{(n+1)}. \quad (26)$$

Суммируя значения с учетом того, что

$$\sum_{k=1}^{N} \text{Выч}[P_k(Z)\pi, Z_k] = (2\ i\ (1[\frac{n^n \rho^{n+1}}{n!} -$$

$$-\exp(\tau) nM \circ \ ] \circ \sum_{j=0}^{k-n-1} \frac{(nM \circ i\ \ )^j}{j!} P_0 \circ G^{(j)} \quad (27)$$

получим

$$P_k = (2\pi i)^{-1} [\frac{n^n \rho^k}{n!} (1 -$$

$$-\exp(\tau) niM \circ \ ] \circ \sum_{j=0}^{k-n-1} \frac{(nM \circ i\tau)^j}{j!} P_0 \circ G^{(j)} \quad (28)$$

Если предположить, что элементы вероятности $G^{(k)}$ зависят от начального значения, загрузки и функции распределения относительного коэффициента, т. е.

$$G^{(k)} = D^{-1} \circ \Lambda \circ P_0 \circ L(\xi_k), \quad (29)$$

то учитывая условие нормировки, получим вероятность P_0 :

$$P_0 = [\sum_{k=1}^{n} D^{-1} \circ \frac{(-ni\rho)^k}{k!} \circ \Lambda(L(\xi_{k-1}) + iL(\xi_k)) +$$

$$+ \frac{n^n}{n!} \sum_{k=n+1}^{n+m} \rho^k (1 - \exp(-niM \circ \tau)) \times$$

$$\times \sum_{j=0}^{k-n} \frac{(niM \circ \tau)^j}{j!} D^{-1} \circ \Lambda \circ L(\xi_k)]^{-1}. \quad (30)$$

Из формулы (30) следует комплексность вероятности P_0, от значения которого зависят расчеты вероятностей потерь и вероятностей обслуживания системы.

Таким образом, для рассмотрения СМО, используя комплексное представление требований, можно придерживаться следующего алгоритма.

1. Представить показатель входного требования по форме (1) в виде комплексного числа.

2. Выделить процесс, характеризующий решение (5).

3. Определить возможные переходы, характеризующие процесс, и построить матрицу переходов (6), (7). Для каждого перехода выделить множество особых точек, используя метод вычетов.

4. На основе полученной матрицы составить систему дифференциальных уравнений (8)–(12).

5. Опираясь на условие нормировки, из СДУ рассчитать начальную вероятность и получить значения требуемых вероятностей.

6. Провести оценку и анализ полученного результата.

Заключение. Таким образом, в ходе исследования получены следующие результаты:

1) обоснована и представлена методика расчета СМО типа BMAP с комплексным показателем требований;

2) при расчете, кроме комплексной природы показателя требования, проявляется комплексность других характеристик СМО, в частности вероятности P_0 и P_k.

Литература

1. Зирко, О. Ф. Требования с комплексными показателями в системах массового обслуживания / О. Ф. Зирко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 130–132.

2. Тихоненко, О. М. Модели массового обслуживания в информационных системах: учеб. пособие / О. М. Тихоненко. – Минск: Технопринт, 2003. – 327 с.

УДК 519.872

В. И. Кудрявцев, д-р техн. наук; О. Ф. Зирко, лаборант

МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ С ВЫСОКОЙ АДАПТИВНОСТЬЮ

The task of model adaptivity has been used in Queuing systems with complex implementation. The new levels of advanced Queuing systems are ordered in device of this state. The complex form of requires and levels allows to represent the new method of driving model in Queuing systems for heightened adaptivity. As instrument of analyses the authors gave the expressions of new complex exponent and characteristics of queuing systems in control models. The heightened adaptivity is the future of Queuing theory. As the result of work we can assert that all process of Queuing theory could be transmitted in Queuing mini-systems. In this paper was made the attempt to improve adaptivity of Queuing systems by means of spreading the possibilities of mini-systems with complex exponent.

Введение. Под адаптивностью модели понимаются возможности поддержания требуемой адекватности модели:

– при изменении требований и задач модели;

– усложнении или расширении моделируемого процесса или структуры.

Потенциал повышения адаптивности модели может быть выявлен на разных уровнях модели, связанных с ее структурными базовыми особенностями, процессами и задачами. В системе обслуживания (СМО) можно определить следующие уровни модели:

1) обслуживающего прибора или уровень комплекса систем;
2) системы;
3) очереди;
4) источника требований;
5) требования;
6) задач системы.

Основная часть. Рассмотрим каждый из уровней.

Уровень комплекса систем. В традиционной СМО результат реализации требований рассматривается как конечный итог работы данной СМО или как основание для создания нового потока требований в смежной СМО. В последнем случае обслуживающий прибор является одновременно источником требований для смежной СМО. Интенсивность поступления требований в этой СМО будет определяться по формуле

$$\lambda = \Phi_{\text{тр}}(P_{ki}\lambda_i), \qquad (1)$$

где $\Phi_{\text{тр}}$ – функционал трансформации; P_{ki} – вероятность реализации; λ_i – интенсивность поступления требований в первоначальной СМО; $(P_{ki}\lambda_i)$ – поток реализованных требований.

Требование с комплексным показателем представляет собой описание сложного объекта, что подразумевает сложное с ним взаимодействие, которое в свою очередь повышает вероятность сложной, т. е. многовариантной, реализации этого требования. В этом случае в СМО возникает эффект множественной реализации, под которой подразумевается многовариантная реализация требований. Тогда вероятность реализации может быть представлена как комплексное число [1]. При этом для сохранения единства с существующей формой записи вещественная часть этого числа отображает завершенную реализацию требования, т. е. реализацию, за которой не прослеживается дальнейшая обработка этого результата, в противном случае вещественная часть числа отсутствует. В соответствии с принятой формой отображения комплексного числа каждая компонента этого числа представляет собой отдельное измерение [2]. Поскольку каждая мнимая компонента этого числа в вероятности реализации есть основание для создания потока требований смежных систем реализации, структурные схемы которых принято рассматривать в качестве плоских схем, то под каждой компонентой показателя реализации подразумевается смежная СМО, представляемая в отдельном плоском измерении, которое назовем плоскостью реализации, связи между которыми выражаются формулой (1).

Очевидно, что если существуют две плоскости реализации, в которых одни и те же источник требований и обслуживающий прибор играют противоположные роли, то речь идет о системе с обратной связью по требованиям. Тогда эта система может рассматриваться как система управления источником требований либо на уровне мнимой части показателя требования, либо на уровне времени издания требования. В последнем случае речь может идти о полумарковских и немарковских процессах издания требований в СМО.

Уровень системы. По сложности организации можно выделить два типа СМО:

– с простым регламентом очереди;

– со сложным управлением очередью, например, так называемые BMAP-системы.

Попробуем описать процессы управления реструктуризацией $\{CR\}$ СМО как процессы СМО $\{Q_i\}$.

Предположим, что

$$\{Q_i\} \in \{Q\}, \qquad (2)$$

$$\{CR\} \in \{Q\}. \qquad (3)$$

Тогда в общем случае требования в управляемых системах могут быть представлены в двух ипостасях (ролях): требования реализации $\{REQ_{real}\}$ и требования реструктуризации $\{REQ_{rest}\}$. Потоки этих требований обслуживаются в собственных, но логически взаимосвязанных СМО:

$$\{REQ_{real}\} \in \{Q_{real}\}, \quad (4)$$

$$\{REQ_{rest}\} \in \{Q_{rest}\}, \quad (5)$$

$$\{Q_{real}\} \cup \{Q_{rest}\} \in \{Q\}. \quad (6)$$

Кроме того, процесс создания требований реструктуризации на основе требований реализации может быть представлен как отдельный процесс СМО. Если множество $\{REQ_{rem}\}$ представляет множества требований измерений, то

$$\{Q_{rest}\} : \{REQ_{real}\} \to \{REQ_{rem}\}. \quad (7)$$

Для реализации реструктуризации необходима промежуточная плоскость особого типа, называемая шаблоном реструктуризации $\{Q_{pattern}\}$. Сформированный шаблон реструктуризации отображается в плоскости реализации. Тогда управляемая СМО может быть представлена как четыре взаимосвязанных СМО, расположенных последовательно и создающих замкнутую структуру, характерную для систем управления:

1) плоскость реализации $\{Q_{real}\} \sim \{Q_1\}$;
2) плоскость измерений $\{Q_{rem}\} \sim \{Q_2\}$;
3) плоскость реструктуризации $\{Q_{rest}\} \sim \{Q_3\}$;
4) плоскость шаблона реструктуризации $\{Q_{pattern}\} \sim \{Q_4\}$ и опять исходная плоскость реализации

$$\{Q_1\} \to \{Q_2\} \to \{Q_3\} \to \{Q_4\} \to \{Q_1\}. \quad (8)$$

При этом управляемая СМО расположена в плоскости реализации. В плоскости измерений отображаются источники требований и все требования плоскости реализации, собранные в очереди к обслуживающим измерительным приборам в соответствии с измерительной схемой. Для предотвращения неполноты представления СМО плоскости реализации на плоскости измерений обслуживающий прибор плоскости реализации отображается на плоскости измерений в качестве требования с показателем, представляющим набор функционалов реализации данного обслуживающего прибора, а также указателем на осуществляемый в данный момент функционал реализации. Обслуживающий прибор плоскости измерений реализует процессы измерения и анализа показателей требований СМО плоскости измерений. При этом скорость процесса реализации требований в этой плоскости необходима многократно выше скорости реализации требований в плоскости реализации. В плоскости реструктуризации источник требований может основываться как на потоке реализованных требований с единичного обслуживающего прибора, так и на множестве независимых потоков с разных обслуживающих приборов плоскости измерений. В последнем случае очевидно, что аргумент функционала трансформации может быть представлен комплексным числом. Обслуживающий прибор плоскости реструктуризации на основе реализации требований реструктуризации осуществляет оценку требующих реструктуризации объектов и подготавливает создание шаблона реструктуризации. На плоскости шаблона реструктуризации требования представляют собой шаблоны, в которых имеются схемы требуемых структур на плоскости реализации. Обслуживающий прибор этой плоскости сравнивает структуры плоскости реализации и шаблона реструктуризации, создает и выполняет план реструктуризации на плоскости реализации.

