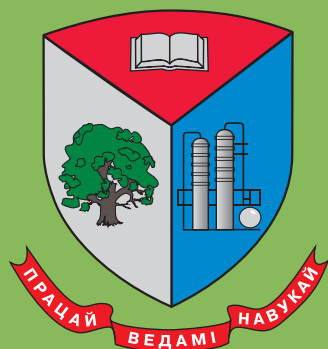


ISSN 2520-6141



ТРУДЫ БГТУ

Научный журнал

Серия 3

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

№ 1 (194) 2017 год

Рубрики номера:

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Математика

Механика

Физика

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Моделирование процессов
и управление в технических системах

Системный анализ и обучающие системы

Алгоритмизация и программирование

Минск 2017

Учреждение образования
«Белорусский государственный
технологический университет»

ТРУДЫ БГТУ

Научный журнал

Издается с июля 1993 года

Серия 3

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

№ 1 (194) 2017 год

Выходит два раза в год

Минск 2017

Учредитель – учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет»

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

Редакционная коллегия журнала:

Дормешкин О. Б., доктор технических наук, доцент (заместитель главного редактора), Республика Беларусь;
Жарский И. М., кандидат химических наук, профессор (заместитель главного редактора), Республика Беларусь;
Кунтыш В. Б., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Прокопчук Н. Р., член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор, Республика Беларусь;
Водопьянов П. А., член-корреспондент НАН Беларуси, доктор философских наук, профессор, Республика Беларусь;
Неверов А. В., доктор экономических наук, профессор, Республика Беларусь;
Кулак М. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Наркевич И. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Торчик В. И., доктор биологических наук, Республика Беларусь;
Захарук Т., доктор педагогических наук, профессор, Республика Польша;
Пайвинен Ристо, доктор наук, профессор, Финляндская Республика;
Барчик Стэфан, доктор наук, профессор, Словацкая Республика;
Жантасов К. Т., доктор технических наук, профессор, Республика Казахстан;
Харша Ратнавир, доктор наук, профессор, Королевство Норвегия;
Рангелова Е. М., доктор педагогических наук, профессор, Республика Болгария;
Шкляр Бенцион, профессор, Государство Израиль;
Хассель Л. Г., доктор наук, профессор, Королевство Швеция;
Файгле В., доктор наук, профессор, Федеративная Республика Германия;
Флорик Е. А., кандидат биологических наук, доцент (секретарь), Республика Беларусь.

Редакционная коллегия серии:

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

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

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

главного редактора серии – (+375 17) 399-49-60.

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

Свидетельство о государственной регистрации средств массовой информации

№ 1329 от 23.04.2010, выданное Министерством информации Республики Беларусь.

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

Educational institution
“Belarusian State Technological University”

PROCEEDINGS OF BSTU

Scientific Journal

Published monthly since July 1993

Issue 3

**PHYSICS
AND MATHEMATICS.
INFORMATICS**

No. 1 (194) 2017

Published biannually

Minsk 2017

Publisher – educational institution “Belarusian State Technological University”

Editor-in-chief – Voitau Ihar Vital’evich, DSc (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus

Editorial (Journal):

Dormeshkin O. B., DSc (Engineering), Associate Professor (deputy editor-in-chief), Republic of Belarus;

Zharskiy I. M., PhD (Chemistry), Professor (deputy editor-in-chief), Republic of Belarus;

Kuntyshev V. B., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;

Prokopchuk N. R., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, DSc (Chemistry), Professor, Republic of Belarus;

Vodop’yanov P. A., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, DSc (Philosophy), Professor, Republic of Belarus;

Neverov A. V., DSc (Economics), Professor, Republic of Belarus;

Kulak M. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;

Narkevich I. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;

Torchik V. I., DSc (Biology), Republic of Belarus;

Zacharuk T., DSc (Pedagogics), Professor, Republic of Poland;

Paivinen Risto, DSc, Professor, Republic of Finland;

Barčík Štefan, DSc, Professor, Slovak Republic;

Zhantasov K. T., DSc (Engineering), Professor, Republic of Kazakhstan;

Harsha Ratnaweera, DSc, Professor, Kingdom of Norway;

Rangelova E. M., DSc (Pedagogics), Professor, Republic of Bulgaria;

Shklyar Benzion, Professor, State of Israel;

Hassel L. G., DSc, Professor, Kingdom of Sweden;

Faigle W., DSc, Professor, Federal Republic of Germany;

Flyurik E. A., PhD (Biology), Associate Professor (secretary), Republic of Belarus.

Editorial (Issue):

Narkevich I. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor (managing editor), Republic of Belarus;

Urbanovich P. P., DSc (Engineering), Professor (sub-editor), Republic of Belarus;

Vikhrenko V. S., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;

Kolesnikov V. L., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;

Kalinin A. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;

Sayko A. P., DSc (Physics and Mathematics), Republic of Belarus;

Kvasov N. T., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;

Minchenko L. I., DSc (Physics and Mathematics), Republic of Belarus;

Radyno Ya. V., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;

Shchekin A. K., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Russian Federation;

Bartosevich Zbigniew, DSc, Republic of Poland;

Shklyar Benzion, Professor, State of Israel;

Argyarakis Panos, DSc, Professor, Greece;

Orlukas Antanas Feliksas, DSc, Republic of Lithuania;

Solov’eva I. F., PhD (Physics and Mathematics) (executive editor), Republic of Belarus;

Kobaylo A. S., PhD (Engineering), Associate Professor (secretary), Republic of Belarus.

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

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

managing editor (+375 17) 399-49-60.

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

УДК 517.977

В. В. Игнатенко¹, В. В. Крахотко², Г. П. Размыслович²

¹Белорусский государственный технологический университет

²Белорусский государственный университет

К УПРАВЛЯЕМОСТИ ЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ ДЕСКРИПТОРНЫМИ РЕГУЛЯТОРАМИ

В статье рассматривается задача управляемости линейной динамической системы. При исследовании управляемости в классическом виде (по Калману) управление выбирается из класса кусочно-непрерывных функций. В работе в качестве управления изучается выход другой линейной системы, так называемого динамического регулятора. При таком управлении достаточно выбирать только начальные условия динамического регулятора, а дальнейшее управление будет строиться автоматически. Особенностью динамического регулятора, рассматриваемого в статье, является то, что он представляет собой дескрипторную систему, т. е. систему дифференциально-алгебраических уравнений. Получены критерии управляемости линейной системы дескрипторным динамическим регулятором, который выражается через параметры исходной системы и динамического регулятора, что удобно при технической реализации.

Ключевые слова: линейные системы, линейные дескрипторные системы, управляемость, динамические регуляторы.

V. V. Ignatenko¹, V. V. Krakhotko², G. P. Razmyslovich²

¹Belarusian State Technological University

²Belarusian State University

TO THE CONTROLLABILITY OF LINEAR SYSTEMS WITH REGULATORS DESCRIPTOR

The article considers the problem of controllability of linear dynamical systems. In the study of controllability by Kalman control is selected from the class of piecewise continuous functions. To work as management deals with the output of another linear system, the so-called dynamic control. Under such control, it is sufficient to choose only the initial conditions of the dynamic controller, and further management will be built automatically. The feature of the dynamic controller considered in the article is that it is a descriptor system, i.e. the system of differential-algebraic equations. Criteria are obtained for the controllability of linear descriptor systems by the dynamic regulator that is expressed through the parameters of the original system and the dynamic controller, which is convenient for technical implementation.

Key words: linear systems, linear descriptor system, controllability, dynamical regulator.

Введение. В теории оптимального управления важную роль играет задача получения параметрических критериев управляемости. В классическом определении управляемости (по Калману) входной сигнал выбирается из класса кусочно-непрерывных функций. Представляет интерес возможность управления системой с помощью функций из более узкого класса, который легко технически реализуем.

Основная часть. Рассмотрим систему управления

$$\dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = x_0, \quad (1)$$

где x – n -вектор состояния; A – $n \times n$ -матрица; b , x_0 – заданные n -векторы; u – скалярное управление.

Определение 1. Система (1) называется управляемой, если для любого начального состояния x_0

найдутся момент времени t_1 , $0 < t_1 < +\infty$ и кусочно-непрерывное управление $u(t)$, $0 \leq t \leq t_1$ такие, что состояние системы (1), соответствующее этому управлению, удовлетворяет условию $x(t_1) = 0$.

Известно, что для управляемости системы (1) необходимо и достаточно, чтобы

$$\text{rank}(b, Ab, \dots, A^{n-1}b) = n. \quad (2)$$

В качестве управления $u(t)$ будем рассматривать выход

$$u(t) = c^T y(t) \quad (3)$$

линейной дескрипторной системы

$$D_0 \dot{y}(t) = Dy(t), y(t_0) = y_0 \quad (4)$$

(здесь $c, y, y_0 \in R^n$, D, D_0 – $n \times n$ -матрицы, $\det D_0 = 0$), которую назовем дескрипторным динамическим регулятором или просто динамическим регулятором.

Определение 2. Система (1) называется управляемой динамическим регулятором (4), если найдется момент времени t_1 , $0 < t_1 < +\infty$ такой, что для любого начального состояния x_0 найдется начальное состояние y_0 регулятора (4), при котором решение системы (1), соответствующее управлению (3), удовлетворяет условию $x(t_1) = 0$.

Считаем в дальнейшем, что система (4) является регулярной, т. е. найдется число $\lambda_0 \in C$ такое, что $\det(\lambda_0 D_0 - D) \neq 0$, и, кроме того, матрицы D_0 и D удовлетворяют условию $D_0 D = D D_0$. Последнее условие не является ограничением для регулярной системы (4), ибо это условие выполняется [1] после умножения системы (4) на матрицу $(\lambda_0 D_0 - D)^{-1}$.

Запишем решение системы (1) с учетом (3), (4). Имеем:

$$x(t) = e^{At} x_0 + \left(\int_0^t e^{A(t-\tau)} b c^T e^{(D_0^d D)^{\tau}} d\tau \right) y_0, \quad (5)$$

$$y_0 = D_0^d D_0 q, \quad (6)$$

где $q \in R^n$, а D_0^d – обратная Дразина для матрицы D_0 [1].

Исходя из (5), (6) нетрудно видеть, что система (1) управляема динамическим регулятором (4) тогда и только тогда, когда при некотором $t_1 > 0$ для любого n -вектора x_0 найдется n -вектор q , такой, что выполняется равенство:

$$-x_0 = \left(\int_0^{t_1} e^{-A\tau} b c^T e^{(D_0^d D)^{\tau}} D_0 D_0^d d\tau \right) q. \quad (7)$$

Из соотношения (7) получаем неявный критерий управляемости системы (1) регулятором (4).

Теорема 1. Система (1) управляема динамическим регулятором (4) тогда и только тогда, когда соблюдается равенство:

$$\text{rank} \left(\int_0^{t_1} e^{-A\tau} b c^T e^{(D_0^d D)^{\tau}} D_0 D_0^d d\tau \right) = n. \quad (8)$$

Укажем более удобный критерий управляемости.

Теорема 2. Для управляемости системы (1) динамическим регулятором (4) необходимо и достаточно, чтобы выполнялись следующие равенства:

$$\text{rank}[b, Ab, \dots, A^{n-1}b] = n, \quad (9)$$

$$\text{rank}[c^T D_0^d D_0, c^T D_0^d K D_0, \dots, c^T D_0^d K^{n-1} D_0] = n, \quad (10)$$

где $K = D D_0^d$.

Доказательство. Необходимость. Рассмотрим матричную функцию:

$$\Phi(t) = \int_0^t e^{-A\tau} b c^T e^{(D_0^d D)^{\tau}} D_0 D_0^d d\tau, t \geq 0.$$

Поскольку

$$e^{-A\tau} b = \sum_{\nu=0}^{n-1} \alpha_{\nu}(\tau) A^{\nu} b,$$

$$c^T e^{(D_0^d D)^{\tau}} D_0 D_0^d = \sum_{\mu=0}^{n-1} \gamma_{\mu}(\tau) c^T (D_0^d D)^{\mu} D_0 D_0^d,$$

где $\alpha_{\nu}(\tau)$, $\gamma_{\mu}(\tau)$ – некоторые аналитические функции, то функцию $\Phi(t)$ можно представить в виде

$$\Phi(t) = [b, Ab, \dots, A^{n-1}b] \Phi_1 \times \begin{bmatrix} c^T D_0^d D_0 \\ c^T D_0^d K D_0 \\ \vdots \\ c^T D_0^d K^{n-1} D_0 \end{bmatrix}, \quad (11)$$

$$\text{где } \Phi_1 = \begin{bmatrix} \int_0^t \alpha_0(\tau) \gamma_0(\tau) d\tau & \dots & \int_0^t \alpha_0(\tau) \gamma_0(\tau) d\tau \\ \dots & \dots & \dots \\ \int_0^t \alpha_0(\tau) \gamma_0(\tau) d\tau & \dots & \int_0^t \alpha_0(\tau) \gamma_0(\tau) d\tau \end{bmatrix}.$$

Поскольку система (1) управляема динамическим регулятором (4), то на основании равенства (8) $\text{rank } \Phi(t_1) = n$ для некоторого момента $t_1 < +\infty$. В силу неравенства Сильвестра [2] из (11) следуют равенства (9), (10).

Достаточность. Пусть выполняются соотношения (9), (10). Представим матрицу $\Phi(t)$ в виде

$$\Phi(t) = [b, Ab, \dots, A^{n-1}b]R(t), t \geq 0, \quad (12)$$

где $R(t)$ – $n \times n$ -матрица вида

$$R(t) = \int_0^t \alpha_v(\tau) c^T e^{(D_0^d D)\tau} D_0 D_0^d d\tau = \overline{0, n-1}.$$

Рассмотрим определитель $\Delta(t) = \det R(t)$ и его производную порядка n^2 в точке $t = 0$. Согласно [3], с учетом (10) получаем, что $\Delta^{(n)}(t) \neq 0$. Из аналитичности функции $\Delta(t)$ следует, что функция $\Delta(t)$ может обращаться

в нуль лишь в изолированных точках полуинтервала $[0, +\infty)$.

Но тогда с учетом (9), (12) равенство (8) выполняется для почти всех $t_1 > 0$, а это значит, что система (1) управляема динамическим регулятором (4). Теорема доказана.

Заключение. При управлении с помощью динамического регулятора достаточно задать только начальное состояние регулятора, а не строить управление на всем интервале. Получены критерии управляемости линейной системы дескрипторными регуляторами, записанные в явном виде через параметры систем.

Литература

1. Campbell S. L., Meyer C. D., Rose N. J. Applications of the Drazin inverse to Linear systems of Differential equations with Singular constant Coefficients // *SIAM J. Appl. Math.* 1976. Vol. 31, no. 3. P. 411–425.

2. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М.: Наука, 1988. 552 с.

3. Игнатенко В. В. Управляемость динамических систем с помощью регулятора // *Вестник БГУ.* 1976. Сер. 1. С. 56–58.

References

1. Campbell S. L., Meyer C. D., Rose N. J. Applications of the Drazin inverse to Linear systems of Differential equations with Singular constant Coefficients. *SIAM J. Appl. Math.*, 1976, vol. 31, no. 3, pp. 411–425.

2. Gantmakher F. R. *Teoriya matrits* [Theory of matrices]. Moscow, Nauka Publ., 1988. 552 p.

3. Ignatenko V. V. The controllability of dynamical systems with a controller. *Vestnik BGU* [Proceedings of BSU], 1976, series 1, pp. 56–58 (In Russian).

Информация об авторах

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

Крахотко Валерий Васильевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры методов оптимального управления. Белорусский государственный университет (220030, г. Минск, пр-т Независимости, 4, Республика Беларусь). E-mail: Krakhotko@bsu.by

Размыслович Георгий Прокофьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры высшей математики. Белорусский государственный университет (220030, г. Минск, пр-т Независимости, 4, Республика Беларусь). E-mail: razmysl@bsu.by

Information about the authors

Ignatenko Vasilii Vasil'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics, Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: ihnatzenko@tut.by

Krakhotko Valeriy Vasil'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Optimal Control Methods, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Krakhotko@bsu.by

Razmyslovich Georgiy Prokof'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: razmysl@bsu.by

Поступила 12.12.2016

УДК 514.765.12

Н. П. Можей

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

КАНОНИЧЕСКИЕ СВЯЗНОСТИ НА ТРЕХМЕРНЫХ СИММЕТРИЧЕСКИХ ПРОСТРАНСТВАХ РАЗРЕШИМЫХ ГРУПП ЛИ

Цель работы – классификация трехмерных симметрических однородных пространств, допускающих нормальную связность, описание всех инвариантных аффинных связностей на таких пространствах вместе с их тензорами кривизны и кручения, канонических связностей и естественных связностей без кручения. Также исследованы алгебры голономии однородных пространств и найдено, когда связность нормальна. Рассмотрены пространства, на которых действует разрешимая группа преобразований. Локальная классификация однородных пространств эквивалентна описанию эффективных пар алгебр Ли. Исследования основаны на использовании свойств алгебр Ли, групп Ли и однородных пространств и носят главным образом локальный характер. Особенностью методов, представленных в работе, является применение чисто алгебраического подхода, а также сочетание различных методов дифференциальной геометрии, теории групп и алгебр Ли и теории однородных пространств.

Ключевые слова: каноническая связность, группа преобразований, симметрическое пространство, алгебра голономии.

N. P. Mozhey

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

CANONICAL CONNECTIONS ON THREE-DIMENSIONAL SYMMETRIC SPACES SOLVABLE LIE GROUPS

The purpose of the work is the classification of three-dimensional symmetric homogeneous spaces, admitting a normal connection, description of all invariant affine connections on those spaces together with their curvature and torsion tensors, canonical connections and natural torsion-free connections. We study the holonomy algebras of homogeneous spaces and find out when the invariant connection is normal. We concerned the case, when Lie group of transformations is solvable. The local classification of homogeneous spaces is equivalent to the description of the effective pairs of Lie algebras. Studies are based on the use of properties of the Lie algebras, Lie groups and homogeneous spaces and they mainly have local character. The peculiarity of techniques presented in the work is the application of purely algebraic approach, as well as the combination of methods of differential geometry, the theory of Lie groups and algebras and the theory of homogeneous spaces.

Key words: canonical connection, transformation group, symmetric space, holonomy algebra.

Введение. Симметрическое пространство в смысле Э. Картана – это пространство аффинной связности без кручения, тензор кривизны которого сохраняется при параллельном перенесении. Примерами симметрических пространств могут служить пространства постоянной кривизны, классические области в комплексном аффинном пространстве и т. д. В работе изучаются симметрические пространства с разрешимой группой преобразований, их исследование существенно затруднено тем, что, в отличие от полупростых групп, не разработана теория их классификации, а сама классификация является громоздкой и трудоемкой. Понятие нормальной связности ввел Э. Картан для риманова многообразия (см. [1]), в [2] можно ознакомиться с понятием канонической связности и естественной связности без кручения.

Основные определения. Пусть M – дифференцируемое многообразие, на котором

транзитивно действует группа \bar{G} , (M, \bar{G}) – однородное пространство, $G = \bar{G}_x$ – стабилизатор произвольной точки $x \in M$. Проблема классификации однородных пространств (M, \bar{G}) равносильна классификации (с точностью до эквивалентности) пар групп Ли (\bar{G}, G) , где $G \subset \bar{G}$, так как M может быть отождествлено с многообразием левых смежных классов \bar{G}/G (см., например, [3]). Изучая однородные пространства, важно рассматривать не саму группу \bar{G} , а ее образ в $Diff(M)$, т. е. достаточно изучать только эффективные действия группы \bar{G} на многообразии M . Пусть $\bar{\mathfrak{g}}$ – алгебра Ли группы Ли \bar{G} , а \mathfrak{g} – подалгебра, соответствующая подгруппе G . Пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ алгебр Ли называется *эффективной*, если подалгебра \mathfrak{g} не содержит отличных от нуля идеалов $\bar{\mathfrak{g}}$. *Изотропное действие* группы G на касательном пространстве $T_x M$ – это фактор-действие присоединенного действия G на $\bar{\mathfrak{g}}$: $s.(x + \mathfrak{g}) = (Ad_s)(x) + \mathfrak{g}$ для всех $s \in G$, $x \in \bar{\mathfrak{g}}$.

При этом алгебра \mathfrak{g} действует на $T_x M = \bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$ следующим образом:

$$x.(y + \mathfrak{g}) = [x, y] + \mathfrak{g} \text{ для всех } x \in \bar{\mathfrak{g}}, y \in \bar{\mathfrak{g}}.$$

Пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ называется *изотропно-точной*, если точно изотропное представление \mathfrak{g} . Это означает, что естественное действие стабилизатора \bar{G}_x , $x \in M$ на $T_x M$ имеет нулевое ядро. Необходимое условие существования аффинной связности состоит в том, что представление изотропии для G должно быть точным, если \bar{G} эффективна на \bar{G}/G [2]. Там, где это не будет вызывать разночтения, будем отождествлять подпространство, дополнительное к \mathfrak{g} в $\bar{\mathfrak{g}}$, и фактор-пространство $\mathfrak{m} = \bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$. *Аффинной связностью* на паре $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ называется такое отображение $\Lambda: \bar{\mathfrak{g}} \rightarrow \mathfrak{gl}(\mathfrak{m})$, что его ограничение на \mathfrak{g} – изотропное представление подалгебры, а все отображение является \mathfrak{g} -инвариантным. Инвариантные аффинные связности на однородном пространстве (M, \bar{G}) находятся во взаимно однозначном соответствии (см., например, [4]) с аффинными связностями на паре $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$. Говорят, что многообразие M с аффинной связностью является *аффинным симметрическим*, если для каждого $x \in M$ симметрия s_x может быть продолжена до глобального аффинного преобразования для M . На каждом связном аффинном симметрическом пространстве группа аффинных преобразований транзитивна, т. е. аффинное симметрическое пространство M может быть представлено как однородное пространство \bar{G}/G . Более того, поскольку $M = \bar{G}/G$ редуцитивно (а \bar{G} транзитивна), для классификации симметрических пространств достаточно рассматривать только изотропно-точные пространства. Таким образом, симметрическое пространство есть тройка (\bar{G}, G, σ) , состоящая из связной группы Ли \bar{G} , замкнутой подгруппы G для \bar{G} и инволютивного автоморфизма σ для \bar{G} такого, что $\sigma(g) = s_o \circ g \circ s_o^{-1}$ для $g \in \bar{G}$, где s_o – симметрия для M в o . Пусть $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, \sigma)$ – симметрическая алгебра Ли. Поскольку σ инволютивно, то его собственными значениями являются 1 и -1 , а \mathfrak{g} – собственное подпространство для 1. Пусть \mathfrak{m} – собственное подпространство для -1 . Разложение $\bar{\mathfrak{g}} = \mathfrak{g} + \mathfrak{m}$ называется *каноническим разложением* для $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, \sigma)$. Если $\bar{\mathfrak{g}} = \mathfrak{g} + \mathfrak{m}$ – каноническое разложение симметрической алгебры Ли $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g}, \sigma)$, то

$$[\mathfrak{g}, \mathfrak{g}] \subset \mathfrak{g}, [\mathfrak{g}, \mathfrak{m}] \subset \mathfrak{m}, [\mathfrak{m}, \mathfrak{m}] \subset \mathfrak{g}.$$

Поскольку тензоры кривизны и кручения инвариантны относительно действия группы Ли G , то они однозначно определяются тензорами на касательном пространстве к многообразию, причем эти тензоры инвариантны относительно

изотропного действия. Тензор кручения $T \in \text{Inv}T_2^1(\mathfrak{m})$ и тензор кривизны $R \in \text{Inv}T_3^1(\mathfrak{m})$ имеют вид

$$T(x_m, y_m) = \Lambda(x)y_m - \Lambda(y)x_m - [x, y]_m, \\ R(x_m, y_m) = [\Lambda(x), \Lambda(y)] - \Lambda([x, y])$$

для всех $x, y \in \bar{\mathfrak{g}}$.