Уровень очереди. Решение задачи управления очередью связано с анализом связи требования с целями системы. Для этого предлагается ввести матрицу функционала актуальности реализации требования $\Phi_{act}(\Lambda, M)$ на обслуживающий прибор. Исходя из показателя требования, функционал может выполнять функции контроля состояния очереди по формальным признакам, например по времени пребывания в очереди, или получать два результата:

1) предсказание функционала реализации требования на этом обслуживающем приборе;
2) предсказание оценки реализации требования на этом обслуживающем приборе.

При этом получение первого результата необходимо для систем с множественностью реализации. Получение второго результата необходимо для принятия управляющих решений в открытых системах массового обслуживания, результат работы которых существенно зависит от внешних факторов.

Если получение вычисляемых результатов не требуется, то функционал актуальности реализации описывает регламент управления очередью. При принятии решений реструктуризации очереди могут выполняться расчеты многофункциональной актуальности реализации, включающей в себя функционал актуальности сиюминутной реализации, функционалы реализации требований на смежных обслуживающих приборах и др.

Уровень источника требований. Основным показателем источника требований в СМО является λ – интенсивность входного потока. Попробуем представить λ в качестве комплексного числа, тогда исходя из предыдущих рассуждений, это может означать издание нескольких потоков из одного источника или формирование потоков требований из нескольких источников.

В последнем случае возникают новые возможности управления очередями в СМО как управление очередью у источника. Таким образом, применение комплексной формы представления данного показателя целесообразно.

Уровень требования. В классических СМО требование характеризуется вещественными величинами $T(t)$ и $\xi(t)$. Каждая из величин рассматривается отдельно и имеет свой закон распределения и совместное распределение, одинаковое во взаимосвязанном процессе [4]. Замена вещественной формы представления на комплексную

$$Z(t) = T(t) + i\,\xi(t) \qquad (9)$$

дала возможность более точно предсказывать катастрофы при расчете вероятности обработки требований [2]. Показатель требования состоит из безразмерных компонентов типа $\xi(x - x_0)$, где ξ – функция размерности $1 / [x]$; x – одна из размерных компонент показателя требования; x_0 – смещение; ξ и x_0 создают возможность актуализации компонентов показателя требования, а именно создавая предпосылки для ускорения расчета функционала актуальности реализации требования и ускорения процессов управления реструктуризацией СМО.

Что касается закона распределения, наиболее значимой характеристикой которого является функция распределения (ФР), то при комплексном представлении вид его может существенно измениться. Если $F(Z, t)$ – ФР реального процесса, а Z описывается по формуле (9), то при комплексном представлении ФР можно описать с помощью формулы

$$F(Z,t) = \xi F(T(t)) + i\sum_{n\in k}^{\eta(t)} C_n F_n(\quad . \qquad (10)$$

Кроме того, при расчете вероятности реализации требования P_k на основе наименьшего показателя требования также появляется новая комплексная форма представления P_k. Однако в этом случае возникает конфликт природы комплексности этого показателя, вытекающий из многовариантности и многозначности процесса реализации, и природы комплексности, связанной с комплексностью показателя требования. В последнем случае имеет место разрыв с существующей практикой расчета экономической эффективности работы СМО. В первом же случае оценка реализации конкретизируется и дополняется. Очевидно, что существует необходимость устранения комплексности показателя P_k, связанной с непосредственным учетом комплексного показателя требования в общепринятых методиках расчета, посредством использования альтернативной методики учета потерь.

Уровень задач системы. На уровне задач системы может быть поставлен комплекс обратных задач СМО, расширяющий область ее применения, а именно:

– прогнозирование параметров источника требований, например интенсивности поступления требований;

– прогнозирование показателей требования в разные моменты его нахождения в очереди.

Может быть предложен универсальный подход к задачам СМО, исключающий сами понятия прямых и обратных задач. При этом подходе в задачах СМО прямо или косвенно могут измеряться и прогнозироваться любые показатели СМО. При универсальном подходе могут использоваться различные алгоритмы реализации различных связанных задач в рамках одной СМО.

Уровень функциональности системы. На уровне функциональности системы ставится задача совершенствования работы СМО без изменения ее структуры. По разным показателям функционирования СМО мы будем иметь множества предсказанных значений и одно фактическое значение на каждое из этих множеств. В результате может быть проведена трассировка каждого элемента множества с соответствующим фактическим значением с целью оптимизации алгоритма прогноза. Кроме того, может быть проведена трассировка тенденций в множествах прогнозных значений, структурированных по времени или по другому признаку, и определение влияния этих тенденций на точность прогноза. Тогда трассировка может быть представлена как процесс СМО, в котором требования содержат прогнозные значения того или иного комплексного показателя, а первым обслуживается требование, содержащее фактическое измеренное значение этого показателя.

Из рассмотренных выше уровней, опираясь на теорию комплексных пространств, можно утверждать о существовании еще одного уровня СМО – уровня комплексных пространств [3].

Уровень комплексных пространств СМО.

1. Эффективность процессов управления, например, источником требований, управление реструктуризацией СМО, очередью у источника во многих случаях не могут рассматриваться вне учета динамических характеристик следующих компонентов системы управления: объекта управления, управляющего устройства, передаточного звена, обратной связи. Это обусловливает необходимость использования в качестве компонентов того или иного комплексного показателя выражений.

2. Во многих случаях при управлении комплексом систем может потребоваться синхронизация процессов СМО. Кроме того, введение в компоненты комплексного показателя синхронизирующих функций позволит описывать структуры, ранее не включаемые в модель СМО,

в частности структуру кольцевого стека, где в одном устройстве синхронизированы две роли: источника требований и обслуживающего прибора.

3. Учет динамических характеристик и синхронизирующих функций требует сложного согласования комплексных пространств различных показателей разных СМО. Поскольку большинство потоков требований связано отношениями материального баланса, и в них можно выделить источники, передающие звенья (очереди), трансформирующие элементы, с этой целью в качестве структур анализа могут использоваться цепи.

4. При управлении на уровне системы может меняться структура СМО. В случае управления на уровне комплекса систем, например при управлении источником требований, может меняться тип системы СМО. Таким образом, можно констатировать, что все характеристики СМО, кроме показателей требований, могут меняться в ходе управления ею на разных уровнях, при этом эти характеристики являются независимыми по отношению друг к другу. Тогда, поскольку может существовать управляющий метапроцесс несколькими связанными СМО, этот метапроцесс также может быть представлен как процесс СМО, в котором в качестве требований выступают отображения соответствующих СМО комплекса систем. Показатели данных требований формируются из управляемых характеристик соответствующих СМО. С другой стороны, процесс измерения комплексного показателя требования в обслуживающем приборе на плоскости измерений может быть в свою очередь представлен как процесс СМО, в котором в качестве требования выступают требования измерения соответствующего компонента показателя исходного требования. В показатель требования измерения компонента показателя могут быть включены характеристики и ограничения требуемого процесса измерений компоненты показателя исходного требования. Таким образом, процессы управления в комплексном пространстве СМО порождают основания для СМО – обобщений и для СМО – конкретизации управляющих процессов.

Заключение. Исходя из описанного, можно сделать следующие выводы.

1. На уровне комплекса систем повышение адаптивности модели СМО заключается не только в возможности отображения практически неограниченного простого расширения или сужения системы за счет подключения или отключения дополнительных СМО, но и за счет моделирования многовариантной реализации требований на обслуживающем приборе, а также моделирования системы управления источником требований.

2. Все процессы, связанные с вычислением в СМО, могут быть представлены как процессы СМО. Это позволяет сократить количество вычислительных алгоритмов, используемых в процессах анализа и управления.

3. Все показатели СМО могут иметь комплексную форму представления, что в каждом таком случае повышает адаптивность СМО.

Литература

1. Зирко, О. Ф. Требования с комплексными показателями в системах массового обслуживания / О. Ф. Зирко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 130–133.

2. Кудрявцев, В. И. Теория массового обслуживания в циклических процессах автоматического управления / В. И. Кудрявцев, О. Ф. Зирко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2007. – Вып. XV. – С. 134–137.

3. Свешников, А. Г. Теория функций комплексной переменной / А. Г. Свешников, А. Н. Тихонов. – М.: Наука, 1970. – 304 с.

4. Тихоненко, О. М. Модели массового обслуживания в информационных системах: учеб. пособие / О. М. Тихоненко. – Минск: Технопринт, 2003. – 327 с.

УДК 681.3.07

П. П. Урбанович, профессор; Р. Х. Хтажа, аспирант;
М. Беднарчик (университет KUL, г. Люблин, Польша)

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ В СИСТЕМАХ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ

The article is concerned of intelligent databases. The intelligent database characterized as databases, that manage information in a natural way, making the information to be easy to store, access and use. Instrumental recourses for this purpose are analyzed. It is noted, that the most perspective is the direction of development and use of intellectual DB – the information systems, allowing to form administrative and management decisions for various practical areas. Directions and methods of integration of systems of operative analytical processing and the intellectual analysis of data, structure and tool means of such integrated systems are considered.

Введение. В последние годы в мире оформился ряд новых концепций хранения и анализа корпоративных данных:

– хранилища данных, или склады данных (Data Warehouse);

– оперативная аналитическая обработка (ОАО – On-Line Analytical Processing, OLAP);

– интеллектуальный анализ данных (ИАД – Data Mining).

Технологии OLAP тесно связаны с технологиями построения систем Data Warehouse и методами интеллектуальной обработки. Поэтому *интеллектуальные базы данных* (ИБД) используются для решения проблемы передачи, хранения и обработки информации с большими объемами, а также для потребностей пользователя с целью получения доступной к пониманию информации [1].

Очень часто информационно-аналитические системы, создаваемые в расчете на непосредственное использование лицами, принимающими решения, оказываются чрезвычайно просты в применении, но жестко ограничены в функциональности. Такие статические системы называются в литературе информационными системами руководителя. Они содержат в себе предопределенные множества запросов и, будучи достаточными для повседневного обзора, не способны ответить на все вопросы к имеющимся данным, которые могут возникнуть при принятии решений.

Динамические системы поддержки принятия решения (СППР), напротив, ориентированы на обработку нерегламентированных (ad hoc) запросов аналитиков к данным. Наиболее глубоко требования к таким системам рассмотрел E. F. Codd в статье [2], положившей начало концепции OLAP. Работа аналитиков с этими системами заключается в интерактивной последовательности формирования запросов и изучения их результатов.

Для того чтобы существующие хранилища данных способствовали принятию управленческих решений, информация должна быть представлена аналитику в нужной форме, т. е. он должен иметь развитые инструменты доступа к данным хранилища и их обработки.

В данной статье рассматриваются и анализируются методы интеграции систем ОАО и ИАД, структура и инструментальные средства таких интегрированных систем.

Интеллектуальный анализ данных. ИАД (Data Mining) – это процесс поддержки принятия решений, основанный на поиске в данных скрытых закономерностей (шаблонов информации). При этом накопленные сведения автоматически обобщаются до информации, которая может быть охарактеризована как знания.

В общем случае процесс ИАД состоит из трех стадий:

1) выявление закономерностей (свободный поиск);

2) использование выявленных закономерностей для предсказания неизвестных значений (прогностическое моделирование);

3) анализ исключений, предназначенный для выявления и толкования аномалий в найденных закономерностях.

Иногда в явном виде выделяют промежуточную стадию проверки достоверности найденных закономерностей между их нахождением и использованием (стадия валидации).

Все методы ИАД подразделяются на две большие группы по принципу работы с исходными обучающими данными [3].

В первом случае исходные данные могут храниться в явном детализированном виде и непосредственно использоваться для прогностического моделирования и/или анализа исключений; это так называемые методы рассуждений на основе анализа прецедентов. Главной проблемой этой группы методов является затрудненность их использования на больших объемах данных, хотя именно при анализе больших хранилищ данных методы ИАД приносят наибольшую пользу.

Во втором случае информация вначале извлекается из первичных данных и преобразуется в некоторые формальные конструкции (их вид зависит от конкретного метода). Согласно предыдущей классификации, этот этап выполняется

на стадии свободного поиска, которая у методов первой группы в принципе отсутствует.

Таким образом, для прогностического моделирования и анализа исключений используются результаты этой стадии, которые гораздо более компактны, чем сами массивы исходных данных. При этом полученные конструкции могут быть либо «прозрачными» (интерпретируемыми), либо «черными ящиками» (нетрактуемыми).

Интеграция систем ОАО и ИАД. Оперативная аналитическая обработка и интеллектуальный анализ данных – две составные части процесса поддержки принятия решений. Большинство систем ОАО заостряет внимание только на обеспечении доступа к многомерным данным, а большинство средств ИАД, работающих в сфере закономерностей, имеют дело с одномерными перспективами данных. Эти два вида анализа должны быть тесно объединены, т. е. системы OLAP должны фокусироваться не только на доступе, но и на поиске закономерностей.

В плане практической реализации и с точки зрения формализации выполняемых операций существующие подходы в построении систем рассматриваемого класса можно разделить на три группы:

– на основе выполнения интеллектуального анализа, который обеспечивается над любым результатом запроса к многомерному концептуальному представлению, т. е. над любым фрагментом любой проекции гиперкуба показателей;

– подобно данным, извлеченным из хранилища, результаты интеллектуального анализа должны представляться в гиперкубической форме для последующего многомерного анализа;

– гибкий способ интеграции позволяет автоматически активизировать однотипные механизмы интеллектуальной обработки над результатом каждого шага многомерного анализа (перехода между уровнями обобщения, извлечения нового фрагмента гиперкуба и т. д.).

На рис. 1 представлена обобщенная структурная схема системы многомерного интеллектуального анализа данных.

Сфера детализированных данных. Это область действия большинства систем, нацеленных на поиск информации. В большинстве случаев реляционные СУБД отлично справляются с возникающими здесь задачами.

Общепризнанным стандартом языка манипулирования реляционными данными является SQL.

Сфера агрегированных показателей. Комплексный взгляд на собранную в хранилище данных информацию, ее обобщение и агрегация, гиперкубическое представление и многомерный анализ являются задачами систем оперативной аналитической обработки данных (OLAP). Здесь можно или ориентироваться на специальные многомерные СУБД [4], или оставаться в рамках реляционных технологий. Во втором случае заранее агрегированные данные могут собираться в БД звездообразного вида, либо агрегация информации может производиться на лету в процессе сканирования детализированных таблиц реляционной БД.

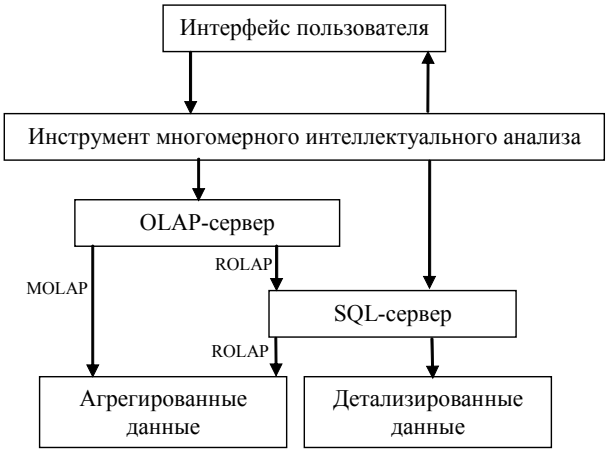


Рис. 1. Архитектура системы многомерного интеллектуального анализа данных

Аббревиатуры ROLAP и MOLAP означают соответственно реляционные (relational) и многомерные (multi-demensional) OLAP.

Многомерное концептуальное представление (multi-dimensional conceptual view) есть множественная перспектива, состоящая из нескольких независимых измерений, вдоль которых могут быть проанализированы определенные совокупности данных. Одновременный анализ по нескольким измерениям определяется как многомерный анализ. Каждое измерение включает направления консолидации данных, состоящие из серии последовательных уровней обобщения, где каждый вышестоящий уровень соответствует большей степени агрегации данных по соответствующему измерению (рис. 2). Так, измерение **Исполнитель** может определяться направлением консолидации, состоящим из уровней обобщения «предприятие – подразделение – отдел – служащий». Измерение **Время** может даже включать два направления консолидации: «год – квартал – месяц – день» и «неделя – день», поскольку счет времени по месяцам и по неделям несовместим. В этом случае становится возможным произвольный выбор желаемого уровня детализации информации по каждому из измерений. Операция спуска (drilling down) соответствует движению от высших ступеней консолидации к низшим; напротив, операция подъема (rolling up) означает движение от низших уровней к высшим.

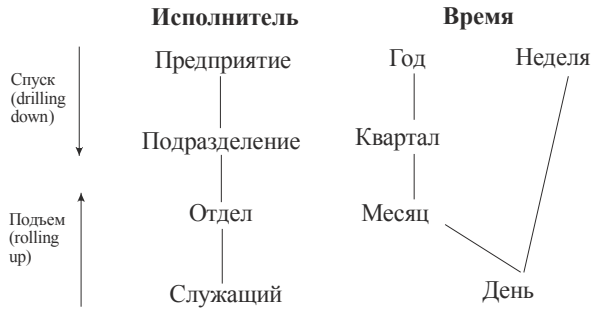


Рис. 2. Пример измерений и направлений консолидации данных

В специализированных СУБД, основанных на многомерном представлении данных, последние организованы не в форме реляционных таблиц, а в виде упорядоченных многомерных массивов типа:

– гиперкубов – все хранимые в БД ячейки должны иметь одинаковую мерность, т. е. находиться в максимально полном базисе измерений;

– поликубов – каждая переменная хранится с собственным набором измерений, и все связанные с этим сложности обработки перекладываются на внутренние механизмы системы.

Использование многомерных БД в системах оперативной аналитической обработки имеет следующие достоинства:

1) в случае использования многомерных СУБД поиск и выборка данных осуществляются значительно быстрее, чем при многомерном концептуальном взгляде на реляционную базу данных, так как многомерная база данных денормализована, содержит заранее агрегированные показатели и обеспечивает оптимизированный доступ к запрашиваемым ячейкам;

2) многомерные СУБД легко справляются с задачами включения в информационную модель разнообразных встроенных функций, тогда как объективно существующие ограничения языка SQL делают выполнение этих задач на основе реляционных СУБД достаточно сложным, а иногда и невозможным.

С другой стороны, имеются существенные ограничения:

– многомерные СУБД не позволяют работать с большими базами данных. К тому же за счет денормализации и предварительно выполненной агрегации объем данных в многомерной базе, как правило, соответствует (по оценке [4]) в 2,5–100 раз меньшему объему исходных детализированных данных;

– многомерные СУБД по сравнению с реляционными очень неэффективно используют внешнюю память.