Односвязное многообразие M с аффинной связностью такой, что $T = \nabla R = 0$, порождает симметрическое пространство (\bar{G}, G, σ) такое, что $M = \bar{G}/G$. Верно и обратное, если (\bar{G}, G, σ) – симметрическое пространство, то однородное пространство \bar{G}/G допускает инвариантную аффинную связность с $T = \nabla R = 0$.

Инвариантная связность, определяемая равенством $\Lambda|_{\mathfrak{m}} = 0$, называется *канонической связностью* для (\bar{G}, G, σ) или \bar{G}/G (относительно разложения $\bar{\mathfrak{g}} = \mathfrak{g} + \mathfrak{m}$), ее также называют *канонической связностью второго рода*. Поскольку для симметрического пространства $[\mathfrak{m}, \mathfrak{m}] \subset \mathfrak{g}$, то каноническая связность совпадает с *естественной связностью без кручения* (единственной инвариантной аффинной связностью без кручения, имеющей те же геодезические, что и каноническая связность: $\Lambda_m(x)y = 1/2[x, y]_m$, $x, y \in \mathfrak{m}$; ее также называют *канонической связностью первого рода*), и мы имеем $T = \nabla R = 0$. Если (\bar{G}, G, σ) – симметрическое пространство, то каноническая связность есть единственная аффинная связность на $M = \bar{G}/G$, которая инвариантна при действии симметрий для M .

Переформулируем теорему Вана об алгебре группы голономии инвариантной связности: алгебра Ли группы голономии инвариантной связности $\Lambda: \bar{\mathfrak{g}} \rightarrow \mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$ на паре $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ – это подалгебра алгебры Ли $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$ вида $V + [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), V] + [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), V]] + \dots$, где V – подпространство, порожденное множеством

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

Положим \mathfrak{a} , равной подалгебре в $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$, порожденной $\{\Lambda(x) \mid x \in \bar{\mathfrak{g}}\}$. Первоначально алгебра \mathfrak{a} была введена в римановом случае Б. Костантом и использовалась А. Лихнеровичем и Г. Ваном в более общей ситуации. Если \mathfrak{h}^* – алгебра Ли группы голономии, то $\mathfrak{h}^* \subset \mathfrak{a} \subset \mathbb{N}(\mathfrak{h}^*)$, где $\mathbb{N}(\mathfrak{h}^*)$ – нормализатор \mathfrak{h}^* в $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$. Будем говорить, что связность *нормальна*, если $\mathfrak{h}^* = \mathfrak{a}$.

Классификация симметрических пространств. Будем описывать пару $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ при помощи таблицы умножения $\bar{\mathfrak{g}}$. Через $\{e_1, \dots, e_n\}$ обозначим базис $\bar{\mathfrak{g}}$ ($n = \dim \bar{\mathfrak{g}}$). Будем полагать, что \mathfrak{g} порождается e_1, \dots, e_{n-3} , а $\{u_1 = e_{n-2}, u_2 = e_{n-1}, u_3 = e_n\}$ – базис \mathfrak{m} . Для нумерации подалгебр используем запись $d.n$, для нумерации пар – $d.n.m$, соответствующие

приведенным в [5], здесь d – размерность подалгебры, n – номер подалгебры в $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$, а m – номер пары $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$. Будем описывать связность через образы базисных векторов $\Lambda(u_1), \Lambda(u_2), \Lambda(u_3)$, тензор кривизны R – через $R(u_1, u_2), R(u_1, u_3), R(u_2, u_3)$, а тензор кручения T – через $T(u_1, u_2), T(u_1, u_3), T(u_2, u_3)$.

Теорема. Все трехмерные симметрические однородные пространства, допускающие нормальную связность, такие, что $\bar{\mathfrak{g}}$ и \mathfrak{g} разрешимы, а $\dim \mathfrak{g} > 1$, локально имеют следующий вид:

2.9.1	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3
e_1	0	$2e_2$	u_1	0	$-u_3$
e_2	$-2e_2$	0	0	0	u_1
u_1	$-u_1$	0	0	0	0
u_2	0	0	0	0	0
u_3	u_3	$-u_1$	0	0	0

2.9.5, 2.9.6	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3	$\alpha \geq 0$
e_1	0	e_2	u_1	0	0	
e_2	$-e_2$	0	0	0	u_1	
u_1	$-u_1$	0	0	0	$\pm e_2$	
u_2	0	0	0	0	αu_2	
u_3	0	$-u_1$	$\mp e_2$	$-\alpha u_2$	0	

2.17.2, 2.17.3	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3
e_1	0	0	0	0	u_1
e_2	0	0	0	0	u_2
u_1	0	0	0	0	$\pm e_1$
u_2	0	0	0	0	αe_2
u_3	$-u_1$	$-u_2$	$\mp e_1$	$-\alpha e_2$	0

2.21.1	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3
e_1	0	e_2	u_1	0	$-u_3$
e_2	$-e_2$	0	0	u_1	u_2
u_1	$-u_1$	0	0	0	0
u_2	0	$-u_1$	0	0	0
u_3	u_3	$-u_2$	0	0	0

Пара	Совпадает с 2.17.2, за исключением
2.17.4	$[u_1, u_3] = \alpha e_1 - e_2,$ $[u_2, u_3] = e_1 + \alpha e_2, \alpha \geq 0$
2.17.6, 2.17.7	$[u_1, u_3] = \pm e_1, [u_2, u_3] = e_1 + e_2$

Для получения этого результата из изотропно-точных пар выбираем симметрические, т. е. для которых существует следующее разложение $\bar{\mathfrak{g}} = \mathfrak{g} + \mathfrak{m}, [\mathfrak{g}, \mathfrak{m}] \subset \mathfrak{m}, [\mathfrak{m}, \mathfrak{m}] \subset \mathfrak{g}$. В теореме выписаны именно такие пары, причем с каноническим разложением.

Действительно, пусть \mathfrak{g} – подалгебра алгебры Ли $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$ такая, что пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ допускает нормальную связность, $\bar{\mathfrak{g}}$ и \mathfrak{g} разрешимы, а $\dim \mathfrak{g} > 1$. Тогда \mathfrak{g} сопряжена одной и только одной из следующих подалгебр [6]:

$$2.9 \begin{bmatrix} y & x \\ & \mu y \end{bmatrix}, \mu = 0, -1,$$

$$2.17 \begin{bmatrix} & x \\ & y \end{bmatrix}, 2.21 \begin{bmatrix} x & y \\ & y \\ & -x \end{bmatrix}.$$

Здесь предполагается, что переменные обозначены латинскими буквами и принадлежат \mathbb{R} .

Для каждой такой подалгебры найдем изотропно-точные пары. Рассмотрим, например, пару типа 2.9. Пусть $E = \{e_1, e_2\}$ – базис \mathfrak{g} , где

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \mu \end{pmatrix}, e_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Через \mathfrak{h} обозначим нильпотентную подалгебру алгебры Ли \mathfrak{g} , порожденную вектором e_1 . Тогда имеем:

$$\mathfrak{g}^{(0)}(\mathfrak{h}) \supset \mathbb{R}e_1, U^{(1)}(\mathfrak{h}) \supset \mathbb{R}u_1,$$

$$\mathfrak{g}^{(1-\mu)}(\mathfrak{h}) \supset \mathbb{R}e_2, U^{(\lambda)}(\mathfrak{h}) \supset \mathbb{R}u_2,$$

$$U^{(\mu)}(\mathfrak{h}) \supset \mathbb{R}u_3,$$

положим:

$$[u_1, u_2] = a_1 e_1 + a_2 e_2 + \alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2 + \alpha_3 u_3,$$

$$[u_1, u_3] = b_1 e_1 + b_2 e_2 + \beta_1 u_1 + \beta_2 u_2 + \beta_3 u_3,$$

$$[u_2, u_3] = c_1 e_1 + c_2 e_2 + \gamma_1 u_1 + \gamma_2 u_2 + \gamma_3 u_3.$$

Пусть $\mu \notin \{0, 1/2, 2\}, \lambda \neq \pm(1-\mu)$. Проверим тождество Якоби для троек $(e_i, u_j, u_k), i=1, 2, 1 \leq j < k \leq 3$, и (u_1, u_2, u_3) :

- $[e_1, [u_1, u_2]] + [u_1, [u_2, e_1]] + [u_2, [e_1, u_1]] = 0,$
 $(1-\mu)a_2 e_2 + \alpha_1 u_1 + \lambda \alpha_2 u_2 + \mu \alpha_3 u_3 - (\lambda+1)[u_1, u_2] = 0,$
1. $(\lambda+1)a_1 = 0,$ 2. $(\mu+\lambda)a_2 = 0,$ 3. $\lambda \alpha_1 = 0,$
4. $\alpha_2 = 0,$ 5. $\alpha_3 = 0,$
- $[e_2, [u_1, u_2]] + [u_1, [u_2, e_2]] + [u_2, [e_2, u_1]] = 0,$
 $(\mu-1)a_1 e_2 = 0,$ 6. $(\mu-1)a_1 = 0,$

3. $[e_1, [u_1, u_3]] + [u_1, [u_3, e_1]] + [u_3, [e_1, u_1]] = 0,$
 $(1-\mu)b_2e_2 + \beta_1u_1 + \lambda\beta_2u_2 + \mu\beta_3u_3 - (\mu+1)[u_1, u_3] = 0,$
 7. $(\mu+1)b_1 = 0,$ 8. $b_2 = 0,$ 9. $\beta_1 = 0,$
 10. $(\lambda-\mu-1)\beta_2 = 0,$ 11. $\beta_3 = 0,$
4. $[e_2, [u_1, u_3]] + [u_1, [u_3, e_2]] + [u_3, [e_2, u_1]] = 0,$
 $(\mu-1)b_1e_2 = 0,$ 12. $b_1 = 0,$
5. $[e_1, [u_2, u_3]] + [u_2, [u_3, e_1]] + [u_3, [e_1, u_2]] = 0,$
 $(1-\mu)c_2e_2 + \gamma_1u_1 + \lambda\gamma_2u_2 + \mu\gamma_3u_3 - (\lambda+\mu)[u_2, u_3] = 0,$
 13. $(\lambda+\mu)c_1 = 0,$ 14. $(1-\lambda-2\mu)c_2 = 0,$
 15. $\gamma_1 = 0,$ 16. $\gamma_2 = 0,$ 17. $\lambda\gamma_3 = 0,$
6. $[e_2, [u_2, u_3]] + [u_2, [u_3, e_2]] + [u_3, [e_2, u_2]] = 0,$
 $(\mu-1)c_1e_2 + \gamma_3u_1 + a_2e_2 + a_1e_1 + \alpha_1u_1 = 0,$
 18. $a_1 = 0,$ 19. $a_2 + (\mu-1)c_1 = 0,$ 20. $\gamma_3 + \alpha_1 = 0,$
7. $[u_1, [u_2, u_3]] + [u_2, [u_3, u_1]] + [u_3, [u_1, u_2]] = 0,$
 $-c_1e_1 + \gamma_3\beta_2u_2 - a_2u_1 - \alpha_1\beta_2u_2 = 0,$ 21. $c_1 + a_2 = 0,$
 22. $\beta_2(\gamma_3 - \alpha_1) = 0.$

Рассмотрим следующие случаи:

1. $\lambda = 0.$ 1.1. $\alpha_1 = 0.$ Тогда пара (\bar{g}, g) эквивалентна тривиальной паре $(\bar{g}_1, g_1).$

1.2. $\alpha_1 \neq 0.$ Если $\mu \neq 1,$ тогда пара (\bar{g}, g) эквивалентна паре (\bar{g}_4, g_4) посредством отображения $\pi: \bar{g}_4 \rightarrow \bar{g},$ где

$$\pi(e_i) = e_i, \quad i = 1, 2, \quad \pi(u_1) = u_1,$$

$$\pi(u_2) = \alpha_1 u_2, \quad \pi(u_3) = u_3,$$

и, в случае $\mu = 1,$ пара (\bar{g}, g) эквивалентна тривиальной паре при помощи отображения $\pi_{\mu=1}: \bar{g}_1 \rightarrow \bar{g},$ где

$$\pi_{\mu=1}(e_i) = e_i, \quad i = 1, 2, \quad \pi_{\mu=1}(u_1) = u_1,$$

$$\pi_{\mu=1}(u_2) = u_2 - \alpha_1 e_1, \quad \pi_{\mu=1}(u_3) = u_3.$$

2. $\lambda = 1 + \mu.$ 2.1. $\beta_2 = 0.$ Тогда пара (\bar{g}, g) тривиальна.

2.2. $\beta_2 \neq 0.$ Тогда пара (\bar{g}, g) эквивалентна паре (\bar{g}_2, g_2) посредством отображения $\pi: \bar{g}_2 \rightarrow \bar{g},$ где

$$\pi(e_1) = e_1, \quad \pi(e_2) = \beta_2 e_2, \quad \pi(u_1) = \beta_2 u_1,$$

$$\pi(u_2) = u_2, \quad \pi(u_3) = u_3.$$

3. $\lambda \neq 1 + \mu, \lambda \neq 1 - 2\mu.$ Тогда пара (\bar{g}, g) тривиальна. Аналогично рассматриваются остальные случаи.

Пусть n_i – максимальный нильпотентный идеал алгебры Ли $\bar{g}_i.$ Заметим, что $\dim n_1 = 4$ и $C^3 n_1 = \{0\},$ $\dim n_2 = 4$ и $C^3 n_2 \neq \{0\},$ $\dim n_i = 3$ для $i = 4, \dots, 7.$ Отсюда следует, что пары (\bar{g}_i, g_i) для $i = 4, \dots, 7$ не эквивалентны тривиальной паре (\bar{g}_1, g_1) и паре $(\bar{g}_2, g_2),$ а пары (\bar{g}_1, g_1) и (\bar{g}_2, g_2) не эквивалентны между со-

бой. Пары 2.9.4–2.9.7 также не эквивалентны друг другу. Таким образом, любая пара (\bar{g}, g) типа 2.9 при $\lambda = 0, \mu = 0, -1$ эквивалентна одной и только одной из пар 2.9.1, 2.9.2, 2.9.4–2.9.7. При этом симметрическое пространство задают только пары 2.9.1, 2.9.5 ($\alpha = 0$), 2.9.6 ($\alpha = 0$). Другие случаи рассматриваются аналогично.

Описание связностей. Для найденных пар выписываем аффинные связности, тензоры кривизны и кручения, алгебры голономии, находим канонические связности, а также естественные связности без кручения.

Рассмотрим, например, пару 2.9.1 при $\lambda = 0, \mu = -1.$ Тогда прямыми вычислениями получаем, что аффинная связность имеет вид

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

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

Тензор кривизны –

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

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

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

а тензор кручения –

$$(p_{1,2} - q_{1,1}, 0, 0), (0, 2p_{2,3}, 0), (0, 0, q_{1,1} - p_{1,2}),$$

связность является нормальной при $p_{1,2} \neq 0, p_{2,3} \neq 0, q_{2,2} = -2q_{1,1},$ тогда алгебра голономии – $\mathfrak{sl}(3, \mathbb{R}).$

Рассмотрим пару 2.2.1. При $\lambda = 0$ аффинная связность и тензор кривизны имеют вид соответственно:

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

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

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

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

тензор кручения –

$$(2p_{1,2}, 0, 0), (0, 2p_{1,2}, 0), (0, 0, 2p_{1,2}),$$

связность нормальна при $p_{1,2} \neq 0$, тогда алгебра голономии –

$$\begin{pmatrix} p_3 & p_1 & 0 \\ p_2 & 0 & p_1 \\ 0 & p_2 & -p_3 \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим пару 2.17.2. Связность имеет следующий вид:

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

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

связность нормальна при $a \neq 0$, $p_{1,3} = r_{1,1} = p_{2,3} = q_{2,3} = q_{1,3} = 0$, тогда алгебра голономии имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & p_1 \\ 0 & 0 & p_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

У перечисленных ниже пар связность такая же, как в случае 2.17.2:

Пара	Аффинная связность нормальна при
2.17.3	$a \neq 0, p_{1,3} = r_{1,1} = p_{2,3} = q_{2,3} = q_{1,3} = 0$
2.17.4	$p_{1,3} = r_{1,1} = p_{2,3} = q_{2,3} = q_{1,3} = 0$
2.17.6	$p_{1,3} = r_{1,1} = p_{2,3} = q_{2,3} = q_{1,3} = 0$
2.17.7	$p_{1,3} = r_{1,1} = p_{2,3} = q_{2,3} = q_{1,3} = 0$

Аналогично у указанных пар алгебра голономии такая же, как и в случае 2.17.2.

Аффинные связности на остальных пространствах имеют следующий вид:

Пара	Аффинная связность
2.9.5, 2.9.6	$\begin{pmatrix} 0 & p_{12} & p_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} q_{11} & 0 & 0 \\ 0 & q_{22} & q_{23} \\ 0 & 0 & q_{11} \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} r_{11} & 0 & 0 \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & p_{12} & r_{11} + p_{13} \end{pmatrix}$

Тензоры кривизны и кручения на симметрических пространствах:

Пара	Тензор кривизны
2.9.5	$\begin{pmatrix} 0 & p_{12}q_{22} - q_{11}p_{12} & p_{12}q_{23} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} 0 & p_{12}r_{22} + p_{13}p_{12} - r_{11}p_{12} & p_{12}r_{23} + p_{13}^2 - 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} -aq_{11} & 0 & 0 \\ 0 & p_{12}q_{23} - aq_{22} & A \\ 0 & q_{11}p_{12} - p_{12}q_{22} & -p_{12}q_{23} - aq_{11} \end{pmatrix},$ $A = q_{22}r_{23} + q_{23}r_{11} + q_{23}p_{13} - r_{22}q_{23} - r_{23}q_{11} - aq_{23}$
2.9.6	$\begin{pmatrix} 0 & p_{12}q_{22} - q_{11}p_{12} & p_{12}q_{23} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} 0 & p_{12}r_{22} + p_{13}p_{12} - r_{11}p_{12} & p_{12}r_{23} + p_{13}^2 + 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} -aq_{11} & 0 & 0 \\ 0 & p_{12}q_{23} - aq_{22} & A \\ 0 & q_{11}p_{12} - p_{12}q_{22} & -p_{12}q_{23} - aq_{11} \end{pmatrix},$ $A = q_{22}r_{23} + q_{23}r_{11} + q_{23}p_{13} - r_{22}q_{23} - r_{23}q_{11} - aq_{23}$
Пара	Тензор кручения
2.9.5, 2.9.6	$(p_{12} - q_{11}, 0, 0), (p_{13} - r_{11}, 0, 0),$ $(0, q_{23} - r_{22} - a, q_{11} - p_{12})$

Связность является канонической, если $\Lambda(u_1) = \Lambda(u_2) = \Lambda(u_3) = 0$. Выпишем, при каких условиях связность имеет те же геодезические, что и каноническая, и когда связность является естественной связностью без кручения:

Пара	Связность имеет те же геодезические, что и каноническая
2.9.1	$q_{11} = -p_{12}, q_{22} = 0$
2.9.5, $\alpha = 0$	$q_{11} = -p_{12}, r_{11} = -p_{13}, r_{22} = -q_{23},$ $q_{22} = r_{23} = 0$

2.9.6, $\alpha = 0$	$q_{11} = -p_{12}, r_{11} = -p_{13}, r_{22} = -q_{23},$ $q_{22} = r_{23} = 0$
2.17.2– 2.17.4	$r_{11} = -p_{13}, r_{13} = r_{23} = 0$
2.17.6	$r_{11} = -p_{13}, r_{13} = r_{23} = 0$
2.17.7	$r_{11} = -p_{13}, r_{13} = r_{23} = 0$
2.21.1	p_{12} – любое
Пара	Естественная связность без кручения
2.9.1	$p_{12} = 0, p_{23} = 0, q_{11} = 0, q_{22} = 0$
2.9.5, $\alpha = 0$	$p_{12} = p_{13} = q_{11} = q_{22} = q_{23} =$ $= r_{11} = r_{22} = r_{23} = 0$
2.9.6, $\alpha = 0$	$p_{12} = p_{13} = q_{11} = q_{22} = q_{23} =$ $= r_{11} = r_{22} = r_{23} = 0$
2.17.2– 2.17.4	$p_{13} = p_{23} = q_{13} = q_{23} =$ $= r_{11} = r_{13} = r_{23} = 0$
2.17.6	$p_{13} = p_{23} = q_{13} = q_{23} = r_{11} = r_{13} = r_{23} = 0$

2.17.7	$p_{13} = p_{23} = q_{13} = q_{23} = r_{11} = r_{13} = r_{23} = 0$
2.21.1	$p_{12} = 0$

Заключение. Таким образом, найдены инвариантные аффинные связности на трехмерных симметрических однородных пространствах с разрешимой группой преобразований вместе с их тензорами кривизны и кручения, алгебрами голономии, выписаны канонические связности, а также естественные связности без кручения. Полученные результаты могут быть использованы при исследовании многообразий, при изучении пространств с аффинной связностью, а также могут найти приложения в теории относительности, которая с математической точки зрения базируется на геометрии искривленных пространств, в ядерной физике, физике элементарных частиц и др.

Литература

1. Картан Э. Риманова геометрия в ортогональном репере. М.: Москов. ун-т, 1960. 307 с.
2. Кобаяси Ш., Номидзу К. Основы дифференциальной геометрии: в 2 т. М.: Наука, 1981. 2 т.
3. Онищик А. Л. Топология транзитивных групп Ли преобразований. М.: Физ.-мат. лит., 1995. 384 с.
4. Nomizu K. Invariant affine connections on homogeneous spaces // Amer. Journ. Math. 1954. Vol. 76, no. 1. P. 33–65.
5. Можей Н. П. Трехмерные изотропно-точные однородные пространства и связности на них. Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2015. 394 с.
6. Mozhey N. P. Normal connections on three-dimensional manifolds with solvable transformation group // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2016. Vol. 37, no. 2. P. 160–177.

References

1. Kartan E. *Rimanova geometriya v ortogonal'nom repere* [Riemannian geometry in an orthogonal frame]. Moscow, Moskovskiy universitet Publ., 1960. 307 p.
2. Kobayasi Sh., Nomidzu K. *Osnovy differentsial'noy geometrii: v 2 tomakh* [Foundations of differential geometry: in 2 vol.]. Moscow, Nauka Publ., 1981. 2 vol.
3. Onishchik A. L. *Topologiya tranzitivnykh grupp Li preobrazovaniy* [Topology of transitive transformation groups]. Moscow, Fiz.-mat. lit. Publ., 1995, 384 p.
4. Nomizu K. Invariant affine connections on homogeneous spaces. *Amer. Journ. Math*, 1954, vol. 76, no. 1, pp. 33–65.
5. Mozhey N. P. *Trekhmernyye izotropno-tochnyye odnorodnyye prostranstva i svyaznosti na nikh* [Three-dimensional isotropically faithful homogeneous spaces and affine connections on them]. Kazan, Kazanskiy universitet Publ., 2015. 394 p.
6. Mozhey N. P. Normal connections on three-dimensional manifolds with solvable transformation group. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 2016, vol. 37, no. 2, pp. 160–177.

Информация об авторе

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

Information about the author

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

Поступила 15.12.2016

УДК 531.19

Я. Г. Грода¹, Э. Э. Бильданов², В. С. Вихренко¹

¹Белорусский государственный технологический университет

²Белорусский государственный университет

ОБОБЩЕННОЕ КВАЗИХИМИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЫ С SALR-ПОТЕНЦИАЛОМ

Исследована решеточная модель системы наночастиц либо макромолекул, части которой притягиваются на малых расстояниях и отталкиваются на больших (SALR – Short-range Attraction Long-range Repulsion). В качестве модели рассмотрен решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на плоской треугольной решетке. Свободная энергия изучаемой системы представлена в виде суммы энергии базисной системы, определяемой средними потенциалами, и диаграммной части свободной энергии. Статистическая сумма для первой из этих частей может быть легко факторизована, а для второй допускает разложение в ряд по перенормированным с помощью средних потенциалов функциям Майера. При учете двухузловых членов в указанном разложении сформулировано обобщенное квазихимическое приближение (ОКХП), позволяющее получить в замкнутой форме выражения для равновесных характеристик модели. Рассмотрен алгоритм и выполнено моделирование равновесных свойств изучаемой решеточной системы по методу Монте-Карло. Показано, что развитый подход позволяет получать адекватные оценки равновесных термодинамических (химический потенциал, термодинамический фактор) и структурных (двухчастичные функции распределения ближайших соседей) характеристик системы вне области существования в ней упорядоченной фазы.

Ключевые слова: решеточный флюид, плоская треугольная решетка, SALR-потенциал, квазихимическое приближение, равновесные свойства, моделирование по методу Монте-Карло.

Ya. G. Groda¹, E. E. Bildanau², V. S. Vikhrenko¹

¹Belarusian State Technological University

²Belarusian State University

GENERALIZED QUASI-CHEMICAL APPROXIMATION FOR THE LATTICE SYSTEM WITH SALR-POTENTIAL

The lattice model of systems of nanoparticles or macromolecules, the parts of which are attracted at small distances and repulse at the larger range is considered. The lattice fluid with small distance attractive interaction between nearest neighbors and long range repulsive interaction between next-next-nearest neighbors is considered as a model. The free energy of the lattice system is represented as a sum of free energy of the reference system, which is defined by the mean potentials, and the diagram part of the free energy. The free energy of the reference system is represented in a closed form through elementary functions, whereas the diagram part of the free energy is represented by the diagram expansion in Mayer-like functions with averaging over the states of the reference system. The generalized quasi-chemical approximation (GQChA) for the free energy that nullifies the two-vertex diagram contributions to the free energy diagram expansion is proposed. The resulting expressions for the equilibrium characteristics of the model are given in a closed form. The algorithm of the Monte Carlo simulation of the lattice system is discussed. The equilibrium characteristics of the system under study are simulated. It is shown that GQChA gives possibility to obtain reasonable results for the equilibrium thermodynamic (chemical potential, thermodynamical factor) and structural (the two-particle distribution functions for the nearest neighbors) characteristics beyond the ordered phase area.

Key words: lattice fluid, plate triangular lattice, SALR-potential, quasi-chemical approximation, equilibrium properties, Monte Carlo simulation.

Введение. При рассмотрении большого числа реальных физико-химических и биологических систем часто возникает ситуация, когда

частицы, из которых эти системы состоят, заряжены и отталкиваются друг от друга в силу электростатического взаимодействия [1–3].

В случае биологических молекул отталкивание может быть также обусловлено упругими деформациями липидных мембран. В свою очередь, эти же частицы могут притягиваться друг к другу вследствие, например, ван-дер-ваальсовых сил [4–7]. Суммирование по всем взаимодействиям часто имеет вид SALR-потенциала, т. е. притяжения на близких расстояниях и отталкивания на более далеких (Short-range Attraction Long-range Repulsion).

В подобного рода системах притяжение обеспечивает разделение фаз, а отталкивание – формирование кластеров. В результате частицы могут образовывать различные конфигурации на поверхностях, границах жидкостей или мембранах. Вид этих конфигураций определяется конкуренцией между тепловым движением частиц, химическим потенциалом, контролирующим число частиц, и двумя частями потенциала взаимодействия.

Рассмотрение SALR-систем целесообразно начать с решеточных моделей [8–10], поскольку, с одной стороны, в их рамках можно получить описание большого числа общих свойств таких систем, а, с другой стороны, решеточные модели достаточно просты, что позволяет провести их детальное исследование как аналитическими методами, так и в рамках компьютерного моделирования по методу Монте-Карло.

В частности, в работе [9] был рассмотрен решеточный флюид с притяжением ближайших соседей и отталкиванием третьих на плоской треугольной решетке. Были исследованы возможные конфигурации ансамбля частиц флюида при $T=0$, предложено приближение среднего поля, в рамках которого построена фазовая диаграмма системы. В дальнейшем методами компьютерного моделирования было установлено существование в системе двух ламелярных фаз [10].

В настоящей работе представлены результаты построения для данной модели обобщенного квазихимического приближения (ОКХП) [11], позволяющего получить в замкнутой форме выражения для равновесных характеристик модели и показавшего возможность получения с его помощью адекватных полуколичественных результатов в случае решеточных флюидов с взаимодействием ближайших соседей на плоских решетках.

Модель. Рассматриваемая в работе модель представляет собой решеточный флюид, состоящий из n частиц на плоской треугольной решетке, содержащей N решеточных узлов. Частицы, занимающие ближайшие решеточные узлы и узлы, являющиеся соседями третьего порядка, взаимодействуют друг с другом. Энергии взаимодействий равны J_1 и J_3 соответственно. При этом полагается, что $J_1 < 0$, а

$J_3 > 0$, что соответствует притяжению ближайших соседей и отталкиванию третьих.

При учете только парных взаимодействий внутренняя энергия системы может быть записана как

$$U_N = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N J_{ij} n_i n_j, \quad (1)$$

где J_{ij} – энергия взаимодействия частиц, расположенных в узлах i и j , которая зависит от расстояния между узлами; n_i и n_j – числа заполнения ($n_i = 1$, если узел занят частицей, и $n_i = 0$, если узел вакантен). В формализме канонического ансамбля числа заполнения подчинены условию нормировки:

$$n = \sum_{i=1}^N n_i. \quad (2)$$

Очевидно, что в силу симметрии решетки число независимых констант, определяющих взаимодействие, можно существенно сократить, если ввести обозначение $J_k = J_{ij}$ для энергии взаимодействия частиц на узлах i и j , являющихся соседями k -го порядка ($k = 1, 2, \dots$ для ближайших, вторых и т. д. соседей). При этом в рамках рассматриваемой модели $J_k = 0$ при $k = 2$ и $k > 3$.

Свободная энергия решеточного флюида. Стандартным приемом, широко используемым при построении приближенных методов анализа свойств решеточных систем, является введение некоторого среднего поля, величина которого может быть как постоянной для всех узлов решетки (метод среднего поля Вейсса – Брэгга – Вильямса [12]), так и определяться состоянием решеточного узла и его ближайшего окружения (КХП [13], метод самосогласованного корреляционного поля [14]).

Для его введения рассмотрим так называемую базисную решеточную систему, определяемую одночастичными средними потенциалами $\phi_i(n_i)$, описывающими взаимодействие частицы ($n_i = 1$) или вакансии ($n_i = 0$), занимающей узел i , с узлом j [11, 15]. Потенциальная энергия такой системы может быть записана как

$$U_N^{(0)} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \phi_j(n_i) = \sum_{i=1}^N \sum_k z_k \phi^{(k)}(n_i), \quad (3)$$

где принимается, что $\phi_i(n_i) = 0$, т. е. взаимодействие частицы или вакансии самой с собой отсутствует, и $\phi_j(n_i) = \phi^{(k)}(n_i)$, если узлы i и j являются соседями k -го порядка; z_k – k -е координационное число. В случае плоской треугольной решетки $z_1 = z_2 = z_3 = 6$.

Такое совместное рассмотрение двух решеточных систем позволяет представить свободную

энергию исходной системы в расчете на один решеточный узел как сумму свободной энергии базисной системы $F^{(0)}$ и так называемой диаграммной части свободной энергии $F^{(d)}$:

$$F = F^{(0)} + F^{(d)}, \quad (4)$$

где

$$F^{(d)} = -k_B T \left(c_0 \ln \frac{Q_0}{c_0} + c_1 \ln \frac{Q_1}{c_1} \right), \quad (5)$$

$$Q_{n_i} = \exp \left[-\beta \left(\sum_{j=1}^N \varphi_j(n_i) \right) \right], \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (6)$$

здесь c_1 и c_0 – концентрации частиц и вакансий на решетке соответственно, равные

$$c_1 = c = \frac{n}{N}, \quad c_0 = \frac{N-n}{N} = 1-c, \quad (7)$$

а диаграммная часть свободной энергии $F^{(d)}$ допускает разложение в ряд по степеням перенормированных функций Майера [11]:

$$f_{ij}^{(k)}(n_i, n_j) = \exp \left\{ -\beta \left(J_k n_i n_j - \varphi^{(k)}(n_i) - \varphi^{(k)}(n_j) \right) \right\} - 1. \quad (8)$$

Обобщенное квазихимическое приближение. В качестве первого приближения в предлагаемом разложении могут быть учтены лишь линейные по перенормированным функциям Майера слагаемые. В этом случае выражение для свободной энергии принимает вид [11]

$$\frac{F}{k_B T} = \sum_{i=0}^1 c_i \left(\ln c_i - \sum_k z_k \ln X_i^{(k)} \right) - \sum_k \frac{z_k}{2} \sum_{i,j=0}^1 \left(\frac{W_{ij}^{(k)}}{X_i^{(k)} X_j^{(k)}} - 1 \right), \quad (9)$$

где

$$X_{n_i}^{(k)} = \exp(-\beta \varphi^{(k)}(n_i)), \quad (10)$$

$$W_{ij}^{(k)} = \exp(-\beta J_k n_i n_j).$$

В соотношении (9) суммирование по решеточным узлам заменено суммированием по координационным сферам, нумеруемым индексом k .

Входящие в выражение для свободной энергии средние потенциалы могут быть определены из условия экстремальности удерживаемой части свободной энергии по отношению к выбору средних потенциалов, которое приводит к следующей системе уравнений для их нахождения [11]:

$$X_i^{(k)} = \sum_{j=1}^1 c_j \frac{W_{ij}^{(k)}}{X_j^{(k)}}. \quad (11)$$

Система уравнений (11) показывает, что средние потенциалы для различных соседей не зависят друг от друга и их радиус действия такой же, как и для прямого взаимодействия, поскольку при $J_k = 0$ $W_{ij}^{(k)} = 1$ и $X_i^{(k)} = 1$, т. е. $\varphi^{(k)}(i) = 0$. Решение системы уравнений (11) может быть получено в замкнутой форме, что позволяет записать выражение для свободной энергии в следующем виде:

$$\beta F = (1-c) \ln(1-c) + c \ln c - \sum_k \frac{z_k}{2} (\ln Y_k - (1-2c) \ln \eta_k), \quad (12)$$

где в соответствии с [15]

$$Y_k = 0,5 \left(1 + \sqrt{1 + 4c(1-c)(W_k - 1)} \right), \quad (13)$$

$$\eta_k = \frac{Y_k - c}{1-c}, \quad W_k = \exp(-\beta J_k).$$

Знание свободной энергии дает возможность в дальнейшем определить любые ее равновесные характеристики. Так, например, для химического потенциала μ , термодинамического фактора χ_T и вероятности двум узлам, являющимся соседями порядка k , быть занятыми частицами $P_k(1; 1)$ получаем:

$$\beta \mu = \left(\frac{\partial(\beta F)}{\partial c} \right)_T = \ln \frac{c}{1-c} - \sum_k z_k \ln \frac{Y_k - c}{1-c}, \quad (14)$$

$$\chi_T = \frac{\partial(\beta \mu)}{\partial \ln c} = \frac{1}{1-c} \left(1 - \sum_k z_k \frac{Y_k - 1}{2Y_k - 1} \right), \quad (15)$$

$$P_k(1; 1) = \frac{2}{z_k} \left(\frac{\partial F}{\partial J_k} \right)_T = c \frac{Y_k + c - 1}{Y_k}. \quad (16)$$

Также следует отметить, что соотношения (14)–(16) могут применяться для решеток любых типов с произвольным радиусом взаимодействия. Фактически геометрия решетки учитывается в них лишь посредством набора координационных чисел z_k .

Алгоритм моделирования. Как было отмечено выше, одним из достоинств решеточных моделей является возможность их простого и наглядного численного моделирования по методу Монте-Карло (МКМ). Моделирование равновесных характеристик рассматриваемой решеточной системы в большом каноническом ансамбле по методу Монте-Карло может быть выполнено в рамках стандартного алгоритма Метрополиса [16], использование которого к модели решеточного флюида детально описано в работе [17].

Применительно к исследуемой решеточной системе вычислительный алгоритм, предложенный в [16], представляет собой следующее:

первоначально рассматривается произвольное распределение некоторого числа частиц по решетке, содержащей $N = L^d$ узлов (L – линейный размер решетки, d – размерность пространства). Затем произвольным образом выбирается узел решетки. Если этот узел занят частицей, то эта частица изымается, если же он вакантен, то частица добавляется, и определяется изменение энергии δE_N . Если $\delta E_N \leq 0$, то новая конфигурация принимается, если $\delta E_N > 0$, то она принимается с вероятностью:

$$W = \exp(-\beta \delta E_N). \quad (17)$$

Для этого случайным образом генерируется число W_0 из интервала $[0; 1]$, и если $W \geq W_0$, то новая конфигурация принимается. В противном случае новая конфигурация отвергается, и система возвращается в прежнее состояние. Повторение описанной процедуры n раз, где n – число частиц на решетке, формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

Поскольку первоначальное состояние моделируемой системы является произвольным и может существенно отличаться от равновесного, для перехода системы в состояние термодинамического равновесия требуется некоторое число МКШ. При определении средних значений термодинамических величин эти начальные шаги не учитываются.

При моделировании использовалась решетка, содержащая 10^4 решеточных узлов. Для снижения влияния конечности размеров моделируемой системы на получаемые результаты применялись периодические граничные условия.

Полная длина процедуры моделирования состояла из 70 000 МКШ. При этом первые 20 000 МКШ отводились на процесс эквилибрации и не учитывались при дальнейшем усреднении.

Сопоставление данных моделирования по методу Монте-Карло и аналитических расчетов. С целью верификации развитого обобщенного квазихимического приближения и определения границ его применимости было выполнено моделирование решеточного флюида с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на плоской треугольной решетке при $|J_1|/J_2 = 0,5$.

На рис. 1–6 представлены зависимости от концентрации примесных частиц химического потенциала, термодинамического фактора и корреляционных функций $g_k(1; 1)$:

$$g_k(1; 1) = \frac{F_k(1; 1)}{c^2}, \quad (18)$$

вычисленные при параметре взаимодействия $\beta J_1 = -1,831; -1,373; -0,916$ и $-0,549$. В случае

решеточного флюида с взаимодействием ближайших соседей на треугольной решетке выбранные параметры взаимодействия соответствуют температурам $0,6T_c; 0,8T_c; 1,2T_c$ и $2,0T_c$ соответственно.

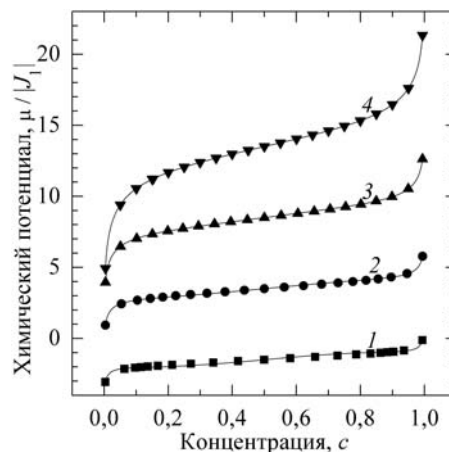


Рис. 1. Концентрационная зависимость химического потенциала решеточного газа с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на треугольной решетке. Каждая группа кривых смещена относительно предыдущей на 5 единиц вдоль вертикальной оси (первоначальные положения кривых соответствуют $\mu/|J_1| = -1,5$ при $c = 0,5$). Линиями представлены результаты ОКХП, точками – МКМ:

- 1 – $\beta|J_1| = 1,831$; 2 – $\beta|J_1| = 1,373$;
- 3 – $\beta|J_1| = 0,916$; 4 – $\beta|J_1| = 0,549$

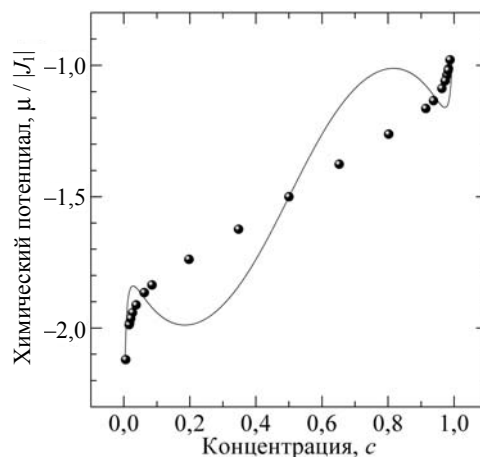


Рис. 2. Концентрационная зависимость химического потенциала решеточного газа с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на треугольной решетке при $\beta|J_1| = 2,747$. Линией представлены результаты ОКХП, точками – МКМ

В целом можно отметить, что при определении химического потенциала результаты обоих подходов находятся в хорошем качественном соответствии друг с другом в достаточно

широкой области изменения параметра взаимодействия. В то же время имеются заметные расхождения рассматриваемых подходов в области низких температур как при определении химического потенциала, так и термодинамического фактора.

Следует отметить, что при вычислении химического потенциала данное расхождение носит качественный характер. Так, например, из рис. 2 видно, что изотерма химического потенциала, полученная в рамках ОКХП, имеет две ван-дер-ваальсовых петли, что свидетельствует о двух фазовых переходах первого рода. В то же время любые признаки этих фазовых переходов отсутствуют на данных моделирования.

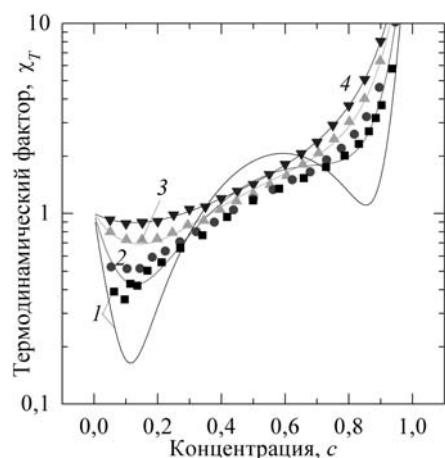


Рис. 3. Концентрационная зависимость термодинамического фактора решеточного газа с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на треугольной решетке. Линиями представлены результаты ОКХП, точками – МКМ:

$$1 - \beta|J_1| = 1,831; 2 - \beta|J_1| = 1,373; \\ 3 - \beta|J_1| = 0,916; 4 - \beta|J_1| = 0,549$$

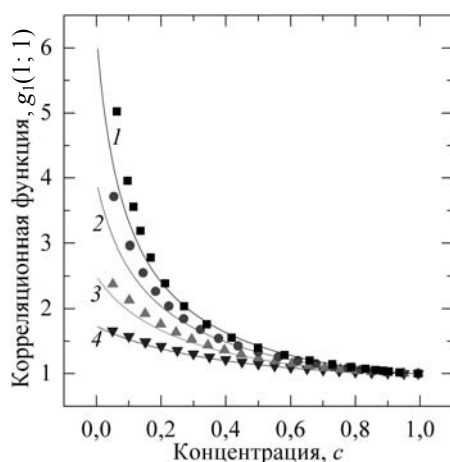


Рис. 4. Концентрационная зависимость корреляционной функции ближайших соседей. Линиями представлены результаты ОКХП, точками – МКМ:

$$1 - \beta|J_1| = 1,831; 2 - \beta|J_1| = 1,373; \\ 3 - \beta|J_1| = 0,916; 4 - \beta|J_1| = 0,549$$

Анализ структурных свойств системы, определяемых корреляционными функциями вида (18), показал, что ОКХП позволяет корректно определить лишь корреляционную функцию для ближайших соседей (рис. 4).

В то же время результаты ОКХП и МКМ для корреляционной функции третьих соседей (рис. 5) заметно расходятся даже при относительно высокой температуре $\beta J_1 = -0,916$ (кривая 3 на рис. 5). При этом моделирование показывает, что третья корреляционная функция оказывается значительно ближе к 1, чем это следует из ОКХП. Это позволяет сделать вывод, что заполнение частицами узлов, относящихся к третьей координационной сфере, является слабо коррелированным.

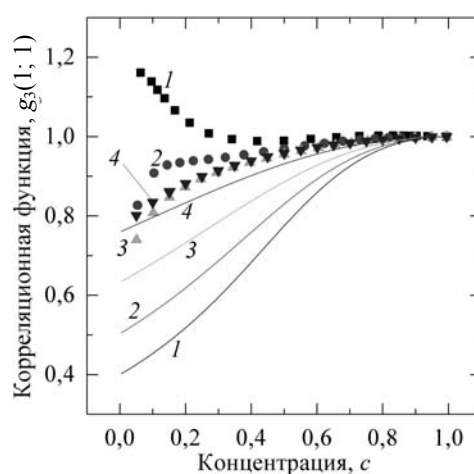


Рис. 5. Концентрационная зависимость корреляционной функции третьих соседей. Линиями представлены результаты ОКХП, точками – МКМ:

$$1 - \beta|J_1| = 1,831; 2 - \beta|J_1| = 1,373; \\ 3 - \beta|J_1| = 0,916; 4 - \beta|J_1| = 0,549$$

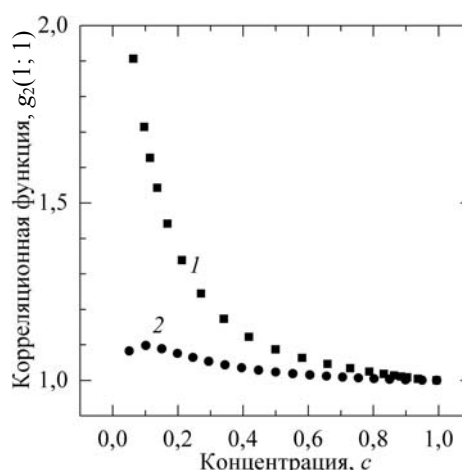


Рис. 6. Концентрационная зависимость корреляционной функции вторых соседей.