В подавляющем большинстве случаев информационный гиперкуб является сильно разреженным, а поскольку данные хранятся в упорядоченном виде, неопределенные значения удается удалить только за счет выбора оптимального порядка сортировки, позволяющего организовать данные в максимально большие непрерывные группы. Но даже в этом случае проблема решается только частично. Кроме того, оптимальный с точки зрения хранения разреженных данных порядок сортировки, скорее всего, не будет совпадать с порядком, который чаще всего используется в запросах. Поэтому в реальных системах приходится искать компромисс между быстродействием и избыточностью дискового пространства, занятого базой данных.

Уровни интеллекта в интеллектуальных базах данных. Различают три инструментальных уровня интеллекта, которые делают базу данных интеллектуальной (рис. 3):

– инструменты высокого уровня;

– интерфейс с пользователем высокого уровня;

– машина базы данных.

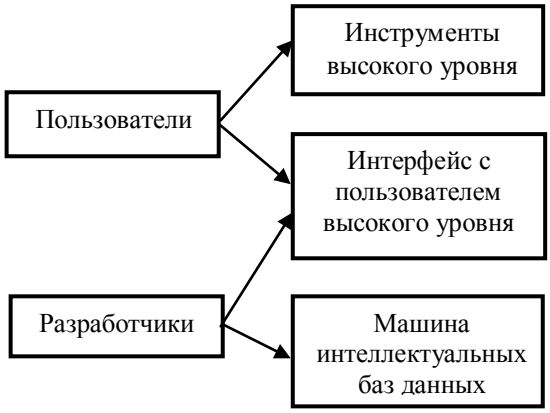


Рис. 3. Взаимосвязь компонентов и уровней интеллекта в интеллектуальных базах данных

Инструменты высокого уровня (high-level tools). Одной из отличительных особенностей интеллектуальных БД является то, что они сочетают в себе ряд методов, которые ранее были изолированы друг от друга. Кроме того, эти методы лежат в основе структуры интеллектуальных БД. Существуют инструменты высокого уровня типа приложений, которые являются дополнениями к функции интеллектуальных баз данных. Эти инструменты могут быть применены пользователями БД для реализации ряда услуг (таких, например, как интеллектуальный поиск).

Будем различать следующие виды инструментов высокого уровня:

– *инструменты обнаружения знаний* (этот тип содержит инструменты для статистического анализа данных);

– *инструменты для контроля и совершенствования данных* (инструменты, которые обнаруживают и автоматически напоминают об ошибках в БД);

– *инструменты управления* (этот тип отражает тот факт, что информация может быть выражена в различных формах и на различных уровнях);

– *инструменты предоставления данных* (вполне естественно, что большинство пользователей нуждается в предоставлении некоторых из этих данных);

– *инструменты поддержки резолюции* (имеется особый вид средства информации, ее поиска и использования с целью принятия управленческих решений);

– *инструменты управления форм данных* (данные не всегда хранятся в той форме, в которой они нам нужны; инструменты этого типа позволяют пользователю преобразовать данные из одной формы в другую);

– *инструменты разработки интеллектуальной системы* (предоставляют услуги по разработке интеллектуальных БД).

Перечисленные инструменты позволяют разработчикам и системным администраторам улучшить разработку и эксплуатацию интеллектуальных баз данных.

Интеллект на уровне интерфейса с пользователем. Пользовательский интерфейс является частью системного программного обеспечения, которым занимается пользователь.

Интерфейс может быть интеллектуальным и зависит от простоты и формы использования. В этом случае интерфейс использует предположения для вывода информации, которые не могут быть получены непосредственно.

Интеллект на уровне машины БД. Пользовательский интерфейс поддерживается набором возможностей базы данных. Эти возможности предоставляют набор методов, позволяющих СУБД выполнять требуемые функции. Примером может служить обработка запроса.

Заключение. В статье рассмотрены и проанализированы тенденции развития информационных систем хранения, обработки и использования больших массивов слабо структурированных данных.

Отмечено, что наиболее перспективным является направление разработки и использования интеллектуальных БД, т. е. информационных систем, позволяющих формировать управленческие и менеджерские решения для различных практических приложений.

Рассмотрены направления и методы интеграции систем ОАО и ИАД, структура и инструментальные средства таких интегрированных систем.

Литература

1. Intelligent Databases / K. Saye [et al.]. – New York: John Wiley & Sons. – 1989. – 326 p.

2. Codd, E. F. Providing OLAP (On-Line Analytical Processing) to User-Analysts: An IT Mandate / E. F. Codd, S. B. Codd, C. T. Salley. – E. F. Codd & Associates. – 1993. – 462 p.

3. Parsaye, K. A. Characterization of Data Mining Technologies and Processes / K. A. Parsaye // The Journal of Data Warehousing. – 1998. – № 1. – 226 p.

4. Harinarayan, V. Implementing Data Cubes Efficiently / V. Harinarayan, A. Rajaraman, J. Ullman // SIGMOD Conference. – Montreal, CA. – 1996. – 412 p.

Уважаемые читатели!

Проводится подписка на научный журнал

«ТРУДЫ БГТУ»

на 2009 год

Научный журнал выходит один раз в год в 9 сериях

Лесное хозяйство
Лесная и деревообрабатывающая промышленность
Химия и технология неорганических веществ
Химия и технология органических веществ
Физико-математические науки и информатика
Экономика и управление
Политология, философия, история, филология
Издательское дело и полиграфия
Учебно-методическая работа (1 раз в два года)

Наш индекс

для индивидуальных подписчиков	00804
для ведомственных организаций	008042

В научном журнале публикуются результаты завершенных и не опубликованных ранее исследований, имеющих приоритетный характер.

Журнал рассчитан на научных сотрудников, профессорско-преподавательский состав, аспирантов, широкий круг специалистов.

РЕФЕРАТЫ

УДК 517.977

Марченко, В. М. **Относительная управляемость линейных стационарных гибридных систем с многомерным временем** / В. М. Марченко, О. Н. Пыжкова // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 3–5.

Рассматривается проблема относительной управляемости в линейных гибридных стационарных системах с двумерным временем (2-D систем). Одна компонента временной переменной непрерывна, другая – дискретна. Для таких систем вводится понятие определяющего уравнения, устанавливаются алгебраические свойства их решений, а также получено представление решений в виде ряда по решениям определяющих уравнений и, как следствие, доказан параметрический ранговый критерий относительной управляемости.

Библиогр. – 8 назв.

УДК 517.977

Марченко, В. М. **О слабой наблюдаемости малых решений дифференциально-алгебраических систем с запаздыванием** / В. М. Марченко, З. Зачкевич // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 6–8.

Рассматривается проблема слабой наблюдаемости малых решений в линейных стационарных гибридных дифференциально-алгебраических системах. Для таких систем проклассифицированы основные типы наблюдаемости, приведены параметрические критерии наблюдаемости, исследована проблема спектральной наблюдаемости и ее связь с проблемой наблюдаемости малых решений.

Библиогр. – 7 назв.

УДК 517.929

Копейкина, Т. Б. **Управляемость стационарных сингулярно возмущенных систем с запаздыванием** / Т. Б. Копейкина, А. С. Гусейнова // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 9–14.

Исследуется задача относительной управляемости линейных стационарных сингулярно возмущенных систем (СВС) дифференциальных уравнений с постоянным запаздыванием. Развивается подход к изучению управляемости СВС размерности $n_1 + n_2$, имеющих широкий спектр приложений в гидродинамике, химической кинетике и др., через условия управляемости вырожденной n_1- и n_2-системы пограничного слоя при новых, более общих по сравнению с ранее известными, ограничениях на параметры исходной системы. Получены достаточные условия управляемости по медленным, быстрым переменным, по совокупности переменных. Они носят эффективный, удобный для проверки, характер и выражены через решения соответствующих алгебраических определяющих уравнений. Приведен пример применения данных условий для объекта управления, описываемого СВС с запаздыванием пятого порядка.

Библиогр. – 9 назв.

УДК 514.144.12

Можей, Н. П. **Орбитальные разложения групп аффинных и проективных преобразований** / Н. П. Можей // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 15–17.

Работа посвящена описанию локально-транзитивных аффинных и проективных действий на трехмерном пространстве, т. е. описанию подалгебр алгебр аффинных и проективных преобразований, которые имеют открытые орбиты при действии на соответствующих пространствах. Проведено полное описание подалгебр полной аффинной алгебры и подалгебр проективной алгебры трехмерного пространства. Выделены подалгебры, действующие локально транзитивно и, в особенности, имеющие конечное число орбит. Приведена классификация конечных орбитальных разложений. Предложенная методика может быть использована для произвольной размерности.

Библиогр. – 5 назв.

УДК 519.624

Соловьева, И. Ф. **О методах решения задачи Троеша** / И. Ф. Соловьева // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 18–20.

В статье для решения известной своей сложностью в вычислительном отношении задачи Троеша предложена модификация метода множественной двусторонней пристрелки, сводящая исходную граничную задачу к совокупности задач Коши. Исследованы варианты различных расположений точек пристрелки и выбора пристрелочных траекторий.

Библиогр. – 4 назв.

УДК 531.19

Аргиракис, П. **Влияние геометрии решетки на диффузионные свойства решеточного газа на плоских статически неупорядоченных решетках** / П. Аргиракис, В. С. Вихренко, Я. Г. Грода // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 21–24.