Точками обозначены результаты МКМ:

$$1 - \beta|J_1| = 1,831; 2 - \beta|J_1| = 0,916$$

Вместе с тем при изучении корреляций в заполнении второй координационной сферы ситуация становится обратной. Как нетрудно видеть из соотношений (16) и (18), при рассмотрении решеточного флюида с взаимодействием первых и третьих соседей в ОКХП $g_2(1; 1) = 1$. В то же время результаты МКМ заметно отличаются от этого значения при низких температурах (кривая I на рис. 6).

Такое расхождение результатов позволяет высказать предположение о том, что при низких температурах в рассматриваемой системе возникает некоторое упорядоченное состояние, обусловленное отталкиванием между третьими соседями и проявляющееся в образовании кластеров частиц. Возможность существования та-

кого состояния не учитывалась при построении развиваемого аналитического подхода, что и приводит к расхождению результатов, в первую очередь при определении структурных свойств системы.

Заключение. Развитое обобщенное квази-химическое приближение позволило получить простые аналитические выражения для нахождения термодинамических и структурных характеристик рассматриваемых решеточных систем. Сопоставление полученных с его помощью результатов с данными МК-моделирования показало, что оно может с успехом использоваться для оценки равновесных свойств модели вне области существования в ней упорядоченной фазы.

Литература

1. Dynamical arrest in attractive colloids: the effect of long-range repulsion / A. I. Campbell [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. Art. no. 208301 (4 p.).
2. Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids / A. Stradner [et al.] // *Nature*. 2004. Vol. 432. P. 492–495.
3. Seul M., Andelman D. Domain shapes and patterns: The phenomenology of modulated phases // *Science*. 1995. Vol. 267. P. 476–483.
4. Imperio A., Reatto L. Microphase morphology in two-dimensional fluids under lateral confinement // *Phys. Rev. E*. 2007. Vol. 76. Art. no. 040402 (4 p.).
5. Model colloidal fluid with competing interactions: Bulk and interfacial properties / A. J. Archer [et al.] // *J. Chem. Phys.* 2007. Vol. 126. Art. no. 014104 (14 p.).
6. Enhanced density fluctuations in fluid systems with competing interactions / D. Pinia [et al.] // *Chem. Phys. Lett.* 2000. Vol. 327. P. 209–215.
7. Archer A. J. Two-dimensional fluid with competing interactions exhibiting microphase separation: Theory for bulk and interfacial properties // *Phys. Rev. E*. 2008. Vol. 78. Art. no. 031402 (12 p.).
8. Pekalski J., Ciach A., Almarza N. G. Periodic ordering of clusters in a one-dimensional lattice model // *J. Chem. Phys.* 2013. Vol. 138. Art. no. 144903 (34 p.).
9. Pekalski J., Ciach A., Almarza N. G. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases // *J. Chem. Phys.* 2014. Vol. 140. Art. no. 114701 (11 p.).
10. Almarza N. G., Pekalski J., Ciach A. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. II. Results of Monte Carlo simulation // *J. Chem. Phys.* 2014. Vol. 140. Art. no. 164708 (12 p.).
11. The self-consistent diagram approximation for lattice systems / G. S. Bokun [et al.] // *Euro. Phys. Journ. B*. 2000. Vol. 15. P. 297–304.
12. Bragg W. L., Williams E. J. The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys // *Proc. Roy. Soc. A*. 1934. Vol. 145. P. 699–730.
13. Weiss P. R. The application of the Bethe – Peierls method to ferromagnetism // *Phys. Rev.* 1948. Vol. 74. P. 1493–1504.
14. Wysin G. M., Kaplan J. Correlated molecular-field theory for Ising models // *Phys. Rev. E*. 2000. Vol. 61. P. 6399–6403.
15. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. The diagram approximation for lattice systems // *Phys. Lett. A*. 2001. Vol. 286. P. 127–133.
16. Equation of state calculation by fast computing machines / N. Metropolis [et al.] // *J. Chem. Phys.* 1953. Vol. 21. P. 1087–1092.
17. Uebing C., Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions // *J. Chem. Phys.* 1991. Vol. 95, no. 10. P. 7626–7652.

References

1. Campbell A. I., Anderson V. J., van Duijneveldt J. S., Bartlett P. Dynamical arrest in attractive colloids: the effect of long-range repulsion. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, vol. 94, art. no. 208301 (4 p.).

2. Stradner A., Sedgwick H., Cardinaux F., Poon W., Egelhaaf S., Schurtenberger P. Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids. *Nature*, 2004, vol. 432, pp. 492–495.
3. Seul M., Andelman D. Domain shapes and patterns: The phenomenology of modulated phases. *Science*, 1995, vol. 267, pp. 476–483.
4. Imperio A., Reatto L. Microphase morphology in two-dimensional fluids under lateral confinement. *Phys. Rev. E*, 2007, vol. 76, art. no. 040402 (4 p.).
5. Archer A. J., Pini D., Evans R., Reatto L. Model colloidal fluid with competing interactions: Bulk and interfacial properties. *J. Chem. Phys.*, 2007, vol. 126, art. no. 014104 (14 p.).
6. Pinia D., Jialin G., Parola A., Reatto L. Enhanced density fluctuations in fluid systems with competing interactions. *Chem. Phys. Lett.*, 2000, vol. 327, pp. 209–215.
7. Archer A. J. Two-dimensional fluid with competing interactions exhibiting microphase separation: Theory for bulk and interfacial properties. *Phys. Rev. E*, 2008, vol. 78, art. no. 031402 (12 p.).
8. Pekalski J., Ciach A., Almarza N. G. Periodic ordering of clusters in a one-dimensional lattice model. *J. Chem. Phys.*, 2013, vol. 138, art. no. 144903 (34 p.).
9. Pekalski J., Ciach A., Almarza N. G. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases. *J. Chem. Phys.*, 2014, vol. 140, art. no. 114701 (11 p.).
10. Almarza N. G., Pekalski J., Ciach A. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. II. Results of Monte Carlo simulation. *J. Chem. Phys.*, 2014, vol. 140, art. no. 164708 (12 p.).
11. Bokun G. S., Groda Ya. G., Belov V. V., Uebing C., Vikhrenko V. S. The self-consistent diagram approximation for lattice systems. *Euro. Phys. Journ. B*, 2000, vol. 15, pp. 297–304.
12. Brag W. L., Williams E. J. The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys. *Proc. Roy. Soc. A*, 1934, vol. 145, pp. 699–730.
13. Weiss P. R. The application of the Bethe – Peierls method to ferromagnetism. *Phys. Rev.*, 1948, vol. 74, pp. 1493–1504.
14. Wysin G. M., Kaplan J. Correlated molecular-field theory for Ising models. *Phys. Rev. E*, 2000, vol. 61, pp. 6399–6403.
15. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. The diagram approximation for lattice systems. *Phys. Lett. A*, 2001, vol. 286, pp. 127–133.
16. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Marshall N., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E. Equation of state calculation by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 1953, vol. 21, pp. 1087–1092.
17. Uebing C., Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. *J. Chem. Phys.*, 1991, vol. 95, no. 10, pp. 7626–7652.

Информация об авторах

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

Бильданов Эльдар Эмирович – студент. Белорусский государственный университет (220030, г. Минск, пр-т Независимости, 4, Республика Беларусь). E-mail: el95dar@icloud.com

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

Information about the authors

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

Bildanau Eldar Emirovich – Student. Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: el95dar@icloud.com

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

Поступила 05.12.2016

УДК 535.37+541.65+543.4

Н. Н. Крук, Д. В. Кленицкий

Белорусский государственный технологический университет

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ЛОГИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ НА ОСНОВЕ СОДЕРЖАЩИХ ПОРФИРИНЫ БИХРОМОФОРНЫХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

В рамках представлений об обработке информации молекулярными системами рассмотрены процессы преобразования энергии электронного возбуждения бихромофорными супрамолекулярными системами, содержащими тетрапиррольные макроциклы. Бихромофорные супрамолекулярные системы обеспечивают возможность получения двух оптических входных сигналов, а межмолекулярные взаимодействия изучаемых систем в растворах используются для организации модуляции межхромофорных взаимодействий. Для дендримера нулевого поколения с порфириновым ядром и индолокарбазольными дендронами с архитектурой замещения АВВВ выявлен механизм инвертирования выходного сигнала путем аксиального лигандирования порфиринового фрагмента. Обнаружено, что данный дендример работает как молекулярный оптический переключатель. Для дендримера с порфириновым ядром и молекулой BODIPY в качестве второго хромофора показана работа в режиме полностью оптического логического элемента «ИЛИ», в котором коммутируются два независимых оптических входных сигнала. Установлено, что внутримолекулярный перенос энергии можно использовать для интеграции элемента «ИЛИ» с функцией логического затвора. Делается вывод о перспективности использования бихромофорных супрамолекулярных систем для выполнения логических операций и возможности интегрирования нескольких логических операций в одной супрамолекулярной системе.

Ключевые слова: порфирин, флуоресценция, аксиальное лигандирование, логические элементы, сигнал.

M. M. Kruk, D. V. Klenitsky

Belarusian State Technological University

MOLECULAR LOGIC UNITS BASED ON THE BICHROMOPHORIC SUPRAMOLECULAR SYSTEMS CONTAINING PORPHYRINS

The processes of the transformation of the electronic excitation energy by bichromophoric supramolecular systems containing tetrapyrrolic macrocycles are considered in the framework of the information processing by molecular systems. Bichromophoric supramolecular systems provide the possibility to obtain two optical input signals, and intermolecular interactions of the studied systems in the solutions are used to manage the modulation of interchromophoric interactions. The mechanism of output signal inversion by means of the axial ligation of porphyrin moiety is revealed for zero-generation dendrimer with porphyrin core and indolocarbazole dendrons having the substitution architecture ABVB. This dendrimer is shown to operate as a molecular optical switch. For the dendrimer with porphyrin core and BODIPY molecule as the second chromophore the functioning as the all optical logic element "OR" is shown. In this logic element two independent optical input signals are commutated. The intramolecular energy transfer is proven to be of use for the integration of the "OR" logic element with function of logical gate. Based on the reported data the availability of using the bichromophoric systems to proceed with the logic operations and possibility of integration of multiple logical operations within one supramolecular system is suggested.

Key words: porphyrin, fluorescence, axial ligation, logic units, signal.

Введение. Процессы преобразования световой и тепловой энергии молекулярными системами и специфические реакции межмолекулярного распознавания могут быть описаны на языке логических функций и бинарных сигналов [1, 2]. Показано, что нет необходимости в адресации

входного(ых) сигнала(ов) на изолированную (единичную) молекулу, а входные и выходные сигналы могут формироваться неоднородно уширенными ансамблями молекул [1–3]. Тетрапиррольные молекулы, обладающие способностью к различным специфическим межмолекулярным

взаимодействиям (хелатирование ионов металлов, процессы протонирования и депротонирования макроциклического ядра, аксиальное лигандирование хелатированного макроциклом иона металла, кулоновские взаимодействия периферических заместителей и др.) и множественным оптическим выходным сигналом, являются перспективной платформой для создания молекулярных логических устройств [3].

Следует отметить, что потенциал использования молекул порфиринов, равно как и любых других молекул красителей, для создания молекулярных логических элементов и устройств существенно ограничивается, если рассматривать фотофизические процессы, происходящие в отдельной молекуле. Действительно, любая молекула может обладать единственным оптическим входным сигналом на данной длине волны регистрации, вне зависимости от длины волны фотовозбуждения, поскольку высокая вероятность безызлучательной внутренней конверсии приводит к безусловному заселению нижнего возбужденного синглетного S_1 -состояния. Последовательное двухфотонное возбуждение также способствует к заселению S_1 -состояния, а процессы прямого фотовозбуждения возбужденных триплетных состояний маловероятны даже в соединениях с сильным спин-орбитальным возмущением из-за крайне малой величины коэффициента экстинкции. Поэтому в наборе из двух входных сигналов у логических элементов «И» или «ИЛИ» один всегда должен иметь неоптическую природу.

Кроме того, квантовый выход флуоресценции молекул порфиринов и родственных соединений относительно невысок (до 0,1), что накладывает существенные ограничения на динамический диапазон люминесцентного выходного сигнала и приводит к тому, что пороговые значения уровней логического «0» и «1» близки, а их разница может оказаться недостаточной для устойчивой дискриминации двух состояний.

Поэтому вызывает значительный интерес использование в качестве молекулярных логических элементов не отдельных тетрапиррольных молекул, а супрамолекулярных систем, в состав которых входят тетрапиррольные хромофоры. При этом в супрамолекулярной системе хромофоры могут быть не только тетрапиррольными, но и иметь другую природу. Важно то, что в любом случае появляется возможность межхромофорных взаимодействий и супрамолекулярная система обеспечивает множественность оптических логических входных и выходных сигналов.

В последнее время нами активно изучаются дендримеры с порфириновым ядром и (индоло)карбазольными дендронами [4–6]. Нами ис-

следованы спектрально-люминесцентные характеристики дендримеров с различной архитектурой дендримерной оболочки и строением порфиринового ядра и выявлено, что существует внутримолекулярный перенос энергии электронного возбуждения между дендронами и порфириновым ядром. Для установления закономерностей переноса энергии в зависимости от строения дендримерной оболочки был синтезирован и изучен набор соединений, который включал дендримеры с архитектурой замещения АВВВ, ААВВ, АВВВ и АААВВ по мезо-положениям порфиринового ядра [7]. Эффективность переноса энергии существенно зависит от состояния лигандирования хелатированного иона металла в порфириновом макроцикле [7], и было сделано предположение, что это явление может быть использовано для управления переносом энергии между дендримерной оболочкой и порфириновым ядром, т. е. для создания молекулярного оптического переключателя.

Карбазольные и индолокарбазольные фрагменты поглощают свет в ближней ультрафиолетовой области, что имеет свои преимущества и недостатки. К последним относится то, что исследованные порфирин-(индоло)карбазольные дендримеры обладают низким коэффициентом экстинкции в сине-зеленой области видимого диапазона. Имея целью создание бихромофорной супрамолекулярной системы, которая способна к эффективному поглощению света во всем видимом диапазоне спектра, нами была синтезирована и изучена супрамолекулярная система, состоящая из ковалентно связанных порфирина и замещенного 4,4-дифлюоро-4-бора-3а,4а-диаза-*s*-индацена (BODIPY) [8]. Молекулы BODIPY имеют высокую фотостабильность, большие коэффициенты поглощения в видимой области спектра, высокие квантовые выходы флуоресценции, низкие уровни интеркомбинационной конверсии. Поэтому они предложены в качестве перспективных светособирающих групп-антенн для сине-зеленой области видимого диапазона. Нами установлено, что в данной супрамолекулярной системе наблюдается эффективный перенос энергии между хромофорами, который, как и в вышеописанном случае, может модулироваться состоянием лигандирования хелатированного порфириновым макроциклом иона металла.

В настоящей работе процессы преобразования энергии фотовозбуждения в бихромофорных супрамолекулярных системах Zn-порфирин-индолокарбазол (дендример с архитектурой оболочки АВВВ) (рис. 1) и Zn-порфирин-BODIPY (рис. 2) и влияние на них аксиального лигандирования хелатированного иона цинка рассмотрены как процессы преобразования информации.

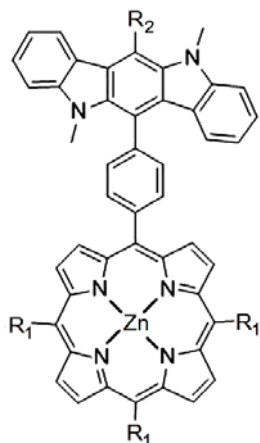


Рис. 1. Супрамолекулярная система
Zn-порфириин-индолоккарбазол (дендример 1):
R₁ – мезитильная группа; R₂ – алкильная группа

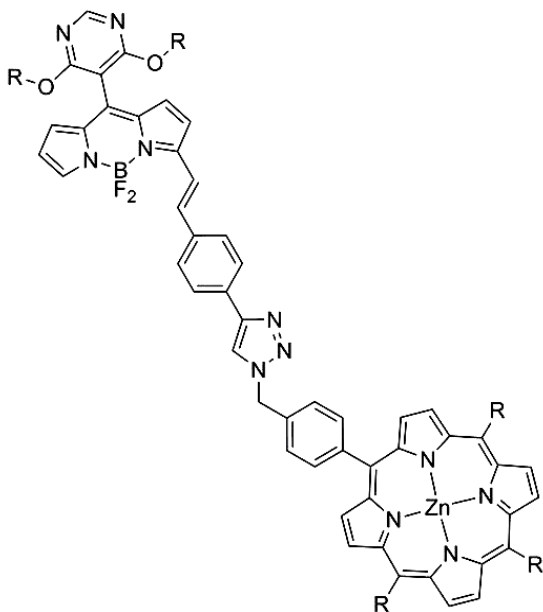


Рис. 2. Супрамолекулярная система
Zn-порфириин-BODIPY (дендример 2):
R – мезитильная группа

Основная часть. Структурная организация двух исследованных супрамолекулярных систем имеет общие черты, а именно, их можно рассмотреть как Zn-порфириновый дендример с архитектурой замещения АВВВ, в котором через фенильный спейсер присоединена другая хромофорная группа А. Поэтому для краткости ниже мы будем обозначать исследованные супрамолекулярные системы как дендримеры 1 и 2 (см. рис. 1 и 2). В видимой области поглощения дендримера 1 формируется полосами поглощения, принадлежащими порфириновому фрагменту, а в ближней ультрафиолетовой области – как полосами поглощения индолоккарбазола, так и слабым поглощением порфирина. Таким образом, можно попытаться заселить возбужден-

ные состояния каждого из двух хромофоров. Однако коэффициент экстинкции порфирина в области 300–340 нм очень мал и при этом в 3–4 раза ниже коэффициента экстинкции индолоккарбазола ($\lambda_{\text{макс}} = 335$ нм) в этом же спектральном диапазоне. Поэтому заселение путем фото-возбуждения возбужденных состояний двух хромофоров в сравнимых концентрациях оказывается невозможным, и, следовательно, дендример 1 нельзя рассматривать как логический элемент с двумя оптическими входами на длины волны 335 нм.

Однако нами было показано ранее, что в дендримере 1 наблюдается эффективный перенос энергии электронного возбуждения с индолоккарбазольной части на порфириин. Поэтому логично принять флуоресценцию порфиринового фрагмента в качестве выходного оптического сигнала, а в качестве входного оптического сигнала использовать фотовозбуждение дендримера в полосе поглощения индолоккарбазола. В этом случае трансдукция оптического сигнала опосредована внутримолекулярным переносом энергии электронного возбуждения, эффективность которого существенно зависит от состояния лигандирования хелатированного иона цинка порфирина [6]. Таким образом, лигандирование является вторым входным сигналом дендримера 1, причем этот сигнал будет управляющим, посредством которого можно контролировать эффективность переноса энергии между хромофорами и, следовательно, влиять на интенсивность выходного сигнала флуоресценции.

Функционирование данного логического элемента совершенно аналогично функционированию электронного ключа на биполярном транзисторе, включенном по классической схеме с общим эмиттером. Подачей соответствующего напряжения на базу транзистора (лигандирование иона цинка) замыкается цепь эмиттер – коллектор (скачкообразно увеличивается эффективность переноса энергии между индолоккарбазолом и порфирином). В результате в цепи эмиттер – коллектор протекает электрический ток (энергия электронного возбуждения переносится на порфириин, который дезактивируется с испусканием кванта флуоресценции). Дендример 1, таким образом, представляет собой оптический молекулярный транзистор, который управляется специфическим межмолекулярным взаимодействием между люисовскими основаниями и хелатированным ионом металла в порфирине. Молекулярные системы такого типа могут быть предложены в качестве сигнальных датчиков в оптоэлектронных приборах контроля тех или иных соединений в растворах.

Уровни логического «0» и «1» молекулярного переключателя определяются величиной эффективности переноса энергии E в лигандированном и нелигандированном дендримере, которая прямо пропорциональна интенсивности флуоресценции. Для лигандированного дендримера величина E изменяется в диапазоне 0,8–1,0 в зависимости от природы лиганда, а в случае нелигандированного дендримера она уменьшается до 0,32 [6]. При адресации входного сигнала на ансамбль дендримеров (например, иммобилизованный на поверхности) выходной сигнал будет определяться как сумма логических «0» и «1» отдельных молекул дендримера **1**. Поэтому в качестве порога срабатывания такого молекулярного переключателя логично принять концентрацию лиганда, при которой будет лигандирована половина адресуемых молекул, т. е. усредненная по ансамблю величина переноса будет составлять $\sim 0,6$.

В дендримере **2** излучательная дезактивация происходит посредством флуоресценции BODIPY-фрагмента [7], причем благодаря наличию эффективных процессов внутримолекулярного переноса энергии флуоресценция порфиринового фрагмента тушится. Таким образом, флуоресценция BODIPY-фрагмента является единственным излучательным каналом дезактивации. Использование в качестве оптического выходного сигнала флуоресценции BODIPY-фрагмента в области полосы чисто электронного перехода (590–620 нм) дает определенные преимущества по причине существенно более высокого квантового выхода флуоресценции производных BODIPY ($\Phi_{\text{фл}} = 0,5\text{--}1,0$) по сравнению с квантовым выходом флуоресценции Zn-порфиринов (типичное значение $\Phi_{\text{фл}} = 0,032$ для Zn-тетраметилпорфирина в пиридине). Величина $\Phi_{\text{фл}}$, измеренная для дендримера **2** в толуоле, составляет 0,75.

Излучательная дезактивация обоих хромофоров через один и тот же канал позволяет организовать полностью оптический логический элемент на базе дендримера **2**. Действительно, для каждого из хромофоров может быть выбран индивидуальный диапазон фотовозбуждения: для порфиринового фрагмента – в области максимума полосы Soret (420–430 нм), а для BODIPY-фрагмента – в области полосы 530–560 нм. Таким образом, фотовозбуждение либо порфирина (входной сигнал «1»), либо BODIPY (входной сигнал «1») приводит к формированию выходного оптического сигнала «1». Дендример **2** представляет собой полностью оптический логический элемент «ИЛИ» и позволяет коммутировать оптические сигналы, принадлежащие двум различным оптическим диапазонам. В результате формируется логический оп-

тический сигнал в третьем оптическом диапазоне (см. таблицу).

Таблица истинности для логического элемента «ИЛИ» дендримера 2

Фотовозбуждение		Флуоресценция при 610 нм
Zn-порфирин при 425 нм	BODIPY-фрагмент при 545 нм	
0	0	0
1	0	1
0	1	1
1	1	1

В то время как квантовый выход переноса энергии с порфирина на BODIPY-фрагмент при лигандировании порфирина остается неизменным и практически равным 1, величина квантового выхода переноса энергии в обратном направлении существенно зависит от состояния лигандирования акцептора. Так, для раствора в толуоле, в котором порфирин находится в четырехкоординированной нелигандированной форме, величина квантового выхода переноса энергии составляет 0,26. Это приводит к высокому квантовому выходу флуоресценции дендримера **2** (см. выше). Если же молекула акцептора лигандирована, то, согласно четырехорбитальной модели Гоутермана, энергетическая расстройка между двумя верхними заполненными молекулярными орбиталями увеличивается, в результате чего эффективность взаимодействия двух одноэлектронных конфигураций снижается. Это приводит к росту коэффициента экстинкции длинноволновой полосы поглощения, что, в свою очередь, резко увеличивает интеграл перекрытия спектров флуоресценции донора и поглощения акцептора. Величина квантового выхода переноса энергии вырастает до 0,93, а флуоресценция BODIPY-фрагмента тушится, и квантовый выход флуоресценции $\Phi_{\text{фл}}$ уменьшается до 0,05 (рис. 3).

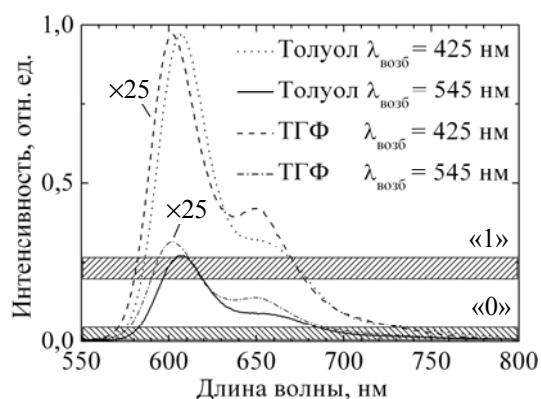


Рис. 3. Спектры флуоресценции дендримера **2**. Заштрихованные прямоугольники обозначают уровни выходных логических сигналов «1» и «0»

Таким образом, лигандирование порфирина в составе дендримера **2** позволяет интегрировать в функцию логического элемента отрицание «НЕ». Безусловно, полноценный элемент «ИЛИ-НЕ» получить не удастся, поскольку при входных сигналах «0» выходной сигнал элемента будет «0» при любом состоянии лигандирования порфирина. Поэтому дендример **2** правильнее рассматривать как элемент «ИЛИ» с интегрированной функцией логического затвора.

Большой динамический диапазон флуоресценции BODIPY-фрагмента (рис. 3) позволяет выбрать разные уровни логического «0» и «1» выходного сигнала. Однако для соответствия таблице истинности для логического элемента «ИЛИ» уровень «1» должен быть выбран так, как показано на рис. 3. Тогда при фотовозбуждении как порфиринового фрагмента, так и BODIPY обеспечивается уровень выходного сигнала «1», а лигандирование Zn-порфирина, приводящее к значительному падению интенсивности люминесценции, обеспечивает инвертирование выходного сигнала. В результате при «включении» затвора на выходе логического элемента уровень сигнала соответствует «0».

Заключение. Таким образом, анализ полученных результатов показывает, что бихромом-

формные супрамолекулярные системы, включающие тетрапиррольные хромофору, обеспечивают выполнение функций молекулярного транзистора, управляемого аксиальным лигандированием оптического переключателя и логического элемента «ИЛИ».

Аналогичные функции могут быть выполнены также с помощью дендримерных систем с более сложной структурой дендримерной оболочки. Основным условием должно быть наличие внутримолекулярного переноса заряда между хромофорами. Поскольку взаимное расположение любого из дендронов и порфиринового ядра в семействе дендримеров с индолокарбазольными дендронами остается практически одинаковым [6], то эффективность переноса энергии слабо зависит от архитектуры дендримерной оболочки. Поэтому сделанные в работе выводы в полной мере относятся ко всему семейству изученных дендримеров.

Анализ представленных результатов указывает на то, что бихромомформные супрамолекулярные системы и в особенности системы, содержащие тетрапиррольные хромофору, обладают большим потенциалом для создания полностью оптических молекулярных логических устройств, в которых возможна интеграция нескольких логических операций.

Литература

1. Szacilowski K. Digital information processing in molecular systems // *Chemical Reviews*. 2008. Vol. 108, no. 9. P. 3481–3548.
2. Andreasson J., Pischel U. Smart molecules at work – mimicking advanced logic operations // *Chemical Society Reviews*. 2010. Vol. 39. P. 174–188.
3. Крук Н. Н. Информация и сигналы в молекулярных системах // *Труды БГТУ*. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 58–62.
4. Meso-indolo[3,2-b]carbazolyl-substituted porphyrinoids: synthesis, characterization and effect of the number of indolocarbazole moieties on the photophysical properties / W. Maes [et al.] // *Eur. Journal of Organic Chemistry*. 2010. No. 13. P. 2576–2586.
5. Click reaction synthesis and photophysical studies of dendritic metalloporphyrins / N. T. Nguyen [et al.] // *Eur. Journal of Organic Chemistry*. 2014. No. 8. P. 1766–1777.
6. Porphyrin core dendrimers with ether-linked carbazole dendrons: dual luminescence of core and conformational flexibility of dendritic shell / N. T. Nguyen [et al.] // *Macroheterocycles*. 2014. Vol. 7, no. 3. P. 240–248.
7. Крук Н. Н., Крылов А. Б. Перенос энергии в дендримерах с порфириновым ядром // *Труды БГТУ*. 2016. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 51–55.
8. Excitation energy deactivation funnel in the 3-substituted BODIPY-porphyrin conjugate / N. T. Nguyen [et al.] // *J. Luminescence*. 2016. Vol. 179. P. 306–313.

References

1. Szacilowski K. Digital information processing in molecular systems. *Chemical Reviews*, 2008, vol. 108, no. 9, pp. 3481–3548.
2. Andreasson J., Pischel U. Smart molecules at work – mimicking advanced logic operations. *Chemical Society Reviews*, 2010, vol. 39. pp. 174–188.
3. Kruk M. M. Information and signals in molecular systems. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 58–62 (In Russian).
4. Maes W., Ngo T. H., Rong G., Starukhin A. S., Kruk M. M., Dehaen W. Meso-indolo[3,2-b]carbazolyl-substituted porphyrinoids: synthesis, characterization and effect of the number of

indolocarbazole moieties on the photophysical properties. *Eur. Journal of Organic Chemistry*, 2010, no. 13, pp. 2576–2586.

5. Nguyen N. T., Hofkens J., Scheblykin I. G., Kruk M., Dehaen W. Click reaction synthesis and photophysical studies of dendritic metalloporphyrins. *Eur. Journal of Organic Chemistry*, 2014, no. 8, pp. 1766–1777.

6. Nguyen N. T., Coutino-Gonzalez E., Hofkens J., Scheblykin I. G., Dehaen W., Kruk M. Porphyrin core dendrimers with ether-linked carbazole dendrons: dual luminescence of core and conformational flexibility of dendritic shell. *Macroheterocycles*, 2014, vol. 7, no. 3, pp. 240–248.

7. Kruk M. M., Krylov A. B. Energy transfer in dendrimers with porphyrin core. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2016, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 51–55 (In Russian).

8. Nguyen N. T., Verbelen B., Leen V., Waelkens E., Dehaen W., Kruk M. M. Excitation energy deactivation funnel in the 3-substituted BODIPY-porphyrin conjugate. *J. Luminescence*, 2016, vol. 179, pp. 306–313.

Информация об авторах

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by

Кленицкий Дмитрий Викентьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: klen@belstu.by

Information about the authors

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by

Klenitsky Dmitry Vikentievich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: klen@belstu.by

Поступила 30.12.2016

УДК 535.37+541.65+543.4

Д. В. Кленецкий, Н. Н. Крук

Белорусский государственный технологический университет

**ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ И ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ КРАСИТЕЛЕЙ
ПРИ СТАЦИОНАРНОМ ФОТОВОЗБУЖДЕНИИ**

Используя трехуровневую модель энергетических состояний молекул, в работе изучены процессы поглощения, флуоресценции и фосфоресценции при стационарном фотовозбуждении молекул с длительностью импульса, превышающей время жизни молекулы в триплетном состоянии. Показано, что населенности основного, первого возбужденного синглетного и нижнего триплетного состояний при фотовозбуждении очень быстро выходят на стационарные значения, которые зависят от плотности потока фотонов возбуждающего излучения. Найдены зависимости стационарных значений населенностей от констант скоростей рассматриваемых процессов. Установлено, что отношения населенностей в первом возбужденном и триплетном состояниях к населенности в основном состоянии линейно возрастают с плотностью потока возбуждающего излучения. В то время как отношение населенности в первом возбужденном синглетном состоянии к населенности в триплетном состоянии не зависит от плотности потока фотонов, а определяется отношением константы скорости интеркомбинационной конверсии к суммарной константе скорости дезактивации триплетного состояния. Получены соотношения для интенсивностей флуоресценции и фосфоресценции через квантовые выходы флуоресценции, фосфоресценции и интеркомбинационной конверсии в триплетное состояние. Интенсивности нелинейно зависят от плотности потока фотонов возбуждающего излучения. Исследована зависимость интенсивностей от квантового выхода интеркомбинационной конверсии в триплетное состояние.

Ключевые слова: флуоресценция, фосфоресценция, триплетное состояние, интеркомбинационная конверсия, константа скорости, квантовый выход.

D. V. Klenitsky, M. M. Kruk

Belarusian State Technological University

**FLUORESCENCE AND PHOSPHORESCENCE OF DYES
AT STATIONARY PHOTOEXCITATION**

The processes of absorption, fluorescence and phosphorescence at photoexcitation with pulses whose duration exceeds the triplet state lifetime have been studied. The populations of the ground state and first excited singlet and triplet states were shown to reach soon the steady values which depend on the photon flux density of excitation light. The dependencies of the steady populations have been found as the functions of the rate constants of respective processes. Both ratios of the populations of the first excited singlet state to that of the ground state and the first excited triplet state to that of the ground state are the linear functions of the photon flux density of excitation light, whereas the ratio of the populations of the first excited singlet to that of triplet state do not depend on it, but the results from the ratio of intersystem crossing rate constant to the sum of all the rate constants of triplet state deactivation. The intensities of fluorescence and phosphorescence were related to the quantum yields of the fluorescence, phosphorescence and intersystem crossing to the triplet state. These intensities have nonlinear dependence on the photon flux density of excitation light. The intensity dependences on the quantum yield of the intersystem crossing to the triplet state were studied.

Key words: fluorescence, phosphorescence, triplet state, intersystem crossing, rate constant, quantum yield.

Введение. Сложные органические соединения и супрамолекулярные системы на их основе широко используются в самых различных технологиях, а также играют большую роль в природе. Поэтому разработка новых доступных методов определения фотофизических характеристик сложных органических молекул и методов их диагностики является весьма актуальной научной и технической задачей [1]. Многие органические соединения обладают способностью флуоресцировать и фосфоресцировать при опти-

ческом возбуждении с квантовым выходом, достаточным для решения диагностических задач.

В отсутствие фотоиндуцированных конформационных перестроек молекулы процессы поглощения, флуоресценции и фосфоресценции органических молекул хорошо описываются трехуровневой энергетической схемой. Наряду с основным уровнем энергии S_0 у молекулы в этой схеме есть первый возбужденный уровень энергии S_1 , который имеет ту же мультиплетность, что и основной. Как правило, эти уровни являются

синглетными. Кроме того, в этой схеме присутствует имеющийся у большинства молекул триплетный уровень энергии T_1 . Он расположен несколько ниже первого возбужденного состояния. При фотовозбуждении молекула из основного состояния попадает на первый возбужденный уровень, переход на который из основного состояния разрешен. Далее у молекулы имеется три возможности: перейти в основное состояние с излучением фотона флуоресценции, дезактивироваться в основное состояние без излучения и, наконец, безызлучательно перейти в триплетное состояние. Процесс перехода в триплетное состояние называют интеркомбинационной конверсией. Фосфоресценция органических молекул обусловлена радиационной дезактивацией возбужденных триплетных состояний. Этот процесс конкурирует с безызлучательными переходами в основное состояние.

Каждый возможный процесс перехода между уровнями характеризуют константой скорости, определяющей долю числа молекул, перешедших на данный уровень. Константа скорости фотовозбуждения молекул k_{12} зависит от плотности потока фотонов возбуждающего излучения и сечения поглощения молекулы [2]. В случае возбуждающего импульса света с резким фронтом нарастания и спада плотность потока фотонов является постоянной величиной. Тогда константа скорости фотовозбуждения также не зависит от времени, т. е. $k_{12} \approx \text{const}$. Константа скорости интеркомбинационной конверсии k_{23}^d у большинства органических молекул сравнима по величине с константами флуоресценции k_{21} и безызлучательного перехода k_{21}^d либо превышает их, так что существенная доля поглотивших свет молекул может оказаться в триплетном состоянии. При определенных условиях константа скорости k_{31}^d безызлучательного перехода из триплетного состояния в основное уменьшается, что способствует увеличению вероятности фосфоресценции, т. е. увеличению константы скорости k_{31} фосфоресценции.

Целью данной работы является изучение интенсивности флуоресценции и фосфоресценции при стационарном фотовозбуждении с длительностью импульса, во много раз превышающей время жизни триплетного состояния. В этом случае за время импульса фотовозбуждения в системе успевает установиться детальное равновесие между населенностями электронных состояний. Так что число молекул, поступивших на данный уровень в единицу времени, будет равно числу молекул, покинувших уровень. Наблюдаемые интенсивности флуоресценции и фосфоресценции прямо пропорциональны числу радиационных переходов из первого возбужденного и триплетного состояний в основное соответственно:

$$I_{\text{фл}} = \beta k_{21} N_2, \quad I_{\text{фосф}} = \beta' k_{31} N_3, \quad (1)$$

где β, β' – коэффициенты пропорциональности; N_2, N_3 – концентрации молекул в момент времени t на уровнях энергии S_1, T_1 соответственно. В любой момент времени населенности должны удовлетворять уравнению, отражающему закон сохранения частиц:

$$N_1 + N_2 + N_3 = N_0, \quad (2)$$

где N_1 – концентрация молекул в момент времени t в основном состоянии S_0 ; N_0 – полная концентрация молекул.

Основная часть. Пренебрегая процессами переноса энергии между молекулами, населенности уровней энергии S_0, S_1, T_1 в момент времени t удовлетворяют системе кинетических балансных уравнений [3]:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -k_{12}x + k_2y + k_3z, \\ \frac{dy}{dt} = k_{12}x - (k_2 + k_{23}^d)y, \\ \frac{dz}{dt} = k_{23}^d y - k_3z, \end{cases} \quad (3)$$

где $k_2 = k_{21} + k_{21}^d$, $k_3 = k_{31} + k_{31}^d$. Переменные $x(t), y(t), z(t)$ определяют долю числа молекул от их общего количества N_0 в состояниях S_0, S_1, T_1 :

$$x(t) = \frac{N_1(t)}{N_0}, \quad y(t) = \frac{N_2(t)}{N_0}, \quad z(t) = \frac{N_3(t)}{N_0}. \quad (4)$$

Положительные слагаемые в уравнениях системы определяют скорость поступления молекул на данный уровень энергии, а отрицательные слагаемые – скорость ухода молекул с уровня. Начальные условия для переменных $x(t), y(t), z(t)$ имеют вид

$$x(0) = 1, \quad y(0) = z(0) = 0. \quad (5)$$

Решение системы (3), удовлетворяющее начальным условиям (5), для переменной $y(t)$ имеет следующий вид [3]:

$$y = C_1 e^{-\alpha_1 t} + C_2 e^{-\alpha_2 t} + y_0, \quad (6)$$

где α_1, α_2 и постоянные интегрирования C_1, C_2 сложно зависят от констант скоростей процессов, а стационарное значение y_0 определяется соотношением:

$$y_0 = \frac{k_{12}k_3}{k_{12}(k_3 + k_{23}^d) + k_3(k_2 + k_{23}^d)}. \quad (7)$$

Подставляя (6) во второе уравнение системы (3), найдем зависимость переменной x от времени:

$$x = A_1 e^{-\alpha_1 t} + A_2 e^{-\alpha_2 t} + x_0, \quad (8)$$

где постоянные значения A_1, A_2 также сложно зависят от констант скоростей процессов, а стационарное значение x_0 дается выражением

$$x_0 = \frac{k_2 + k_{23}^d}{k_{12}} y_0. \quad (9)$$

Переменную z , определяющую долю молекул в триплетном состоянии, найдем из закона сохранения частиц (2) с учетом (4):

$$z = 1 - x_0 - y_0 = z_0 - B_1 e^{-\alpha_1 t} - B_2 e^{-\alpha_2 t}, \quad (10)$$

где $B_1 = A_1 + C_1, B_2 = A_2 + C_2$, а стационарное значение z_0 определяется соотношением

$$z_0 = 1 - x_0 - y_0. \quad (11)$$

На рис. 1 показана зависимость от времени населенностей основного, первого возбужденного и триплетного состояний, вычисленных по формулам (6), (8), (10). Параметры, при которых выполнялись расчеты, взяты из работы [4]: $k_{12} = 750 \text{ с}^{-1}, k_2 = 10^8 \text{ с}^{-1}, k_3 = 10^3 \text{ с}^{-1}, k_{23}^d = 9 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$. Число молекул в основном состоянии сразу после включения фотовозбуждения уменьшается, стремясь к постоянному значению x_0 , а доля молекул в триплетном состоянии увеличивается, также стремясь к постоянному значению z_0 . Число молекул в первом возбужденном состоянии сначала резко возрастает, а затем относительно быстро падает к стационарному значению y_0 .

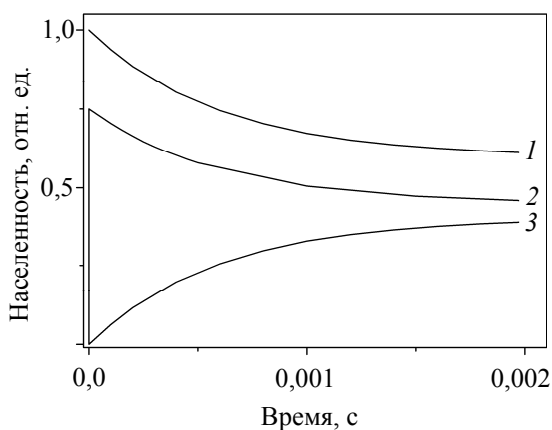


Рис. 1. Зависимость населенностей уровней энергии, нормированных на общее число частиц, от времени: 1 — населенность основного состояния N_1 ; 2 — населенность первого возбужденного состояния $N_2 \times 10^6$; 3 — населенность триплетного состояния N_3

Подставляя (7) в (9), а затем полученное соотношение в (11), найдем зависимость стационарных значений населенностей x_0 и z_0 от констант скоростей:

$$x_0 = \frac{k_3(k_2 + k_{23}^d)}{k_{12}(k_3 + k_{23}^d) + k_3(k_2 + k_{23}^d)}, \quad (12)$$

$$z_0 = \frac{k_{12}k_{23}^d}{k_{12}(k_3 + k_{23}^d) + k_3(k_2 + k_{23}^d)}. \quad (13)$$

Из (12) следует, что доля числа молекул в основном состоянии при увеличении константы скорости фотовозбуждения k_{12} постоянно уменьшается, стремясь к нулю. При этом, согласно (7), (13), доли числа частиц в первом возбужденном и триплетном состояниях увеличиваются, приближаясь к постоянным, не зависящим от k_{12} , значениям. Причем отношения населенностей в первом возбужденном и триплетном состояниях к населенности основного состояния линейно возрастают с увеличением константы скорости фотовозбуждения:

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{y_0}{x_0} = \frac{k_{12}}{k_2 + k_{23}^d}, \quad (14)$$

$$\frac{N_3}{N_1} = \frac{z_0}{x_0} = \frac{k_{23}^d}{k_3} \frac{k_{12}}{k_2 + k_{23}^d}. \quad (15)$$

Из (7) и (13) также следует, что отношение числа молекул в триплетном состоянии к числу молекул в первом возбужденном состоянии не зависит от константы скорости фотовозбуждения, а определяется только отношением константы скорости интеркомбинационной конверсии к суммарной константе скорости дезактивации триплетного состояния:

$$\frac{N_3}{N_2} = \frac{z_0}{y_0} = \frac{k_{23}^d}{k_3}. \quad (16)$$

Согласно (1) с учетом (4), интенсивности флуоресценции и фосфоресценции в стационарном режиме, нормированные на $I_0 = \beta N_0$ и $I_0 = \beta' N_0$ соответственно, определяются выражениями

$$I_{\text{фл}} = k_{21} y_0, \quad I_{\text{фосф}} = k_{31} z_0. \quad (17)$$

Подставляя (7), (13) в (17), данные интенсивности представим в виде

$$I_{\text{фл}} = \frac{k_{12} \Phi_{\text{фл}}}{k_{12}(\tau_{\text{T}} \Phi_{\text{T}} + \tau_{\text{фл}}) + 1}, \quad (18)$$

$$I_{\text{фосф}} = \frac{k_{12} \Phi_{\text{фосф}}}{k_{12}(\tau_{\text{T}} \Phi_{\text{T}} + \tau_{\text{фл}}) + 1}, \quad (19)$$

где $\Phi_{\text{фл}}, \Phi_{\text{фосф}}, \Phi_{\text{T}}$ — квантовые выходы флуоресценции, фосфоресценции и в триплетное состояние соответственно; $\tau_{\text{фл}}, \tau_{\text{T}}$ — времена жизни флуоресцентного и триплетного состояний

соответственно. Эти величины определяются константами скоростей рассматриваемых процессов по формулам

$$\Phi_{\text{фл}} = k_{21}\tau_{\text{фл}} = \frac{k_{21}}{k_2 + k_{23}^d}, \quad (20)$$

$$\Phi_{\text{фосф}} = k_{31}\tau_{\text{T}}\Phi_{\text{T}} = \frac{k_{31}}{k_3} \frac{k_{23}^d}{k_2 + k_{23}^d}, \quad (21)$$

$$\Phi_{\text{T}} = k_{23}^d\tau_{\text{фл}} = \frac{k_{23}^d}{k_2 + k_{23}^d}, \quad (22)$$

$$\tau_{\text{фл}} = \frac{1}{k_2 + k_{23}^d}, \quad \tau_{\text{T}} = \frac{1}{k_3}. \quad (23)$$

Согласно (18) и (19), интенсивности флуоресценции и фосфоресценции нелинейно зависят от константы скорости фотовозбуждения k_{12} . На рис. 2 и 3 эти зависимости показаны для различных значений квантовых выходов в триплетное состояние. Линии проведены при следующих значениях параметров: $\Phi_{\text{фл}} = 0,1$, $\Phi_{\text{фосф}} = 0,05$, $\tau_{\text{фл}} = 10^{-9}$ с, $\tau_{\text{T}} = 10^{-3}$ с.