В работе исследованы диффузионные свойства ленгмюровских решеточных газов на плоских статически неупорядоченных решетках. Анализ результатов компьютерного моделирования показал, что при аналитическом изучении диффузионных процессов при высокой температуре указанные системы могут рассматриваться как упорядоченные решетки с высотой межузельного барьера, равной средней высоте барьера в неупорядоченной системе. При очень низких температурах процесс диффузии частицы по решетке может быть описан в рамках приближения перколяционного пути. В области промежуточных температур наилучшее соответствие между результатами аналитических расчетов и компьютерного моделирования достигается при использовании интерполяционного соотношения, в котором энергия активации кинетической диффузии принимается равной среднему арифметическому от средней высоты барьера и энергии перколяционного перехода.

Ил. 5. Библиогр. – 15 назв.

УДК 531.19

Аргиракис, П. **Диффузия ленгмюровского решеточного газа на неупорядоченной решетке при экспоненциальном распределении высот барьеров** / П. Аргиракис, Я. Г. Грода // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 25–28.

В работе рассмотрены диффузионные свойства ленгмюровского решеточного газа на плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением барьеров. Получено аналитическое выражение для кинетического коэффициента диффузии решеточного газа. Проведено прямое компьютерное моделирование диффузионных процессов в рассматриваемой неупорядоченной системе. Сопоставлением результатов моделирования и аналитических расчетов показано, что полученное соотношение может с успехом применяться в случае динамически неупорядоченных систем. Определена средняя энергия активации кинетической диффузии и рассмотрена ее зависимость от температуры. Предложено аналитическое выражение для кинетического коэффициента диффузии при статической неупорядоченности.

Ил. 3. Библиогр. – 12 назв.

УДК 536.758

Белов, В. В. **Замкнутые уравнения в статистической механике жидкости** / В. В. Белов // Труды БГТУ. Сер. IV, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 29–31.

Конфигурационный интеграл системы с произвольным взаимодействием рассматривается как функционал некоторого внешнего поля. Частичные функции распределения определяются обычным образом путем интегрирования гиббсовского распределения по лишним переменным, что позволяет установить интегральные связи между функциями различных порядков. Связи между ними дифференциального типа можно найти с помощью функционального дифференцирования конфигурационного интеграла по внешнему полю. Объединение соотношений для частичных функций распределения с соотношениями для прямых корреляционных функций позволяет получить без использования каких-либо приближений минимальный набор из пяти выражений, представляющих собой замкнутую систему уравнений.

Библиогр. – 4 назв.

УДК 536.758

Камлюк, А. Н. **Анализ упаковывающей нагрузки при навивке ДНК на гистоны** / А. Н. Камлюк, С. А. Борисевич // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 32–34.

В работе проведен анализ четырех схем компактизации молекулы ДНК. Схемы нагружения отличаются видом упаковывающей нагрузки, которую следует приложить к ДНК при ее навивке на гистоны. Молекула ДНК моделируется стержнем Кирхгофа. Контакт между гистонами и молекулой ДНК на данном этапе не учитывался. Для каждой схемы нагружения записаны и численно решены нелинейные дифференциальные уравнения упругой линии оси молекулы ДНК. Оптимальной схемой выбрана та, для которой при наименьших значениях силовой нагрузки обеспечивается прилегание молекулы к гистоновому октамеру.

Ил. 9. Библиогр. – 3 назв.

УДК 531.19

Бокун, Г. С. **Кинетика структурных превращений в решеточной системе** / Г. С. Бокун, Р. Н. Ласовский, В. С. Вихренко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 35–38.

Для статистико-механического описания кинетики структурных превращений использовано представление неравновесной функции распределения в локально-равновесной форме. Неравновесное состояние определяется локальными значениями химических потенциалов, заданных на узлах решетки. Параметр порядка вводится с помощью разбиения решетки на две подрешетки. Из исходных уравнений получены уравнения, описывающие эволюцию структурного фактора и концентрации числа частиц по объему среды при изотермических условиях. Для получения уравнений эволюции использован метод средних потенциалов. Изучена релаксация параметра порядка в упорядоченной и неупорядоченной фазах в случае пространственно однородной среды. Показано, что в упорядоченной среде параметр порядка релаксирует в 200 раз быстрее.

Ил. 3. Библиогр. – 9 назв.

УДК 531.19

Ласовский, Р. Н. **Эволюция межфазной границы решеточной системы в приближениях среднего поля и квазихимическом приближении** / Р. Н. Ласовский, Г. С. Бокун // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 39–41.

Получены расчетные уравнения, описывающие кинетику решеточной системы в рамках приближений среднего поля и квазихимическом. Показано, что качественное поведение переходного слоя совпадает с его поведением при моделировании по методу Монте-Карло процесса разряда интеркаляционной батареи. Установлено наличие в переходном слое «горба», который уменьшается с течением времени. Плотность интеркалянта в разреженной фазе практически линейно зависит от координаты. Величины химического коэффициента диффузии, рассчитанные по закону Фика и с помощью формулы Жданова, находятся в хорошем соответствии.

Ил. 2. Библиогр. – 5 назв.

УДК 531.19+539.219.3

Гапанюк, Д. В. **Анализ результатов моделирования диффузии в двухкомпонентных системах на основе аналитических соотношений** / Д. В. Гапанюк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 42–45.

Метод Монте-Карло используется для компьютерного моделирования диффузии двухкомпонентного решеточного флюида на квадратной решетке с межчастичным притяжением при одинаковых энергиях связи частиц с подложкой. Алгоритм моделирования модифицирован применительно к особенностям таких систем. Получены аналитические выражения для кинетических коэффициентов диффузии компонентов. Описана методика моделирования равновесных свойств двухкомпонентной решеточной системы, результаты которого дают возможность определить кинетические коэффициенты диффузии по аналитическим соотношениям. Введены корреляционные факторы, учитывающие взаимное воздействие частиц разных сортов, а также дополнительный множитель, учитывающий влияние замедления менее подвижного компонента на диффузию более подвижного. Проведено моделирование диффузии по методу Монте-Карло, в результате которого определены кинетические коэффициенты диффузии. Сопоставлены результаты вычислений по аналитическим выражениям с данными моделирования диффузии по методу Монте-Карло.

Ил. 5. Библиогр. – 15 назв.

УДК 539.12

Кленицкий, Д. В. **Ограничения на геометрический размер кварк-глюонной плазмы в столкновениях тяжелых ионов высоких энергий** / Д. В. Кленицкий, В. Н. Чайчиц // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 46–48.

В работе изучаются ограничения на геометрический размер кварк-глюонной плазмы, которая может быть создана в экспериментах по столкновению тяжелых ионов высоких энергий на ускорителях AGS, SPS, RHIC и LHC. Размер плазмы зависит от размера адронной фазы, созданной в столкновении, и от энергии сталкивающихся ионов. Оценка размера кварк-глюонной плазмы показывает, что в экспериментах на ускорителях AGS и SPS следует учитывать эффекты, связанные с малым объемом этого состояния, на RHIC и LHC этим влиянием можно пренебречь.

Табл. 1. Библиогр. – 4 назв.

УДК 531.19; 539.382

Жаркевич, А. В. **Свободная энергия статистической модели плосконапряженного состояния тонких молекулярных пленок** / А. В. Жаркевич, И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтова // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. − 2008. − Вып. XVI. − С. 49–51.

Ранее была предложена двумерная статистическая модель деформированных тонких пленок с дефектами типа вакансий. Для однородного плосконапряженного состояния решетки составлена система двух интегральных уравнений для потенциалов средних сил, которая решена аналитически в приближении Гаусса. Потенциалы средних сил определяют младшие коррелятивные функции распределения частиц в окрестности узлов плоской деформированной решетки. Знание функций распределения необходимо для статистического расчета термодинамических потенциалов молекулярной системы. Благодаря этому появилась возможность получить аналитическое выражение для свободной энергии деформированных кристаллических молекулярных пленок с дефектами. Для этого использовано полученное ранее общее функциональное статистическое выражение для свободной энергии неоднородной многокомпонентной системы молекул. Для реализации данной возможности в соответствии с приближением Гаусса все потенциалы средних сил, входящие в функциональное выражение, раскладывались в ряды.

Библиогр. − 10 назв.

УДК 674.055:621.934(043.3)

Эффективность применения TiN-, ZrN-, Ti – Zr – N- и Ti-покрытий на твердосплавных резцах при обработке ламинированных древесно-стружечных плит концевыми фрезами / А. А. Гришкевич [и др.] // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 52–54.

Проведено исследование износа ионно-плазменных покрытий TiN, ZrN, Ti – Zr – N и Ti-ножей из твердого сплава концевых фрез при резании ламинированных ДСтП. Установлено повышение износостойкости резцов с покрытиями TiN и Ti – Zr – N до 15% при испытаниях в лабораторных условиях и увеличение ресурса работы концевых фрез в 1,8–2,0 раза с покрытиями TiN на твердосплавных режущих пластинах в промышленной эксплуатации. Исследован механизм износа резцов с сформированными покрытиями.

Табл. 1. Ил. 5. Библиогр. – 4 назв.

УДК 539.213.2

Мисевич, А. В. **Фотопроводимость наноструктурированных тонких пленок на основе периленовых пигментов** / А. В. Мисевич, И. П. Ильюшонок, А. Е. Почтенный // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 55–57.

Изучено явление фотопроводимости в двухкомпонентных тонкопленочных нанокомпозитных структурах: диангидрид перилентетракарбоновой кислоты – полистирол (PTCDA – PS) и N,N'-диметилдиимид перилентетракарбоновой кислоты – фталоцианин свинца (Me-PTCDI – PbPc). Полученные данные сопоставлены с результатами исследования поверхности этих пленок методом Кельвина в условиях фотовозбуждения, а также с результатами исследования оптических свойств и темновых электрофизических свойств. Исследование фотопроводимости пленок на основе PTCDA показало уменьшение относительного фотоотклика при снижении содержания PTCDA в композитной пленке ниже порога протекания. В пленках композита Me-PTCDI – PbPc фотопроводимость возбуждается светом с длинами волн, соответствующими области поглощения обеих компонент, что может быть связано как с фотовозбуждением бесконечного кластера поглощающей свет компоненты, так и с инжекцией носителей заряда из менее проводящей компоненты Me-PTCDI в более проводящую компоненту PbPc.

Табл. 1. Ил. 2. Библиогр. – 5 назв.

УДК 621.373.8

Рудик, К. И. **Световое тушение спонтанного и вынужденного излучения растворов сложных соединений** / К. И. Рудик // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. − 2008. − Вып. XVI. − С. 58–60.

В работе проведено всестороннее исследование энергетических и поляризационных характеристик спонтанного и вынужденного излучения при световом тушении. Показано, что явление тушения связано с вынужденными переходами возбужденных молекул на частоте тушащего излучения. Предложен метод определения коэффициента Эйнштейна B_{21} на краю спектра флуоресценции.

Ил. 4. Библиогр. − 4 назв.

УДК 537.633.2

Мадьяров, В. Р. **Влияние поверхностной рекомбинации на холловское поле в собственном полупроводнике** / В. Р. Мадьяров // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 61–63.

В статье приводятся результаты расчетов распределения концентрации неравновесного заряда и напряженности холловского поля с учетом поверхностной рекомбинации в кремнии с собственной проводимостью. Показывается, что при конечной скорости поверхностной рекомбинации образуется приповерхностная область накопления заряда, ширина которой сравнима с диффузионной длиной, а напряженность холловского поля заметно отличается от значения, определяемого по традиционной формуле. Уменьшение поля вследствие рекомбинации следует учитывать при разработке холловских датчиков малых размеров.

Ил. 4. Библиогр. − 5 назв.

УДК 535.373.2

Сапунов, В. В. **О механизме тушения триплетного состояния Mg-фталоцианина комплексами порфиринов с серебром, никелем и железом** / В. В. Сапунов // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 64–66.

Используя метод импульсного фотолиза, исследована кинетика тушения триплетного состояния Mg-фталоцианина комплексами порфиринов с Ag, Ni и Fe. Обнаружено, что дезактивация триплетного состояния Mg-фталоцианина происходит по неэкспоненциальному закону. Зависимости параметра дезактивации триплетного состояния, характеризующего такое затухание триплетного состояния, от концентрации молекул пигмента в триплетном состоянии или от времени были нелинейными. Эти зависимости объяснены на основе анализа механизма тушения триплетных состояний через образование возбужденных комплексов из взаимодействующих молекул. Используя компьютерное моделирование, определены константы скоростей процессов такого механизма.

Ил. 2. Библиогр. – 3 назв.

УДК 537

Ахраменко, Н. А. **О магнитном поле бесконечного соленоида** / Н. А. Ахраменко, Л. М. Булавко, В. Я. Матюшенко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 67–69.

Рассмотрены вопросы, касающиеся расчета индукции магнитного поля поверхностных токов бесконечного соленоида в курсе общей физики.

При использовании принципа суперпозиции, свойств симметрии и закона Био – Савара – Лапласа были установлены закономерности изменения индукции магнитного поля поверхностного тока при переходе через поверхность и обнаружена обособленная точка в области неаналитического поведения индукции магнитного поля, что позволило сформулировать граничные условия при переходе поверхностей тока, включая саму поверхность, а также определить давление, испытываемое поверхностью.

Ил. 2. Библиогр. – 9 назв.

УДК 539.376

Стеликов, Н. Е. **Применение кинетической теории ползучести при кручении твердых тел** / Н. Е. Стеликов // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. − 2008. − Вып. XVI. − С. 70–72.

Развита кинетическая теория ползучести в режиме кручения полимеров на основе моделирования изменения распределения касательных напряжений по сечению во времени. Показана эффективность применения модели, заключающаяся в приближении теоретических кривых ползучести к экспериментальным.

Ил. 2. Библиогр. − 5 назв.

УДК 537.534:539.23

Бобрович, О. Г. **Структура металлсодержащего (Mo, W) покрытия, осажденного на графит в условиях ионного ассистирования** / О. Г. Бобрович, И. С. Ташлыков // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 73–75.

В статье рассматривается элементный состав покрытия, распределение элементов в покрытии и их химические связи при формировании структуры покрытие – подложка в системах Mo – графит и W – графит, создаваемой нанесением многокомпонентного, металлсодержащего (Mo, W) покрытия в условиях ассистирования ионами Mo^+ и W^+ соответственно. Результаты анализа спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показали, что в системе Mo – графит молибден находится как в виде металлического молибдена, так и виде оксида MoO_2, а в системе W – графит анализ спектров дал возможность определить металлический вольфрам и оксиды вольфрама WO_2, WO_3.

Табл. 1. Ил. 3. Библиогр. − 7 назв.

УДК 539.1.06:539.23.234

Тульев, В. В. **Элементный состав и микротвердость структур Mo – W/Al, Ti – Mo – W/Al, сформированных последовательным осаждением покрытий** / В. В. Тульев // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. − 2008. − Вып. XVI. − С. 76–78.

На алюминий последовательно наносились покрытия на основе W, Mo и Ti методом ионно-ассистированного осаждения в условиях саморадиации. С помощью резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия в сочетании с компьютерным моделированием проводился послойный элементный анализ полученных структур. Установлено, что в сформированные структуры входят, кроме атомов основы покрытия, Me (5 ат. %), атомы кислорода (15–20 ат. %), углерода (60–70 ат. %) и атомы материала подложки железа (6–8 ат. %). Обсуждены причины, приводящие к формированию сложного композиционного состава и изменению микротвердости полученных структур.

Табл. 2. Ил. 3. Библиогр. − 10 назв.

УДК (539.26+539.533):669.71

Сивцова, П. А. **Структура и микротвердость быстрозатвердевшего сплава Al – 5,4 ат. % Mg – 0,4 ат. % Fe** / П. А. Сивцова, В. Г. Шепелевич // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 79–81.

В статье рассматриваются процессы, протекающие в быстрозатвердевшей фольге сплава Al – 5,4 ат. % Mg – 0,4 ат. % Fe. Методами рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии обнаружены выделения фазы Al_8Mg_5. Преимущественной текстурой фольги является текстура (111), сохраняющаяся в процессе отжига. Распад пересыщенного твердого раствора изучается методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа и измерениями микротвердости в процессе изохронного и изотермического отжига. Распад начинается в области 150–200ºС и характеризуется существенным ростом микротвердости. После длительного изотермического отжига микротвердость уменьшается, а выделения фазы Al_8Mg_5 мигрируют на границы зерен.

Ил. 5. Библиогр. − 9 назв.

УДК 004.021:004.942

Алданова, И. В. **Математическое описание динамики процесса поликонденсации** / И. В. Алданова, И. Ф. Кузьмицкий // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 82–86.

В данной работе подробно изучена динамика процесса поликонденсации с отводом этиленгликоля из реакционной массы. Определены основные параметры, влияющие на качество полимера, и характер их влияния. Составлена математическая модель процессов, протекающих в реакторе основной поликонденсации, с учетом принятых допущений и упрощений. Нелинейные дифференциальные уравнения первого порядка для определения скоростей изменения концентраций продуктов и температуры внутри реактора представляют собой

материальный и энергетический балансы системы. Данная математическая модель учитывает элементарные процессы, протекающие в реакторе, в том числе и концентрацию этиленгликоля, диэтиленгликоля и воды не только в расплаве, но и в паровой фазе. Сделано заключение о зависимости времени пребывания расплава от температуры внутри реактора.

Табл. 1. Библиогр. – 5 назв.

УДК 62-52621.923

Лялько, А. А. **Использование элементов нейро-нечетких систем для разработки гибкого технологического регламента деревообрабатывающих производств** / А. А. Лялько // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 87–90.

В данной статье рассматриваются два направления повышения производительности деревообрабатывающего оборудования: синтез адаптивного режима обработки древесины и сокращение вспомогательного времени в рабочем цикле путем оптимизации вспомогательных операций. В основе адаптивного режима обработки древесины лежит управление скоростью подачи инструмента в условиях неопределенности параметров системы станок – приспособление – инструмент – деталь. Для построения модели процесса резания древесины используется математический аппарат теории нечетких множеств. Для управления основным процессом – процессом резания – применяется гибридная технология адаптивной нейро-нечеткой системы заключений (ANFIS), обладающая, по сравнению с другими методами, высокой скоростью обучения, простотой алгоритма и оптимальной проработанностью программного обеспечения в системе математического моделирования Matlab. Также в статье рассматривается вопрос оптимизации вспомогательных операций на основе синтеза нечеткого управления при позиционировании в следящем режиме. Приводятся результаты моделирования разработанных алгоритмов в системе Matlab.

Ил. 4. Библиогр. – 4 назв.

УДК 674.093

Карпович, Д. С. **Исследование устойчивости круглых дереворежущих пил в статике** / Д. С. Карпович, С. С. Карпович // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 91–94.

Статья посвящена вопросам исследования устойчивости в статике круглых пил. Выявлены параметры, влияющие на величину ширины пропила, получаемого в результате воздействия круглой дисковой пилы на древесину. Получена аналитическая зависимость между величиной отклонения отдельных элементов пилы и параметрами инструмента: толщиной пилы, материалом корпуса инструмента, диаметром пилы. Проведен анализ взаимного влияния величин отклонения точек, составляющих зубчатый венец инструмента. Предложена методика оценки деформативности круглых деревообрабатывающих пил.