На начальных участках графиков при малых значениях k_{12} , когда $k_{12}(\tau_{\text{T}}\Phi_{\text{T}} + \tau_{\text{фл}}) \ll 1$, интенсивности линейно зависят от константы скорости фотовозбуждения. Причем тангенсы углов наклона численно равны квантовым выходам флуоресценции и фосфоресценции. При увеличении k_{12} наблюдается отклонение интенсивностей от линейной зависимости. Чем больше квантовый выход в триплетное состояние, тем отклонение наступает раньше. При достаточно больших значениях k_{12} интенсивности стремятся к постоянным величинам, которые рассчитываются по формулам

$$I_{\text{фл}}^0 = \frac{\Phi_{\text{фл}}}{\tau_{\text{T}}\Phi_{\text{T}} + \tau_{\text{фл}}}, \quad (24)$$

$$I_{\text{фосф}}^0 = \frac{\Phi_{\text{фосф}}}{\tau_{\text{T}}\Phi_{\text{T}} + \tau_{\text{фл}}}.$$

С увеличением квантового выхода в триплетное состояние значения стационарных интенсивностей (24) флуоресценции и фосфоресценции уменьшаются.

Литература

1. Крук Н. Н. Методы определения квантового выхода образования триплетного состояния тетрапиррольных молекул // Успехи химии порфиринов. В 5 т. Т. 5. СПб.: НИИ химии СПбГУ, 2007. С. 236–249.
2. Фадеев В. В. Нелинейная флуориметрия как метод диагностики природных органических комплексов // Вестник Московского университета. Сер. 3. Физика. Астрономия. 1998. № 4. С. 49–57.
3. Кленицкий Д. В., Крук Н. Н. Влияние триплетного состояния на интенсивность флуоресценции красителей при стационарном фотовозбуждении // Труды БГТУ. 2016. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 56–60.

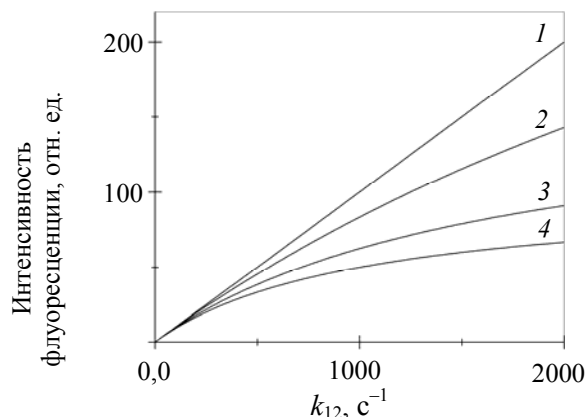


Рис. 2. Зависимость интенсивности флуоресценции от константы скорости фотовозбуждения при различных значениях квантовых выходов в триплетное состояние: 1 – $\Phi_{\text{T}} = 0$; 2 – $\Phi_{\text{T}} = 0,2$; 3 – $\Phi_{\text{T}} = 0,6$; 4 – $\Phi_{\text{T}} = 1$

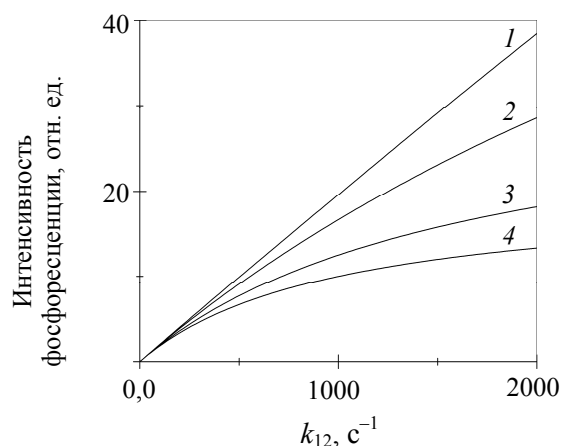


Рис. 3. Зависимость интенсивности фосфоресценции от константы скорости фотовозбуждения при различных значениях квантовых выходов в триплетное состояние: 1 – $\Phi_{\text{T}} = 0,02$; 2 – $\Phi_{\text{T}} = 0,2$; 3 – $\Phi_{\text{T}} = 0,6$; 4 – $\Phi_{\text{T}} = 1$

Заключение. Зависимости интенсивностей флуоресценции и фосфоресценции, полученные в этой работе, могут быть использованы для нахождения фотофизических характеристик сложных органических соединений. Для этого необходимо располагать точными абсолютными значениями плотности потока фотонов источника излучения, которая определяет константу скорости фотовозбуждения молекул.

4. Влияние нижнего триплетного состояния на кинетику уменьшения и восстановления интенсивности флуоресценции фотостойких органических флуорофоров / И. В. Станишевский [и др.] // ЖПС. 2013. Т. 80, № 3. С. 368–372.

References

1. Kruk M. M. Methods of determination of the triplet state formation quantum yield of tetrapyrrolic compounds. *Uspekhi khimii porfirinov. V 5 tomakh. Tom 5* [Advances in porphyrin chemistry. In 5 vol. Vol. 5]. St. Petersburg, NII khimii SPGU Publ., 2007, pp. 236–249 (In Russian).

2. Fadeev V. V. Nonlinear fluorimetry as a method of diagnostics of natural organic complexes. *Vestnik Moskovskogo universiteta* [Bulletin of the Moscow State University], series 3, Physics. Astronomy, 1998, no. 4, pp. 49–57 (In Russian).

3. Klenitsky D. V., Kruk M. M. The triplet state influence on the dyes fluorescence intensity upon steady-state photoexcitation. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2016, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 56–60 (In Russian).

4. Stanishevskiy I. V., Solov'yev K. N., Arabey S. M., Chernyavskiy V. A. The effect of the lower triplet state on the kinetics of the reduction and the recovery of fluorescence intensity photostability of organic fluorophores. *ZhPS* [JAS (Journal of Applied Spectroscopy)], 2013, vol. 80, no. 3, pp. 368–372 (In Russian).

Информация об авторах

Кленицкий Дмитрий Викентьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: klen@belstu.by

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by

Information about the authors

Klenitsky Dmitry Vikentievich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: klen@belstu.by

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by

Поступила 15.12.2016

УДК 538.9

И. И. Наркевич

Белорусский государственный технологический университет

**ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ
И СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ
НЕОДНОРОДНОЙ СИСТЕМЫ В РАМКАХ ДВУХУРОВНЕВОГО
МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОГО МЕТОДА**

В работе используются общие статистические уравнения и формулы, описывающие структуру и равновесные характеристики макроскопических неоднородных конденсированных многокомпонентных молекулярных систем. Они получены в рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода, который базируется на одновременном применении метода коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ) и метода условных распределений Л. А. Ротта, а также метода термодинамических функционалов плотности. В этом статистическом подходе однокомпонентная система рассматривается как гипотетическая двухкомпонентная система, состоящая из частиц двух сортов $\mu = a, v$. Частицы сорта a – это реальные молекулы рассматриваемой здесь чистой системы, а фиктивные частицы сорта v используются в статистическом подходе для учета вкладов от тепловых вакансий в кристаллическом состоянии вещества. В результате получена замкнутая система интегральных уравнений для потенциалов средних сил метода условных распределений. Ее решение определяет унарную и бинарную функции распределения молекул однокомпонентной системы, ее конфигурационный интеграл и свободную энергию.

Ключевые слова: методы ББГКИ и Л. А. Ротта, двухуровневый молекулярно-статистический подход, интегральные уравнения для потенциалов средних сил, конфигурационный интеграл, свободная энергия.

I. I. Narkevich

Belarusian State Technological University

**INTEGRAL EQUATIONS FOR THE POTENTIALS SECONDARY FORCES
AND FREE ENERGY INHOMOGENEOUS ONE-COMPONENT SYSTEM
WITHIN TWO-LEVEL MOLECULAR-STATISTICAL METHODS**

We use general statistical equations and formulas, evading the structure and equilibrium characteristics of macroscopic inhomogeneous condensed multicomponent molecular systems. They were obtained as part of a two-level molecular-statistical approach, which is based on the simultaneous application of the method of correlative functions Bogolyubov – Born – Green – Kirkwood – Yvon (BBGKY) and the method of conditional distributions L. A. Rott, as well as the method of thermodynamic density functional. This statistical approach, a one-component system is considered as a hypothetical two-component system, consisting of two kinds of particles $\mu = a, v$. The particles of type a – this is a real molecule net system and fictitious particles varieties considered here v used in the statistical approach to account for the contributions from thermal vacancies in the crystalline state of matter. The result is a closed system of integral equations for the potentials of average forces of the method of conditional distributions. Its solution determines the unary and binary distribution function of the molecules of a single-component system, its configuration integral and free energy.

Key words: BBGKY methods and L. A. Rott, two-level molecular-statistical approach, integral equations for average power potential, configuration integral, free energy.

Введение. На пути последовательного статистического описания структуры и равновесных характеристик конденсированных систем встречаются две серьезные проблемы, которые связаны с неизбежной необходимостью обрыва бесконечной цепочки интегродифференциальных уравнений и последующего решения вопроса о нормировочных множителях для коррелятивных функций распределения молекул разных сортов неоднородной системы. В связи с этим в разработанном ранее

двухуровневом молекулярно-статистическом подходе [1] одновременно используются возможности статистического описания свойств молекулярных систем, которые содержатся в двух независимых статистических методах – методе коррелятивных функций (метод ББГКИ для функций безусловных распределений молекул по всему объему V системы [2] и метод Л. А. Ротта [3] для условных распределений молекул по микрообъемам ω_i , на которые мысленно разделен весь объем V системы,

$V = \sum_{i=1}^M \omega_i$) и методе термодинамических функ-

ционалов плотности [4]. В результате ранее были получены выражения для условных нормированных коррелятивных функций распределения молекул разных сортов μ ($\mu = a, b, \dots$) в первом F_{11} -приближении с учетом наличия вакантных микроячеек (число M ячеек больше числа N реальных молекул системы). Эти ячейки рассматриваются как ячейки, занятые фиктивными частицами сорта ν , которые не взаимодействуют между собой и со всеми реальными молекулами, так что далее μ и $\nu = a, b, \dots, \nu$.

После обрыва бесконечной цепочки на втором уравнении получаются приближенные выражения для нормированных на единицу унарной $\hat{F}_{11}(\mathbf{q}_i^\mu)$ и бинарной $\hat{F}_{11}^{(1)}(\mathbf{q}_i^\mu, \mathbf{q}_j^\nu)$ функций распределения, которые содержат одночастичные потенциалы средних сил ϕ_{ik}, ϕ_{jk} и парный потенциал $\Phi_{ij}^{\mu\nu}$ для двух молекул сортов μ и ν , находящихся в двух разных ячейках с номерами i и j соответственно [1, 5, 6]:

$$\hat{F}_{11}(\mathbf{q}_i^\mu) = \frac{1}{Q_i^\mu} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i}^M \phi_{ik}(\mathbf{q}_i^\mu) \right\}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \hat{F}_{11}^{(1)}(\mathbf{q}_i^\mu, \mathbf{q}_j^\nu) = & \frac{1}{Q_{ij}^{\mu\nu}} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi_{ij}^{\mu\nu}(|\mathbf{q}_i^\mu - \mathbf{q}_j^\nu|) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{k \neq i, j}^M \phi_{ik}(\mathbf{q}_i^\mu) + \sum_{k \neq i, j}^M \phi_{jk}(\mathbf{q}_j^\nu) \right] \right\}, \quad (2) \end{aligned}$$

где \mathbf{q}_i^μ и \mathbf{q}_j^ν – радиус-векторы частиц сортов μ и ν , распределенных в ячейках ω_i и ω_j соответственно; $\theta = kT$, k – постоянная Больцмана, T – температура. Нормирующие множители $1/Q_i^\mu$ и $1/Q_{ij}^{\mu\nu}$ определяются следующими выражениями:

$$Q_i^\mu = \int_{\omega_i} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i}^M \phi_{ik}(\mathbf{q}_i^\mu) \right\} d\mathbf{q}_i^\mu, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{\mu\nu} = & \int_{\omega_i} \int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi_{ij}^{\mu\nu}(|\mathbf{q}_i^\mu - \mathbf{q}_j^\nu|) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{k \neq i}^M \phi_{ik}(\mathbf{q}_i^\mu) + \sum_{k \neq i, j}^M \phi_{jk}(\mathbf{q}_j^\nu) \right] \right\} d\mathbf{q}_i^\mu d\mathbf{q}_j^\nu. \quad (4) \end{aligned}$$

Одночастичные потенциалы ϕ средних сил находятся из решения следующей замкнутой системы интегральных уравнений [6]:

$$\begin{aligned} & \frac{n_i^\mu}{Q_i^\mu} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \phi_{ij}(\mathbf{q}_i^\mu) \right\} = \\ & = \sum_{\nu} \frac{n_{ij}^{\mu\nu}}{Q_{ij}^{\mu\nu}} \int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi_{ij}^{\mu\nu} + \sum_{k \neq i, j}^M \phi_{jk}(\mathbf{q}_j^\nu) \right] \right\} d\mathbf{q}_j^\nu. \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь n_i^μ – числа заполнения одиночных ячеек ω_i частицами сорта μ ($\mu = a, b, \dots, \nu$), которые определяют вероятность того, что в ячейке объемом ω_i статистически распределена частица сорта μ ; $n_{ij}^{\mu\nu}$ – числа заполнения для всевозможных пар ячеек ω_i и ω_j , причем частица сорта μ находится в ячейке ω_i , а частица сорта ν – в ячейке ω_j , что соответствует первому F_{11} -приближению метода условных распределений Л. А. Ротта.

С помощью уравнения Гиббса – Гельмгольца для потенциальной части внутренней энергии системы получено статистическое выражение для конфигурационного интеграла неоднородной многокомпонентной системы [6]:

$$Q_N = \prod_{i=1}^M \omega_i^{-n_i^\nu} \prod_{\mu} \prod_{i=1}^M \left(\frac{Q_i^\mu}{n_i^\mu} \right)^{n_i^\mu} \prod_{\mu, \nu} \prod_{i, j} \prod_{j \neq i} \left(\frac{Q_{ij}^{\mu\nu} n_i^\mu n_j^\nu}{Q_i^\mu Q_j^\nu n_{ij}^{\mu\nu}} \right)^{n_{ij}^{\mu\nu}/2}. \quad (6)$$

Для конфигурационного интеграла Q_N как функционала от дискретных полей одноячеечных n_i^μ и двухъячеечных $n_{ij}^{\mu\nu}$ чисел заполнений решена вариационная задача и установлена связь между бинарными $n_{ij}^{\mu\nu}$ и унарными n_i^μ дискретными полями чисел заполнения ячеек частицами двухкомпонентной системы ($\mu, \nu = a, b$) [6]:

$$\begin{aligned} n_{ij}^{ab} = & \frac{1}{2A_{ij}} \left\{ \left[A_{ij} (n_j^b - n_i^b) - 1 \right] + \right. \\ & \left. + \sqrt{\left[A_{ij} (n_j^b - n_i^b) - 1 \right]^2 + 4n_i^a n_j^b A_{ij}} \right\}, \quad (7) \end{aligned}$$

$$n_{ij}^{aa} = n_i^a - n_{ij}^{ab}, \quad n_{ij}^{bb} = n_j^b - n_{ij}^{ab}, \quad n_{ij}^{ba} = n_i^b - n_j^b + n_{ij}^{ab}, \quad (8)$$

$$\text{где } A_{ij} = Q_{ij}^{aa} Q_{ij}^{bb} / (Q_{ij}^{ab} Q_{ij}^{ba}) - 1. \quad (9)$$

Решение системы (5) с учетом уравнений связи (7–9) определяет потенциалы средних сил для молекул сорта μ ($\mu = a, b$), которые являются функциями радиус-векторов \mathbf{q}_i^μ молекул ($\mathbf{q}_i^\mu \in \omega_i$), распределенных в ячейках ω_i , и функционалами от неоднородного поля унарной плотности, описываемой дискретным полем чисел заполнения n_i^ε ($\varepsilon = 1, 2, \dots, M$), т. е. здесь и далее потенциал

$$\phi_{ij}(\mathbf{q}_i^\mu) \equiv \phi_{ij}(\mathbf{q}_i^\mu, \{n_i^\varepsilon\}); \quad \mu, \varepsilon = a, b. \quad (10)$$

Структура полученных выражений (1), (2) и уравнения (5) указывает на их инвариантность по отношению к сдвигу потенциалов средних сил на произвольные константы, от которых не зависит конфигурационный интеграл Q_N (формула (6)), а следовательно, и свободная энергия системы.

Основная часть. Применим общие соотношения (1)–(10), полученные для многокомпонентных систем, к описанию свойств чистой,

т. е. однокомпонентной системы. В этом случае система формально является двухкомпонентной, состоящей из реальных частиц ($\mu = a$) и фиктивных частиц ($\mu = v$), соответствующих пустым ячейкам (вакансиям). Учтем далее в явном виде, что частицы сорта v не взаимодействуют между собой и с реальными частицами сорта a . Это означает, что в развиваемом статистическом подходе чистая система изоморфна бинарной (двухкомпонентной) системе с парными потенциалами взаимодействия, удовлетворяющими следующим соотношениям:

$$\Phi_{ij}^{aa} \equiv \Phi(|\mathbf{q}_i^a - \mathbf{q}_j^a|), \quad \Phi_{ij}^{av} = \Phi_{ij}^{va} = \Phi_{ij}^{vv} = 0. \quad (11)$$

Выражение (4) для функционалов Q_{ij}^{uv} преобразуем с учетом (11). Получим:

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{aa} &= \int_{\omega_i} \int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^a) + \Phi(|\mathbf{q}_i^a - \mathbf{q}_j^a|) + \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{jk}(\mathbf{q}_j^a) \right] \right\} d\mathbf{q}_i^a d\mathbf{q}_j^a = \\ &= Q_{j(i)}^a \int_{\omega_j} \frac{\exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi(|\mathbf{q}_i^a - \mathbf{q}_j^a|) + \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\mathbf{q}_j^a) \right] \right\} d\mathbf{q}_j^a}{Q_{j(i)}^a} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{\sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^a)}{\theta} \right\} d\mathbf{q}_i^a = Q_{j(i)}^a Q_{i(j)}^{a(a)}. \quad (12) \end{aligned}$$

Здесь используются следующие вспомогательные функционалы:

$$Q_{j(i)}^a = \int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{jk}(\mathbf{q}_j^a) \right\} d\mathbf{q}_j^a, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \Phi_{ij}^{(a)}(\mathbf{q}_i^a) \right\} &= \\ &= \frac{\int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi(|\mathbf{q}_i^a - \mathbf{q}_j^a|) + \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{jk}(\mathbf{q}_j^a) \right] \right\} d\mathbf{q}_j^a}{Q_{j(i)}^a}, \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_{i(j)}^{a(a)} &= \int_{\omega_i} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi_{ij}^{(a)}(\mathbf{q}_i^a) + \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^a) \right] \right\} d\mathbf{q}_i^a. \quad (15) \end{aligned}$$

Аналогичные преобразования с учетом (11) для остальных функционалов Q_{ij}^{uv} приводят к еще трем соотношениям:

$$Q_{ij}^{vv} = Q_{i(j)}^v Q_{j(i)}^v, \quad (16)$$

$$Q_{ij}^{av} = Q_{i(j)}^a Q_{j(i)}^v, \quad (17)$$

$$Q_{ij}^{va} = Q_{i(j)}^v Q_{j(i)}^a, \quad (18)$$

где

$$Q_{i(j)}^v = \int_{\omega_i} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^v) \right\} d\mathbf{q}_i^v. \quad (19)$$

Систему интегральных уравнений (5) при $\mu, v = a, v$ перепишем в развернутом виде с учетом соотношений (11)–(19):

$$\begin{aligned} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \Phi_{ij}(\mathbf{q}_i^a) \right\} &= \frac{n_{ij}^{av} Q_i^a}{n_i^a Q_{i(j)}^a} + \\ &+ \frac{n_{ij}^{aa} Q_i^a}{n_i^a Q_{ij}^{aa}} \int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi(|\mathbf{q}_i^a - \mathbf{q}_j^a|) + \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{jk}(\mathbf{q}_j^a) \right] \right\} d\mathbf{q}_j^a, \quad (20) \end{aligned}$$

$$\exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \Phi_{ij}(\mathbf{q}_i^v) \right\} = \frac{n_{ij}^{vv} Q_i^v}{n_i^v Q_{i(j)}^v} + \frac{n_{ij}^{va} Q_i^v}{n_i^v Q_{i(j)}^v} = \text{const}. \quad (21)$$

Поскольку $n_{ij}^{vv} + n_{ij}^{va} = n_i^v$ (см. формулы (8) при $b = v$), то уравнение (21) для потенциалов фиктивных частиц сорта v (вакансий) упрощается:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \Phi_{ij}(\mathbf{q}_i^v) \right\} &= \\ &= \frac{\int_{\omega_i} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi_{ij}(\mathbf{q}_i^v) + \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^v) \right] \right\} d\mathbf{q}_i^v}{\int_{\omega_i} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^v) \right\} d\mathbf{q}_i^v}. \quad (22) \end{aligned}$$

Структура уравнения (22) такова, что оно выполняется для любых потенциалов $\Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^v) = \text{const}$, как этого и требует уравнение (21). Учитывая свойство инвариантности всех уравнений, выполним перенормировку (сдвиг) потенциалов $\Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^v)$ так, чтобы новые потенциалы $\Phi_{ik}^*(\mathbf{q}_i^v)$ были тождественно равны нулю, т. е. $\Phi_{ik}^*(\mathbf{q}_i^v) = 0$. В связи с этим в дальнейшем предстоит решать только уравнения системы (20).

Интегральные уравнения для перенормированных потенциалов средних сил однокомпонентной неоднородной системы. Домножим и разделим интегральный член уравнения (20) на $Q_{j(i)}^a$ и примем во внимание выражение для Q_i^a (формула (3) при $\mu = a$) и

$Q_{i(j)}^a$, которое аналогично формуле (13). Тогда получим:

$$\begin{aligned} & \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}(\mathbf{q}_i^a)\right\} = \\ & = \frac{n_{ij}^{av}}{n_i^a} \int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\Phi_{ij}(\mathbf{q}_i^a) + \sum_{k \neq i,j}^M \Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^a)\right]\right\} d\mathbf{q}_i^a + \\ & + \frac{n_{ij}^{aa}}{n_i^a} K_{ij} \frac{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\Phi_{ij}(\mathbf{q}_i^a - \mathbf{q}_j^a) + \sum_{k \neq i,j}^M \Phi_{jk}(\mathbf{q}_j^a)\right]\right\} d\mathbf{q}_j^a}{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\sum_{k \neq i,j}^M \Phi_{jk}(\mathbf{q}_j^a)\right\} d\mathbf{q}_j^a}, \quad (23) \end{aligned}$$

где

$$K_{ij} = \frac{Q_i^a Q_{j(i)}^a}{Q_{ij}^{aa}} = \frac{Q_i^a Q_{j(i)}^a}{Q_{j(i)}^a Q_{i(j)}^{a(a)}} = \frac{Q_i^a}{Q_{i(j)}^{aa}}. \quad (24)$$

Используя свойство инвариантности, выполним перенормировку всех потенциалов, которые входят в (23) и (24):

$$\begin{aligned} \Phi_{ij}(\mathbf{q}_i^a) &= \Phi_{ij}^*(\mathbf{q}_i) - \delta_{ij}(a), \\ \Phi_{ik}(\mathbf{q}_i^a) &= \Phi_{ik}^*(\mathbf{q}_i) - \delta_{ik}(a), \\ \Phi_{jk}(\mathbf{q}_j^a) &= \Phi_{jk}^*(\mathbf{q}_j) - \delta_{jk}(a). \end{aligned} \quad (25)$$

Подставим (25) во все выражения в уравнении (23), кроме введенного выше функционала K_{ij} . Если в преобразованном после этого уравнении положить

$$\exp\left\{\frac{1}{\theta}\delta_{ij}(a)\right\} = K_{ij}, \quad (26)$$

то получим следующую замкнутую систему интегральных уравнений для перенормированных потенциалов Φ^* :

$$\begin{aligned} & \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}^*(\mathbf{q}_i)\right\} = \\ & = \frac{n_{ij}^{aa}}{n_i^a} \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}^*(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|)\right\} \right\rangle_j^* + \\ & + \frac{n_{ij}^{av}}{n_i^a} \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}^*(\mathbf{q}_i)\right\} \right\rangle_i^*. \quad (27) \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{q}_i \equiv \mathbf{q}_i^a$, $\mathbf{q}_j \equiv \mathbf{q}_j^a$, а угловые скобки $\langle \dots \rangle_j^*$ означают усреднение по \mathbf{q}_j в ячейке ω_j , выполненное с помощью вспомогательной нормированной на единицу функции:

$$\hat{F}_{11}^*(\mathbf{q}_j) = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\sum_{k \neq i,j}^M \Phi_{jk}^*(\mathbf{q}_j)\right\}}{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\sum_{k \neq i,j}^M \Phi_{jk}^*(\mathbf{q}_j)\right\} d\mathbf{q}_j}. \quad (28)$$

Усредним левую и правую части интегрального уравнения (27) по $\mathbf{q}_i \in \omega_i$. Для этого домножим его на функцию $\hat{F}_{11}^*(\mathbf{q}_i)$ и выполним интегрирование по $\mathbf{q}_i \in \omega_i$. В результате получим интегральное условие

$$\left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}^*(\mathbf{q}_i)\right\} \right\rangle_i^* = \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}^{(a)}(\mathbf{q}_i)\right\} \right\rangle_i^*, \quad (29)$$

которое утверждает, что среднее значение экспоненты от перенормированного потенциала $\Phi_{ij}^*(\mathbf{q}_i)$ равно среднему значению экспоненты от вспомогательного потенциала $\Phi_{ij}^{(a)*}(\mathbf{q}_i)$, определяемого соотношением (14). Условие (29) можно записать в следующем виде:

$$\frac{Q_i^{a*}}{Q_{i(j)}^{a*}} = \frac{Q_{i(j)}^{a(a)*}}{Q_{i(j)}^{a*}} \Rightarrow \frac{Q_{i(j)}^{a(a)*}}{Q_i^{a*}} = 1. \quad (30)$$

Это означает, что перенормировка (26) для потенциалов Φ накладывает на новые потенциалы Φ^* условие (30). В дальнейшем знак $*$, определяющий перенормированные потенциалы, будем опускать.

При решении системы (27) следует принять во внимание выражения (7), (8) при $b = v$ для вероятностных функций, т. е. чисел заполнения ячеек:

$$\begin{aligned} n_{ij}^{av} &= \frac{1}{2} \left\{ (n_j^v - n_i^v) - A_{ij}^{-1} + \right. \\ & \left. + \sqrt{\left[(n_j^v - n_i^v) - A_{ij}^{-1} \right]^2 + 4n_i^a n_j^v A_{ij}^{-1}} \right\}, \quad (31) \end{aligned}$$

$$n_{ij}^{aa} = n_i^a - n_{ij}^{av}, \quad n_{ij}^{vv} = n_j^v - n_{ij}^{av}, \quad n_{ij}^{va} = n_i^v - n_{ij}^{vv}. \quad (32)$$

Учитывая тот факт, что исходные парные потенциалы определяются соотношениями (11), выражение (9) для коррелятора A_{ij} преобразуется к следующему виду (см. формулы (12)–(19) с учетом того, что потенциалы $\Phi_{ik}^*(\mathbf{q}_i^v) = 0$:

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \frac{Q_{ij}^{aa} Q_{ij}^{vv}}{Q_{ij}^{av} Q_{ij}^{va}} - 1 = \frac{Q_{ij}^{aa}}{Q_{i(j)}^a Q_{j(i)}^a} - 1 = \\ &= \frac{Q_{i(j)}^{a(a)}}{Q_{i(j)}^a} - 1 = \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}^{(a)}(\mathbf{q}_i)\right\} \right\rangle_i^* - 1. \quad (33) \end{aligned}$$

Заметим, что, как и должно быть, коррелятор A_{ij} является инвариантом преобразования (25),

поскольку в соответствии с (33) выражается через среднее значение вспомогательного потенциала $\varphi_{ij}^{(a)}$ (см. формулу (14)).

Функционал свободной энергии однокомпонентной неоднородной системы. Свободная энергия системы также инвариантна относительно перенормировки (25). Поэтому выражение для функционала свободной энергии $F\{n_l^\varepsilon\}$ системы с неоднородными полями чисел заполнения n_l^ε ($\varepsilon = a, v; l = 1, 2, \dots, M$), которое соответствует конфигурационному интегралу (6) при $\mu, \nu = a, v$, запишем сразу через перенормированные потенциалы φ , причем знак * опускаем:

$$F\{n_l^\varepsilon\} = -\theta \ln Q_N = \theta \left\{ \sum_{i=1}^M n_i^v \ln \omega_i - \sum_{i=1}^M \left[\sum_{\mu=a,v} n_i^\mu \ln \frac{Q_i^\mu}{n_i^\mu} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \sum_{\mu, \nu=a,v} n_{ij}^{\mu\nu} \ln \frac{Q_{ij}^{\mu\nu} n_i^\mu n_j^\nu}{Q_i^\mu Q_j^\nu n_{ij}^{\mu\nu}} \right] \right\}. \quad (34)$$

Здесь при $\mu = a$ функционал

$$Q_i^a = \int_{\omega_i} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{j \neq i} \varphi_{ij}(\mathbf{q}_i) \right\} d\mathbf{q}_i \equiv Q_i, \quad (35)$$

а аналогичный функционал при $\mu = v$

$$Q_i^v \equiv \omega_i, \quad (36)$$

поскольку перенормированные потенциалы средних сил для вакансий тождественно равны нулю.

Преобразуем далее соотношения $Q_{ij}^{\mu\nu} / (Q_i^\mu Q_j^\nu)$ с учетом полученных выше выражений (12)–(19) для $Q_{ij}^{\mu\nu}$ и условия (29).

При $\mu = \nu = a$ получим:

$$\begin{aligned} \frac{Q_{ij}^{aa}}{Q_i^a Q_j^a} &= \frac{Q_{j(i)}^a Q_{i(j)}^{a(a)}}{Q_i^a Q_j^a} = \\ &= \frac{\left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}^{(a)}(\mathbf{q}_i) \right\} \right\rangle_i^*}{\left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(\mathbf{q}_i) \right\} \right\rangle_i^* \left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ji}(\mathbf{q}_j) \right\} \right\rangle_j^*} = \\ &= \frac{1}{\left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ji}(\mathbf{q}_j) \right\} \right\rangle_j^*}. \end{aligned} \quad (37)$$

Если при интегрировании в (12) поменять местами порядок интегрирования по ω_i и ω_j , то имеем:

$$\frac{Q_{ij}^{aa}}{Q_i^a Q_j^a} = \frac{Q_{i(j)}^a Q_{j(i)}^{aa}}{Q_i^a Q_j^a} = \frac{1}{\left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(\mathbf{q}_i) \right\} \right\rangle_i^*}. \quad (38)$$

Из сравнения (37) и (38) следует, что

$$\left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(\mathbf{q}_i) \right\} \right\rangle_i^* = \left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ji}(\mathbf{q}_j) \right\} \right\rangle_j^*. \quad (39)$$

Аналогично, учитывая (39), получим:

$$\begin{aligned} \frac{Q_{ij}^{av}}{Q_i^a Q_j^v} &= \frac{1}{\left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(\mathbf{q}_i) \right\} \right\rangle_i^*} = \frac{Q_{ij}^{va}}{Q_i^v Q_j^a}, \quad (40) \\ \frac{Q_{ij}^{vv}}{Q_i^v Q_j^v} &= 1, \quad (Q_{i(j)}^v = Q_i^v = \omega_i). \end{aligned} \quad (41)$$

Примем во внимание, что поля n_l^ε ($\varepsilon = a, v; l = 1, 2, \dots, M$) взаимосвязаны, поскольку $n_i^a + n_i^v = 1$. В качестве независимого выберем поле чисел заполнения для реальных частиц ($n_l = n_l^a$). Тогда все функционалы будут зависеть только от n_l ($n_l^v = 1 - n_l$), и для свободной энергии (34) чистой (однокомпонентной) неоднородной системы с учетом (37)–(41) получим следующее функциональное выражение:

$$\begin{aligned} F\{n_l\} &= -\theta \left\{ \sum_{i=1}^M [n_i \ln Q_i - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} (n_i + n_j - n_{ij}^{aa}) \ln \left\langle f_{ij} \right\rangle_i^* \right] - \\ &\quad \left. - \sum_{i=1}^M \left[\sum_{\mu=a,v} n_i^\mu \ln n_i^\mu + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \sum_{\mu, \nu=a,v} n_{ij}^{\mu\nu} \ln \left(\frac{n_{ij}^{\mu\nu}}{n_i^\mu n_j^\nu} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь $\left\langle f_{ij} \right\rangle_i^* = \left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(\mathbf{q}_i) \right\} \right\rangle_i^*$, а вероятностные функции $n_{ij}^{\mu\nu}$, определяемые выражениями (31) и (32), следует рассматривать как функционалы только от поля унарных вероятностей n_l ($n_l^v = 1 - n_l$).

Анализируя окончательное выражение (42), заметим, что свободная энергия состоит из двух частей, определяемых выражениями в квадратных скобках под знаком суммирования по индексу i . Первая такая сумма непосредственно зависит от взаимодействия между молекулами рассматриваемой однокомпонентной системы, а вторая, содержащая слагаемые $n_i^\mu \ln n_i^\mu$ и $n_{ij}^{\mu\nu} \ln n_{ij}^{\mu\nu}$, учитывает энтропийный вклад от

унарных и бинарных макроскопических, т. е. сглаженных по микрообъемам ω_i , полей плотностей n_i^u и n_{ij}^{uv} .

В случае однородной системы из (42) получается выражение для свободной энергии, которое используется в работе [7] для статистического описания фазового перехода кристалл – жидкость.

Полученная в результате перенормировки замкнутая система интегральных уравнений (27) совместно с (31)–(33) определяет потенциалы средних сил как функционалы от некоторого поля унарной плотности, а выражение (42) для функционала свободной энергии неоднородной однокомпонентной системы позволяет провести исследование ее термодинамических свойств.

Заключение. Приведем еще один пример возможной перенормировки потенциалов средних сил. В рассмотренной выше перенормировке (26) соблюдается интегральное условие (29), которое перепишем здесь, используя обозначения:

$$f_{ij}(\mathbf{q}_i) \equiv \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}(\mathbf{q}_i)\right\}, f_{ij}^{(a)} \equiv \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}^{(a)}(\mathbf{q}_i)\right\}.$$

В этих обозначениях условие (29) имеет следующий вид:

$$\langle f_{ij} \rangle_i^* = \langle f_{ij}^{(a)}(\mathbf{q}_i) \rangle_i^*. \quad (43)$$

Потребуем, чтобы для новых потенциалов $\Phi_{ij}^*(\mathbf{q}_i)$ вместо (43) выполнялось соотношение

$$\langle f_{ij}^*(\mathbf{q}_i) \rangle_i^* = \frac{n_{ij}^{aa}}{n_i^a} \langle f_{ij}^{(a)}(\mathbf{q}_i) \rangle_i^* + \frac{n_{ij}^{av}}{n_i^a}, \quad (44)$$

которое позволяет записать и использовать новую замкнутую систему интегральных уравнений:

$$\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}^*(\mathbf{q}_i)\right\} = \frac{n_{ij}^{aa}}{n_i^a} \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)\right\} \right\rangle_i^* + \frac{n_{ij}^{av}}{n_i^a}, \quad (45)$$

где

$$n_{ij}^{av} = n_i^a n_j^v P_{ij}^{av}, \quad v = a, v. \quad (46)$$

Функционал свободной энергии выразим через ее плотность $f_i\{n_l\}$:

$$F\{n_l\} = \sum_{i=1}^M f_i\{n_l\} \omega_i. \quad (47)$$

С учетом (44)–(46) и общего выражения (34) плотность $f_i\{n_l\}$ может быть записана в следующем виде:

$$f_i\{n_l\} = -\frac{\theta}{\omega_i} \left\{ n_i \ln Q_i - n_i \ln n_i - (1 - n_i) \ln(1 - n_i) - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^M \left[(n_i + n_j) \ln \langle f_{ij} \rangle_i^* - n_{ij} \ln \langle f_{ij}^{(a)} \rangle_i^* + \sum_{\mu, v} n_{ij}^{\mu v} \ln P_{ij}^{\mu v} \right] \right\}. \quad (48)$$

Заметим, что на основании (48) при выполнении интегрального условия (43) формула (47) совпадает с ранее полученным выражением (42).

Запишем также уравнение для функционала большого термодинамического потенциала $\Omega\{n_l\} = -\mu \sum_{i=1}^M n_i + F\{n_l\}$, соответствующего открытой неоднородной системе с химическим потенциалом μ :

$$\Omega\{n_l\} = -\mu \sum_{i=1}^M n_i + \sum_{i=1}^M \omega_i f_i\{n_l\}. \quad (49)$$

Литература

1. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. СПб., 1993. 242 л.
2. Боголюбов Н. Н. Избранные труды. В 3 т. Т. 2. Киев: Наук. думка, 1970. 523 с.
3. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.
4. Evans R. The nature of the liquid-vapour interface and other topics in the statistical mechanics of nonuniform, classical fluids // *Advances in Physics*. 1979. Vol. 28, no. 2. P. 143–200.
5. Narkevich I. I. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory // *Physica*. 1982. Vol. 112A. P. 167–192.
6. Наркевич И. И. Метод множителей Лагранжа в проблеме нормировки коррелятивных функций многокомпонентного кристалла с вакансиями // *Высококачественные вещества*. 1990. № 1. С. 67–75.
7. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В. Единая статистическая модель кристаллического, жидкого и газообразного состояний вещества // *Вести НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук*. 2011. № 3. С. 71–79.

References

1. Narkevich I. I. *Molekulyarno-statisticheskaya teoriya neodnorodnykh kondensirovannykh sred. Diss. dokt. fiz.-mat. nauk* [Molecular-statistical theory of the non-homogeneous condensed matter. Doct. Diss.]. St. Petersburg, 1993. 242 p.

2. Bogolubov N. N. *Izbrannyye trudy. V 3 tomakh. Tom 2* [Selected Works. In 3 vol. Vol. 2]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1970. 523 p.

3. Rott L. A. *Statisticheskaya teoriya molekulyarnykh sistem* [Statistical theory of molecular systems]. Moscow, Nauka Publ., 1979. 280 p.

4. Evans R. The nature of the liquid-vapour interface and other topics in the statistical mechanics of nonuniform, classical fluids. *Advances in Physics*, 1979, vol. 28, no. 2, pp. 143–200.

5. Narkevich I. I. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory. *Physica*, 1982, vol. 112A, pp. 167–192.

6. Narkevich I. I. Lagrange multiplier method in the problem of normalization of the correlation functions of multicomponent crystal with vacancies. *Vysokochistyye veshchestva* [High-Purity substances], 1990, no. 1, pp. 67–75 (In Russian).

7. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Optional statistical model of crystalline, liquid and gaseous states of matter. *Vesti NAN Belarusi* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus], series Physical-mathematical sciences, 2011, no. 3, pp. 71–79 (In Russian).

Информация об авторе

Наркевич Иван Иванович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: inarkevich@mail.ru

Information about the author

Narkevich Ivan Ivanovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: inarkevich@mail.ru

Поступила 10.12.2016

УДК 531.19; 538.911

Г. С. Бокун, И. И. Наркевич

Белорусский государственный технологический университет

**КОМПЬЮТЕРНОЕ ПОСТРОЕНИЕ
АЛМАЗНОЙ РЕШЕТКИ И ЕЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ
ДЛЯ РАСЧЕТА УНАРНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
АТОМОВ УГЛЕРОДА В СФЕРИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЕ**

Ранее выполненная алгоритмизация двухуровневого молекулярно-статистического подхода использована для разработки компьютерной программы по расчету унарных функций распределения атомов углерода в алмазоподобных сферических наночастицах. С помощью этих функций определены среднеквадратичные отклонения атомов углерода от узлов алмазной решетки и обнаружена ее пространственная релаксация вблизи границы сферической наночастицы. При этом одновременно наблюдается делокализация приповерхностных атомов, которая приводит к плавлению наночастиц разных размеров при различных температурах.

Ключевые слова: наночастицы, двухуровневый молекулярно-статистический подход, коррелятивные функции условных распределений, релаксация решетки, фазовые переходы.

G. S. Bokun, I. I. Narkevich

Belarusian State Technological University

**COMPUTER DIAMOND LATTICE BUILDING
AND ITS USE FOR CALCULATION UNARY DISTRIBUTION FUNCTIONS
OF ATOMS OF CARBON IN SPHERICAL NANOPARTICLES**

Previously made algorithmization of two-level molecular-statistical approach is used to develop a computer program for the calculation of unary functions of distribution of carbon atoms in the diamond spherical nanoparticles. With these functions, standard deviations of carbon atoms from the lattice sites of the diamond were calculated and its pro-spatial relaxation close to spherical nanoparticles border was found. At the same time, given delocalization is observed near surface atoms, which leads to the melting of nanoparticles of various sizes at different temperatures.

Key words: nanoparticles, two-level molecular-statistical approach, correlative function of conditional distributions, lattice relaxation, phase transitions.

Введение. Наночастицы с алмазоподобной структурой, благодаря наличию прочных ковалентных связей между соседними атомами углерода, характеризуются четко выраженной решеточной структурой и поэтому являются удобными объектами исследования в рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода [1], который базируется на одновременном использовании метода условных распределений Л. А. Ротта, метода Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ) и метода термодинамических функционалов плотности для пространственно неоднородных систем. В данной работе реализуется первый микроскопический уровень описания структуры таких наночастиц, который связан с расчетом унарных функций распределения атомов углерода в окрестности узлов кристаллической решетки. В качестве характеристик, описывающих микроструктуру наночастиц, используются два первых момента этих функций, позволяющих описывать степень локализации атомов углерода возле узлов решетки и рассчитывать поля их смещений,

описывающие пространственную релаксацию алмазной решетки вблизи границы наночастицы. Имеющаяся возможность расчета микрохарактеристик распределения атомов углерода в наночастицах разных размеров при различных значениях термодинамических параметров позволяет исследовать температурные и размерные эффекты для наночастиц, определяющие уникальные свойства наноструктурированных систем.

Основная часть. Аналитические преобразования и последующие численные расчеты будем проводить, как и ранее [2], для наносистем в кристаллическом состоянии. В этом случае нормированную на единицу унарную функцию $\hat{F}_{11}(x, y, z)$ в F_{11} -приближении метода условных распределений, которая имеет резкие пики в окрестности узлов, заменим на вспомогательную функцию \hat{F}_{11}^* с равномерным распределением молекул внутри сфер с радиусами b_i , центры которых совпадают с узлами решетки ($i = 1, 2, \dots, M$). Параметры b_i подбираем так, чтобы среднеквадратичные отклонения σ_i атомов или молекул от

узлов решетки были равными для функций \hat{F}_{11} и \hat{F}_{11}^* :

$$\sigma_i^2 = \int_{\omega_i} r^2 \hat{F}_{11}(x, y, z) d\omega_i = \frac{3}{5} b_i^2, \quad (1)$$

$$\hat{F}_{11}(\bar{q}_i) = A_i \exp \left\{ -\beta \sum_{j \neq i}^M \varphi_j(\bar{p}_{ij}) \right\}. \quad (2)$$

Здесь \bar{q}_i и x, y, z – соответственно радиус-вектор и координаты частицы (атома или молекулы) в системе координат, связанной с центром элементарной ячейки ω_i , на которые мысленно разделен весь объем V изучаемой наносистемы $\left(V = \sum_{i=1}^M \omega_i \right)$; A_i – нормирующий множитель для функции $\hat{F}_{11}(\bar{q}_i)$; $\beta = 1/\theta$ – обратная температура; φ_j – средний потенциал, который здесь используется для аппроксимации потенциалов средних сил метода условных распределений, а суммирование проводится по всем узлам решетки; \bar{p}_{ij} – радиус-вектор молекулы в ячейке ω_j по отношению к системе координат, начало которой совмещено с центром ячейки ω_j .

Для короткодействующих потенциалов можно ограничиться суммированием по узлам, принадлежащим нескольким ближайшим координационным сферам по отношению к центру ячейки ω_i . Введенная функция \hat{F}_{11}^* позволяет аналитически выполнить усреднение потенциала Леннарда – Джонса с параметрами σ и ϵ , который используем в безразмерных переменных ($r^* = r/\sigma$ и $\Phi^*(r) = \Phi(r)/\epsilon$, далее звездочки опускаем).

Средний потенциал $\varphi(\rho)$ находим путем усреднения потенциала $\Phi(r)$ с учетом корреляции в расположении двух молекул внутри своих сфер радиусами b и β . Поэтому при усреднении учитываем, что они не могут находиться на расстояниях меньше, чем d (d – параметр обрезания, который в дальнейших расчетах принимается равным 0,9). В результате для среднего потенциала $\varphi(\rho, b, d)$ получим следующее выражение [2]:

$$\varphi(\rho) = \frac{\int_{V_b} \Phi(r) E(r-d) dV_b}{\int_{V_b} E(r-d) dV_b} = n_{ij} \frac{I(r, b, d)|_{r_1}^{r_2}}{V(r, b, d)|_{r_1}^{r_2}}. \quad (3)$$

Здесь ρ – модули радиус-векторов ρ_{ij} ; n_{ij} – двухъячеечные числа заполнения ячеек с номерами i и j ; $E(r-d)$ – единичная ступенчатая функция Хевисайда.