Табл. 1. Ил. 7. Библиогр. – 5 назв.

УДК 66.011-52

Байда, Ю. А. **Анализ резиносмесителя как объекта управления** / Ю. А. Байда // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 95–98.

В статье рассмотрены методы управления резиносмесителем. Показаны основные параметры процесса, описана взаимосвязь между ними в общем виде. Выявлены параметры, доступные измерению, и параметры, доступные регулированию. Предложены структуры наблюдателей важных параметров процесса, недоступных измерению. Проанализированы возможные каналы и уровни системы управления. Предложены критерии и ограничения системы управления. Синтезирована структура системы управления в общем виде. Представлена система постепенной адаптации.

Ил. 1. Библиогр. – 6 назв.

УДК 621.317

Анкуда, М. А. **Анализ работы меточного однокатушечного ЯМР-измерителя расхода жидкостей** / М. А. Анкуда // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 99–102.

В статье рассмотрен способ измерения расхода проточных водородсодержащих жидкостей методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Уделено внимание особенностям метода, возможности определения расхода жидких органических веществ, в частности продуктов нефтепереработки. Представлена структурная схема однокатушечного меточного ЯМР-измерителя расхода. Приведены временные диаграммы работы расходомера с временным разделением процесса отметки и регистрации. Дана электрическая принципиальная схема автодинного спинового детектора как наиболее приемлемого из возможных устройств регистрации сигнала ЯМР.

Ил. 3. Библиогр. – 3 назв.

УДК 621.391.26

Адаптивный фильтр с использованием критерия серий / И. О. Оробей [и др.] // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 103–107.

Статья посвящена вопросам построения адаптивного фильтра скользящего среднего, который позволяет осуществлять подстройку под текущий тренд без существенного увеличения требований к вычислительной

мощности его реализующей. Фильтр основан на использовании известного критерия серий оценки стационарности трендов. Предложенный алгоритм может быть применен в измерительной технике для обработки информативных сигналов, в системах идентификации неизвестных устройств и системах адаптивного управления технологическими процессами, в шумоподавителях, эквалайзерах и подавителях сигнала эхо, в детекторах модулированных сигналов для систем телеметрии и т. д.

Ил. 3. Библиогр. – 10 назв.

УДК 663.52-007.5

Ульянов, Н. И. **Синтез адаптивной системы управления процессом брагоректификации** / Н. И. Ульянов, И. Ф. Кузьмицкий // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 108–112.

Статья посвящена синтезу адаптивной системы управления нестационарными объектами с запаздыванием. Проведен синтез адаптивных систем автоматического управления качеством продукта и экономии энергоресурсов и производительности с помощью второго метода Ляпунова. Объект управления имеет существенное транспортное запаздывание и переменный коэффициент передачи. Для управления подобными объектами наиболее эффективными являются системы, содержащие линейный упредитель Смита и обеспечивающие перестройку управляющего устройства при изменениях коэффициента передачи объекта. Полученный алгоритм адаптации физически реализуем. Приведен пример применения данного алгоритма для объекта управления, описываемого уравнением второго порядка.

Ил. 3. Библиогр. – 3 назв.

УДК 681.3:665.6

Идентификация динамических характеристик процесса ректификации нефти / И. Ф. Кузьмицкий [и др.] // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 113–115.

С учетом производственных целей ведения процесса в ректификационной колонне К-102 выбраны входные, управляющие и выходные параметры. Рассмотрены методы идентификации динамических характеристик процесса ректификации нефти. Разработаны и составлены программы по определению параметров для некоторых классов математических моделей нелинейных объектов методами корреляционного анализа, через интеграл свертки и при помощи рядов Вольтерра при линейной форме записи и с учетом квадратичных членов, а также проведено их сравнение. Представлено выражение для расчетов других каналов управления.

Ил. 1. Библиогр. – 1 назв.

УДК 658.012.011.56

Якимов, А. И. **Об исследовании длительности переходного процесса в имитационной модели производственной деятельности промышленного предприятия** / А. И. Якимов // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 116–120.

Представлена структура программно-технологического комплекса имитации сложных систем BelSim с базовой имитационной моделью промышленного предприятия (БИМПП). БИМПП включает процессы снабжения, организации производства, сбыта продукции и управления финансами предприятия. Определен перечень задач, решаемых с применением БИМПП, и описаны особенности исследования ее характеристик. Разработана автоматизированная технология оценки длительности переходного процесса в имитационной модели с трендом отклика в стационарном режиме.

Ил. 3. Библиогр. – 11 назв.

УДК 504.064.36

Бракович, А. И. **Математическая модель размещения датчиков контроля атмосферного воздуха на основе решения задачи о раскраске графа** / А. И. Бракович // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 121–124.

Предлагается математическая модель размещения датчиков контроля за состоянием атмосферного воздуха на основе решения NP-трудной задачи о раскраске графа, отличающаяся от аналогов тем, что скорость расчетов по разработанной модели примерно в 2 раза выше. Модель может работать с картами размером до 100×100 ячеек, в то время как аналоги – с картами до 50×50 ячеек. Модель отличается наличием дополнительных ограничений на размещение датчиков внутри кластера для предотвращения группировки датчиков в одном месте на карте-схеме, тогда как в моделях-аналогах датчики внутри кластера располагаются случайным образом.

Табл. 8. Библиогр. – 3 назв.

УДК 519.6

Жиляк, Н. А. **Логико-комбинаторный подход к выбору оптимальных структур сложных технических систем** / Н. А. Жиляк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 125–128.

В статье рассматривается унификация базового алгоритма синтеза вычислительных структур реального времени, который предполагает многократное выполнение значительного числа его блоков, так как выбор оптимальной структуры из множества работоспособных вариантов в соответствии с данным алгоритмом осуществляется на заключительном этапе реализации алгоритма. При этом объем памяти, требуемой для

хранения информации об альтернативных вариантах, и трудоемкость алгоритма пропорциональны числу этих вариантов, которое представляет NP-полный перебор всех комбинаций функциональных устройств, удовлетворяющих требованиям реализации вычислительного процесса в реальном времени.

Таким образом, одной из центральных задач, решаемых при проектировании сложных технических объектов, к которым относятся системы реального времени, является поиск снижения трудоемкости проектирования. Для решения данной задачи предлагается метод, основанный на логико-комбинаторном подходе к выбору оптимальных структур из множества правильных вариантов.

Ил. 2. Библиогр. – 4 назв.

УДК 519.6

Акунович, С. И. **Базовый алгоритм синтеза вычислительных структур реального времени для теплоэнергетических измерений** / С. И. Акунович, Н. А. Жиляк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 129–132.

В статье идет речь о внедрении унифицированного базового алгоритма синтеза вычислительных структур реального времени в прибор – безбумажный самописец-регистратор РМ-2201 – электронный самописец, который предназначен для измерения по 6, 9, 12 или 15-ти гальванически изолированным каналам силы и напряжения постоянного тока, а также неэлектрических величин, преобразованных в электрические сигналы постоянного тока, и сопротивления постоянному току, для обработки результатов измерений, их визуализации, сбора, хранения и сигнализации аварийных ситуаций.

Одно из основных и наукоемких звеньев рассматриваемого прибора – это разработка программно-аппаратного комплекса прибора. Программная часть регистратора РМ-2201 включает в себя один из алгоритмов, позволяющих реализовать наиболее оптимальное распределение машинных ресурсов. В свою очередь программное обеспечение, созданное на основе предложенного алгоритма, обеспечивает обработку и преобразование термоЭДС в температуру, что ускоряет процесс производства и освобождает другие не менее важные машинные ресурсы прибора.

Библиогр. – 4 назв.

УДК 681.325.3

Шиман, Д. В. **Компьютерная имитационная модель передачи информации на основе перемежителя и двумерного линейного итеративного кода с объединенными двойными диагональными проверками** / Д. В. Шиман // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 133–136.

В статье описывается компьютерная имитационная модель передачи информации на основе перемежителя и двумерного линейного итеративного кода с объединенными двойными диагональными проверками. Такое комплексное преобразование информации позволяет корректировать многократные ошибки при меньших затратах времени и простоте алгоритма коррекции. В модели реализована возможность управления пропускной способностью канала, вероятностными характеристиками ошибок, возникающих при передачи данных, а также определения количества неисправленных ошибочных бит после декодирования.

Ил. 3. Библиогр. – 6 назв.

УДК 681.324

Карчмарски, Д. **Методы и алгоритмы моделирования систем криптопреобразования информации на основе нейросетевых технологий** / Д. Карчмарски, М. Плонковски, Е. В. Лисица // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 137–140.

Статья содержит описание нового протокола обмена ключом на основе нейронных технологий. Рассмотрен процесс сходимости точек и методы улучшения этой системы. Было проведено сравнение эффективности геометрической атаки при использовании архитектур ТРМ и ТРСМ. Проанализирована надежность этого протокола при использовании различного типа архитектур искусственных нейронных сетей (ТРМ и ТРСМ), рассмотрены методы повышения уровня безопасности протокола. Для экспериментального изучения нейросетевого протокола было разработано программное средство, позволяющее оценить его быстродействие, надежность и безопасность при различных параметрах (правилах «обучения», количестве персептронов K, количестве входов N, синаптической глубине весовых коэффициентов).

Табл. 2. Ил. 4. Библиогр. – 2 назв.

УДК 004.4′2

Кабак, Е. В. **Информационная модель организации учебного контента системы автоматизированного создания и модификации компьютерных средств обучения** / Е. В. Кабак // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 141–144.

Статья посвящена информационной модели организации учебного контента, реализованной в рамках системы автоматизированного проектирования и модификации компьютерных средств обучения «Сфера». Выбранная информационная модель представляет собой дополнение модели, предложенной международным стандартом SCORM. Стандарт SCORM – основной стандарт в области проектирования и организации образовательного контента, модель, определяющая и стандартизирующая содержание и классификации, виды хранения и представления содержания в электронном образовании. Особое внимание в статье уделено вопросам

проектирования структуры учебного курса и ее использования для формирования, так называемого, дерева деятельности. Дерево деятельности – сложная иерархическая структура. Данные, хранимые в вершинах дерева, позволяют системе управления обучением (LMS) организовывать и контролировать учебный процесс.

Ил. 2. Библиогр. – 10 назв.

УДК 519.872

Зирко, О. Ф. **BMAP-модели систем массового обслуживания с ограниченным пространством при комплексном представлении требований** / О. Ф. Зирко, А. С. Кобайло // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 145–148.

Представление требования в системах массового обслуживания (СМО) в виде сложного объекта с описанием его характеристик комплексным числом резко расширяет область применения теории массового обслуживания при описании реальных процессов. Наибольшую популярность приобрели СМО типа BMAP, которые предусматривают управление требованиями посредством управляющего процесса. В работе рассмотрены вопросы использования комплексных компонент, обоснована и представлена методика расчета характеристик СМО типа BMAP с комплексным показателем требования, а также выявлена комплексная природа других показателей таких СМО, в частности вероятности реализации требования.

Библиогр. – 2 назв.

УДК 519.872

Кудрявцев, В. И. **Модель системы массового обслуживания с высокой адаптивностью** / В. И. Кудрявцев, О. Ф. Зирко // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 149–152.

Насущной проблемой применения систем массового обслуживания (СМО) является обеспечение возможности поддержания требуемой адекватности модели СМО отображаемому процессу при изменении процесса или требований к его отображению. В данной статье показано, что дополнительная гибкость моделирования СМО, определяющая ее адаптивность к применяемым характеристикам реальности, приобретается посредством усложнения показателей СМО на разных уровнях ее реализации, в частности благодаря отображению их в комплексной форме. В ходе исследования выяснено, что все показатели СМО могут иметь комплексную форму представления, которая в каждом из этих случаев повышает адаптивность СМО.

Библиогр. – 4 назв.

УДК 681.3.07

Урбанович, П. П. **Интеллектуальные базы данных в системах поддержки принятия решений** / П. П. Урбанович, Р. Х. Хтажа, М. Беднарчик // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 153–156.

В статье рассмотрены и проанализированы тенденции развития информационных систем хранения, обработки и использования больших массивов слабо структурированных данных. Отмечено, что наиболее перспективным является направление разработки и использования интеллектуальных БД, т. е. информационных систем, позволяющих формировать управленческие и менеджерские решения для различных практических приложений. Рассмотрены направления и методы интеграции систем оперативной аналитической обработки и интеллектуального анализа данных, структура и инструментальные средства таких интегрированных систем.

Ил. 3. Библиогр. – 4 назв.

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Марченко В. М., Пыжкова О. Н. Относительная управляемость линейных стационарных гибридных систем с многомерным временем 3

Марченко В. М., Зачкевич З. О слабой наблюдаемости малых решений дифференциально-алгебраических систем с запаздыванием 6

Копейкина Т. Б., Гусейнова А. С. Управляемость стационарных сингулярно возмущенных систем с запаздыванием 9

Можей Н. П. Орбитальные разложения групп аффинных и проективных преобразований .. 15

Соловьева И. Ф. О методах решения задачи Троеша 18

МЕХАНИКА

Аргиракис П., Вихренко В. С., Грода Я. Г. Влияние геометрии решетки на диффузионные свойства решеточного газа на плоских статически неупорядоченных решетках 21

Аргиракис П., Грода Я. Г. Диффузия ленгмюровского решеточного газа на неупорядоченной решетке при экспоненциальном распределении высот барьеров 25

Белов В. В. Замкнутые уравнения в статистической механике жидкости 29

Камлюк А. Н., Борисевич С. А. Анализ упаковывающей нагрузки при навивке ДНК на гистоны 32

Бокун Г. С., Ласовский Р. Н., Вихренко В. С. Кинетика структурных превращений в решеточной системе 35

Ласовский Р. Н., Бокун Г. С. Эволюция межфазной границы решеточной системы в приближениях среднего поля и квазихимическом приближении 39

Гапанюк Д. В. Анализ результатов моделирования диффузии в двухкомпонентных системах на основе аналитических соотношений 42

ФИЗИКА

Кленицкий Д. В., Чайчиц В. Н. Ограничения на геометрический размер кварк-глюонной плазмы в столкновениях тяжелых ионов высоких энергий 46

Жаркевич А. В., Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В. Свободная энергия статистической модели плосконапряженного состояния тонких молекулярных пленок 49

Гришкевич А. А., Чаевский В. В., Углов В. В., Кулешов А. К. Эффективность применения TiN-, ZrN-, Ti – Zr – N- и Ti-покрытий на твердосплавных резцах при обработке ламинированных древесно-стружечных плит концевыми фрезами 52

Мисевич А. В., Ильюшонок И. П., Почтенный А. Е. Фотопроводимость наноструктурированных тонких пленок на основе периленовых пигментов 55

Рудик К. И. Световое тушение спонтанного и вынужденного излучения растворов сложных соединений 58

Мадьяров В. Р. Влияние поверхностной рекомбинации на холловское поле в собственном полупроводнике 61

Сапунов В. В. О механизме тушения триплетного состояния Mg-фталоцианина комплексами порфиринов с серебром, никелем и железом 64

Ахраменко Н. А., Булавко Л. М., Матюшенко В. Я. О магнитном поле бесконечного соленоида 67

Стеликов Н. Е. Применение кинетической теории ползучести при кручении твердых тел .. 70

Бобрович О. Г., Ташлыков И. С. Структура металлсодержащего (Mo, W) покрытия, осажденного на графит в условиях ионного ассистирования 73

Тульев В. В. Элементный состав и микротвердость структур Mo – W/Al, Ti – Mo – W/Al, сформированных последовательным осаждением покрытий 76

Сивцова П. А., Шепелевич В. Г. Структура и микротвердость быстрозатвердевшего сплава Al – 5,4 ат. % Mg – 0,4 ат. % Fe 79

ОБЩЕТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ И ИНФОРМАТИКА

Алданова И. В., Кузьмицкий И. Ф. Математическое описание динамики процесса поликонденсации 82

Лялько А. А. Использование элементов нейро-нечетких систем для разработки гибкого технологического регламента деревообрабатывающих производств 87

Карпович Д. С., Карпович С. С. Исследование устойчивости круглых дереворежущих пил в статике 91

Байда Ю. А. Анализ резиносмесителя как объекта управления 95

Анкуда М. А. Анализ работы меточного однокатушечного ЯМР-измерителя расхода жидкостей 99

Оробей И. О., Гринюк Д. А., Жарский С. Е., Анкуда М. А., Сухорукова И. Г. Адаптивный фильтр с использованием критерия серий 103

Ульянов Н. И., Кузьмицкий И. Ф. Синтез адаптивной системы управления процессом брагоректификации 108

Кузьмицкий И. Ф., Лихавицкий В. В., Чжай Лэй, Го Лицзе. Идентификация динамических характеристик процесса ректификации нефти 113

Якимов А. И. Об исследовании длительности переходного процесса в имитационной модели производственной деятельности промышленного предприятия 116

Бракович А. И. Математическая модель размещения датчиков контроля атмосферного воздуха на основе решения задачи о раскраске графа 121

Жиляк Н. А. Логико-комбинаторный подход к выбору оптимальных структур сложных технических систем 125

Акунович С. И., Жиляк Н. А. Базовый алгоритм синтеза вычислительных структур реального времени для теплоэнергетических измерений 129

Шиман Д. В. Компьютерная имитационная модель передачи информации на основе перемежителя и двумерного линейного итеративного кода с объединенными двойными диагональными проверками 133

Карчмарски Д., Плонковски М., Лисица Е. В. Методы и алгоритмы моделирования систем криптопреобразования информации на основе нейросетевых технологий 137

Кабак Е. В. Информационная модель организации учебного контента системы автоматизированного создания и модификации компьютерных средств обучения 141

Зирко О. Ф., Кобайло А. С. BMAP-модели систем массового обслуживания с ограниченным пространством при комплексном представлении требований 145

Кудрявцев В. И., Зирко О. Ф. Модель системы массового обслуживания с высокой адаптивностью 149

Урбанович П. П., Хтажа Р.-Х., Беднарчик М. Интеллектуальные базы данных в системах поддержки принятия решений 153

Научное издание

Труды Белорусского государственного
технологического университета

Серия II

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ И ИНФОРМАТИКА

Выпуск XVI

Редактор *Р. М. Рябая*
Компьютерная верстка *О. Ю. Шантарович*

Подписано в печать 23.09.2008. Формат $60\times84^{1}/_{8}$.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 43,7. Уч.-изд. л. 48,5.
Тираж 80 экз. Заказ .

Учреждение образования
«Белорусский государственный технологический университет».
220006. Минск, Свердлова, 13а.
Свидетельство № 1995 от 27.02.2003.
ЛИ № 02330/0133255 от 30.04.2004.

Отпечатано в лаборатории полиграфии учреждения образования
«Белорусский государственный технологический университет».
220006. Минск, Свердлова, 13.
ЛП № 02330/0056739 от 22.01.2004.

Индекс 00804

ISSN 1683-0377. Труды БГТУ. 2008. Серия VI. Вып. XVI. 1–168.