После вычисления в сферической системе определенных интегралов в (3) по углу φ (от 0

до π) и углу θ (от 0 до θ_{\max}), а также неопределенного интеграла по r находим:

$$I(r, b, d) = 8\pi \left[\frac{1}{r^{10}} \left(\frac{\rho^2 - b^2}{20\rho} - \frac{r}{9} + \frac{r^2}{16\rho} \right) - \frac{1}{r^4} \left(\frac{\rho^2 - b^2}{8\rho} - \frac{r}{3} + \frac{r^2}{4\rho} \right) \right], \quad (4)$$

$$V(r, b, d) = -2\pi \left[\frac{r^2(\rho^2 - b^2)}{4\rho} - \frac{r^3}{3} + \frac{r^4}{8\rho} \right]. \quad (5)$$

После подстановки пределов r_1 и r_2 по координате r , которые зависят от соотношения между расстоянием ρ и параметрами b и d , получим аналитические выражения для среднего потенциала:

$$\varphi^*(\rho, b, d) = \frac{\varphi(\rho, b, d)}{n_{ij}} = \begin{cases} \frac{I(\rho+b, b, d) - I(\rho-b, b, d)}{4\pi b^3 / 3} & \text{при } \rho \geq b+d; \\ \frac{I(\rho+b, b, d) - I(d, b, d)}{V(\rho+b, b, d) - V(d, b, d)} & \text{при } d-b < \rho < b+d; \\ \Phi(\rho+b) & \text{при } \rho \leq d-b. \end{cases} \quad (6)$$

1. Компьютерное построение алмазной решетки. Для решения системы интегральных уравнений [1], определяющих унарные функции распределения атомов в кристаллах, ранее [3] была выполнена алгоритмизация двухуровневого молекулярно-статистического подхода с целью описания микроструктуры сферических алмазоподобных наночастиц. Для этого, используя базисные векторы двух гранецентрированных подрешеток, была построена матрица A , описывающая распределение узлов алмазной решетки по координационным сферам относительно центра сферической наночастицы. Фрагмент этой матрицы (табл. 1) содержит координаты x_i, y_i, z_i узлов в глобальной системе координат, связанной с центром наночастицы, оси которой направлены вдоль ребер элементарной ячейки гранецентрированной решетки. Узлы пронумерованы так, чтобы с возрастанием их номера n_i расстояние r_i до центра наночастицы, т. е. до начала координат, увеличивалось при переходе от одной координационной сферы с номером l к другой либо сохранялось в пределах каждой координационной сферы.

Таблица 1

Фрагмент матрицы A , содержащей номер узлов i (первая строка), радиусы r_i их сфер (вторая строка) и координаты x_i, y_i, z_i для первых 8 узлов алмазной решетки в последующих трех строках

$A =$	i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
	r_i	0	0,433	0,433	0,433	0,433	0,707	0,707	0,707	0,707
	x_i	0	0,25	0,25	-0,25	-0,25	-0,5	0	-0,5	-0,5
	y_i	0	-0,25	0,25	-0,25	0,25	0	-0,5	-0,5	0,5
	z_i	0	-0,25	0,25	0,25	-0,25	-0,5	-0,5	0	...

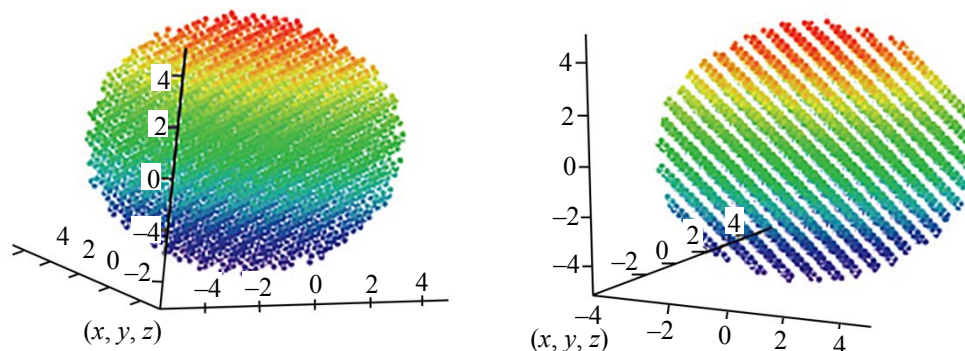


Рис. 1. Две взаимно перпендикулярные проекции сферического объекта, образованного узлами алмазной решетки

Изображенные на рис. 1 две проекции сферического образования из узлов регулярной алмазной решетки, полученные с помощью разработанной компьютерной программы, демонстрируют наличие решеточной анизотропии у этого сферического объекта, что соответствующим образом отразится на характере распределения атомов углерода в элементарных ячейках, находящихся в разных местах вблизи границы сферических алмазоподобных наночастиц.

Для дальнейшей классификации узлов решетки из матрицы A была сформирована матрица B , фрагмент которой представлен в табл. 2 из четырех строк и с числом столбцов, равных числу L координационных сфер в сферической наночастице. В первой строке этой таблицы при-

веден номер l координационной сферы. Во второй строке указан номер последнего узла P_l , принадлежащего выбранной координационной сфере l ($l = 0, 1, 2, \dots, L$). В третьей строке записано количество узлов Z_l , принадлежащих сфере l , а в четвертой – расстояния до этих узлов, т. е. радиусы сфер с номером l .

В связи с тем, что среднеквадратичные отклонения атомов углерода от узлов решетки зависят от радиусов координационных сфер, т. е. их номеров l , необходимо знать, какой координационной сфере принадлежит выбранный узел n_i решетки. Указанную связь находили с помощью составленной специальной матрицы C , в которой номера узлов n записаны в первой строке табл. 3, а номера l соответствующих координационных сфер – во второй строке.

Таблица 2

Фрагмент матрицы B , содержащей номер P_l , числа Z_l и радиусы r_l для 5 первых координационных сфер сферической углеродной наночастицы

$B =$	l	0	1	2	3	4	5
	P_l	0	4	16	28	34	46
	Z_l	0	4	12	12	6	12
	r_l	0	0,433	0,707	0,829	1	...

Таблица 3

Фрагмент матрицы C

$C =$	n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
	l	0	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	...

2. Расчет унарных функций распределения атомов углерода в сферической наночастице. Для решения системы (1)–(6) методом итераций и последующего расчета по формуле (2) коррелятивной функции $\bar{F}_{11}(\bar{q}_i)$ в окрестности любого узла с номером i необходимо выполнить суммирование по всем узлам j в локальном окружении узла i . Среднеквадратичные отклонения σ_i зависят от положения узла i в основной, т. е. глобальной, системе координат. Для нахождения их значений по координатам узлов j в локальной системе координат, связанной с узлом i , и координатам узла i в глобальной системе координат рассчитывался радиус r_l координационной сферы и ее номер l . По номерам этих сфер определялись значения радиусов b из соответствующих массивов и вычислялись средние потенциалы по формулам (6). Найденные таким образом функции распределения использовались для вычисления среднеквадратичных отклонений по формуле (1) и соответствующих им новых значений параметров b (радиусов сфер), моделирующих сферически симметричное распределение атомов углерода в окрестности своих узлов.

Численное интегрирование по объему ω_i ячеек при решении системы (1)–(6) выполнялось по 14 лучам, направленным на четыре ближайших узла, и вдоль трех координатных осей в обоих направлениях.

В качестве примера на рис. 2–7 графически представлены найденные решения унарных функций для наночастиц двух размеров ($L = 3$; $L = 15$) в интервале безразмерных температур от $\theta = 0,2$ до $\theta = 0,8$. В табл. 4, 5 записаны результаты расчета радиусов b_l сфер в за-

висимости от номера координационной сферы l при различных значениях температуры θ и размеров L наночастицы.

Из данных, приведенных в табл. 4, видно, что при низкой температуре $\theta = 0,02$ и малом размере наночастицы ($L = 3$) радиусы b_l сфер, характеризующие область локализации распределения атомов углерода в окрестности узлов решетки, имеют малые значения (по сравнению с параметрами решетки $a = 1,12$) для центрального узла ($l = 0$) и узлов, принадлежащих всем координационным сферам ($l = 1, 2, 3$). Их значения, а также смещения центров плотности распределения атомов углерода (рис. 2, 3) незначительно увеличиваются при возрастании номера l координационных сфер.

При трехкратном увеличении температуры ($\theta = 0,06$) распределение плотности вблизи центрального узла ($l = 0$) и при $l = 2$ (рис. 4) остается локализованным, хотя центр локализации распределения плотности при $l = 2$ сместился из узла решетки вдоль всех трех осей ($x = 0,157$, $y = -0,137$, $z = -0,157$). Из вида унарных функций распределения при $l = 3$ (рис. 5) следует, что периферийный атом углерода уже не удерживается возле узла регулярной алмазной решетки, поскольку плотность распределения этого атома на границе элементарной ячейки имеет конечные значения. Это естественно интерпретировать как плавление поверхности наночастицы, связанное с поверхностной реструктуризацией, которая проявляется в эксперименте как явление графитизации поверхности нанообъекта, внутри которого наблюдается алмазоподобное распределение атомов углерода.

Таблица 4

Зависимость радиусов b_l от температуры θ и номера l координационных сфер при $L = 3$

θ	l					ϵ
	0	1	2	3		
0,02	0,024	0,023	0,027	0,031	$1,78 \cdot 10^{-4}$	
0,04	0,035	0,046	0,364	0,424	$0,141 \cdot 10^{-4}$	
0,06	0,089	0,242	0,420	0,576	$1,176 \cdot 10^{-4}$	

Таблица 5

Зависимость радиусов b_l от температуры θ и номера l координационных сфер при $L = 15$

θ	l								ϵ
	0	2	4	6	8	10	12		
0,05	0,041	0,041	0,041	0,076	0,126	0,221	0,789	$1,377 \cdot 10^{-4}$	
0,06	0,046	0,046	0,046	0,047	0,192	0,225	0,235	$1,319 \cdot 10^{-4}$	
0,08	0,663	0,667	0,669	0,676	0,687	0,695	0,706	$4,697 \cdot 10^{-4}$	

При температуре $\theta = 0,07$ сходимость итерационного процесса при решении системы (1)–(6) сильно ухудшилась, а вид функций распределения указывает на делокализацию распределения атомов во всем объеме наночастицы, что следует рассматривать как фазовый переход кристалл – жидкость.

Из табл. 5 для наночастицы с $L = 15$ видно, что при температуре $\theta = 0,06$ распределение

всех атомов локализовано вблизи незначительного смещенных центров распределения плотности, например, при $l = 10$ (рис. 6, 8) смещение $\Delta r \approx 5,4 \cdot 10^{-4}$.

При температуре $\theta = 0,08$ распределение всех атомов наночастицы уже делокализовано, при этом имеются каналы, вдоль которых возможен обмен атомами между соседними ячейками (рис. 7, 9).

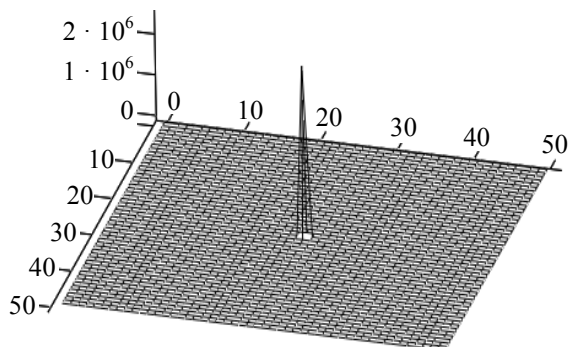


Рис. 2. График функции $\hat{F}_{11}(x, y, 0)$ при $L = 3$, $\theta = 0,02$ и значения координат центра распределения плотности при $l = 0$: $x = 0, y = 0, z = 0$

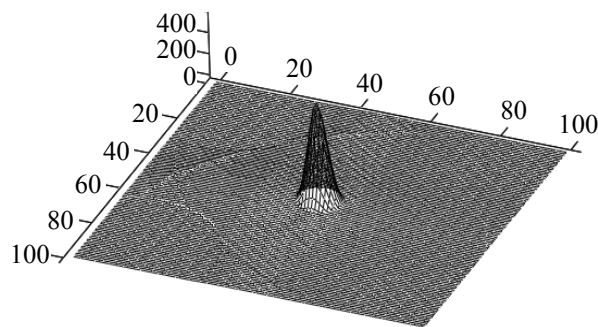


Рис. 5. График функции $\hat{F}_{11}(x, y, 0)$ при $L = 3$, $\theta = 0,06$ и значения координат центра распределения плотности при $l = 3$: $x = 0,297, y = 0, z = 0$

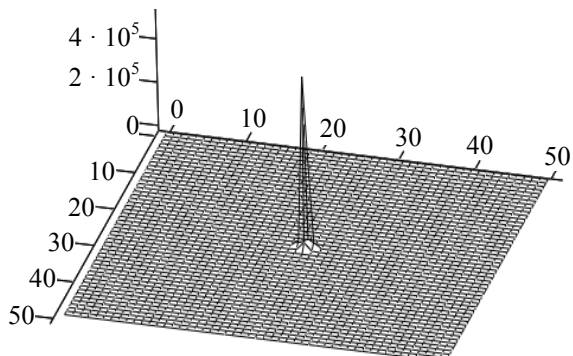


Рис. 3. График функции $\hat{F}_{11}(x, y, 0)$ при $L = 3$, $\theta = 0,02$ и значения координат центра распределения плотности при $l = 3$: $x = 1,2 \cdot 10^{-3}, y = 0, z = 0$

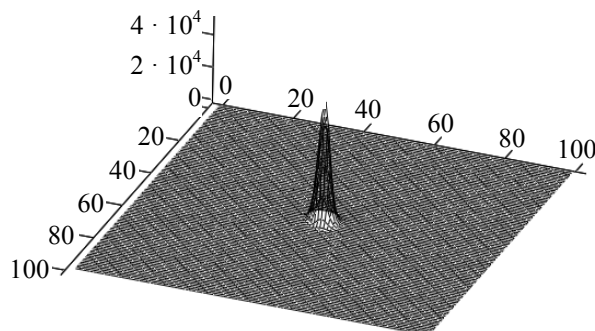


Рис. 6. График функции $\hat{F}_{11}(x, y, 0)$ при $L = 15$, $\theta = 0,06$ и значения координат центра распределения плотности при $l = 10$: $x = -3,197 \cdot 10^{-4}, y = 3,2 \cdot 10^{-4}, z = 3,197 \cdot 10^{-4}$

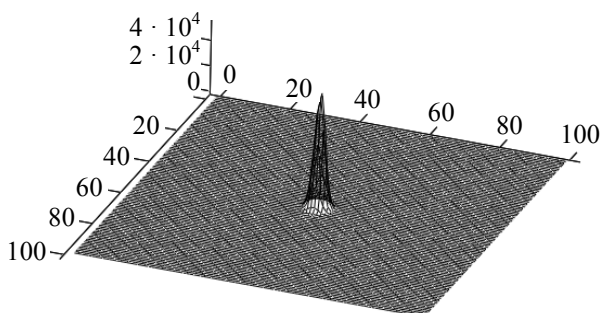


Рис. 4. График функции $\hat{F}_{11}(x, y, 0)$ при $L = 3$, $\theta = 0,06$ и значения координат центра распределения плотности при $l = 2$: $x = 0,157, y = -0,137, z = -0,157$

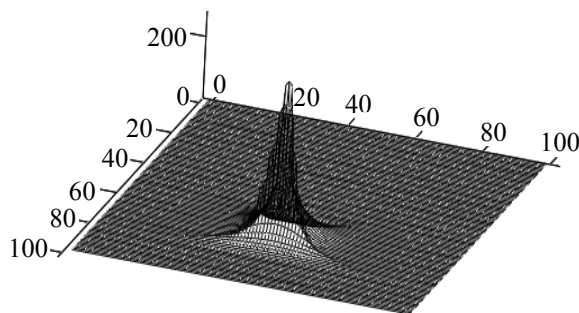


Рис. 7. График функции $\hat{F}_{11}(x, y, 0)$ при $L = 15$, $\theta = 0,08$ и значения координат центра распределения плотности при $l = 10$: $x = 3,16 \cdot 10^{-4}, y = -0,059, z = -0,012$

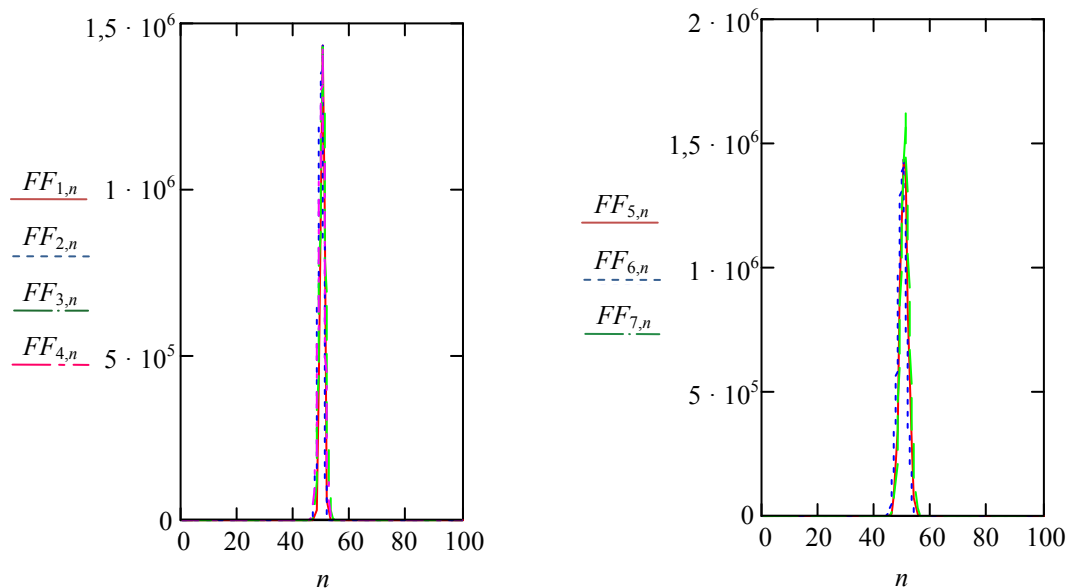


Рис. 8. Профили унарной нормированной функции распределения $\hat{F}_{11} = FF_{k,n}$ для семи направлений ($k = 1, 2, \dots, 7$), соответствующих четырем отрезкам, соединяющим вершины куба, и трем отрезкам, совпадающим с тремя координатными осями системы, элементарной ячейки ГКЦ решетки, начало которой совпадает с центром этой ячейки ($\theta = 0,06, L = 15, l = 10$)

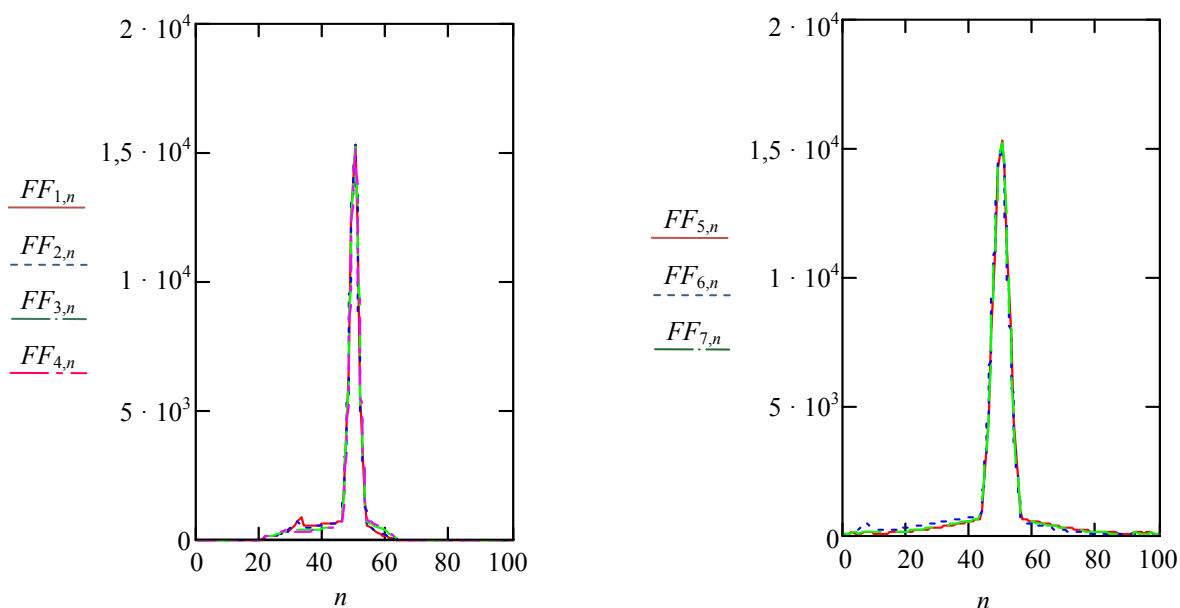


Рис. 9. Профили унарной нормированной функции распределения $\hat{F}_{11} = FF_{k,n}$ для семи направлений ($k = 1, 2, \dots, 7$), соответствующих четырем отрезкам, соединяющим вершины куба, и трем отрезкам, совпадающим с тремя координатными осями системы, элементарной ячейки ГКЦ решетки, начало которой совпадает с центром этой ячейки ($\theta = 0,08, L = 15, l = 10$)

Заключение. Компьютерная реализация численного решения системы интегральных уравнений для ячеечных средних потенциалов, используемых для расчета унарных функций распределения атомов углерода, позволила изучить при разных температурах зависимости характеристик микроструктуры сферических наночастиц разных размеров от номера координатных сфер, образующих эти наночастицы. Показано, что при низких температурах

макроструктура наночастиц является решеточной, при этом внутренние атомы и атомы, находящиеся вблизи границ наночастиц, локализованы в окрестности узлов практически регулярной алмазной решетки. Однако при увеличении температуры среднеквадратичные отклонения атомов из узлов регулярной решетки возрастают, что приводит к возникновению поля смещений центров распределения унарной микроразности, описывающего пространст-

венную релаксацию алмазной решетки, и появлению тенденции к делокализованному распределению атомов углерода преимущественно в приповерхностной области сферических наночастиц. Дальнейший рост температуры ведет к постепенному проникновению «делокализации» в направлении к центру наночастицы, что при соответствующей температуре вызывает ее плавление, при котором делокализованы уже все внутренние атомы наночастицы. Температура плавления наночастиц, полученная таким образом, оказывается меньше температуры

плавления макроскопического кристалла алмаза и она зависит от размера наночастиц.

Исследования проведены в соответствии с «Координационным планом работ, выполняемых в Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна, РФ) с участием организаций и учреждений Республики Беларусь в 2016 г.». Автор благодарен главному научному сотруднику лаборатории теоретической физики (ОИЯИ) доктору физико-математических наук В. Б. Приезжеву за рекомендации, высказанные при обсуждении проведенных исследований.

Литература

1. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. СПб., 1993. 242 л.
2. Наркевич И. И., Квасов Н. Т., Козич Е. Ю. Двухуровневое молекулярно-статистическое изучение структуры и термодинамических характеристик однородных макроскопических систем и сферических наночастиц // Труды БГТУ. 2016. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 61–65.
3. Бокун Г. С. Алгоритмизация двухуровневого молекулярно-статистического подхода для расчета параметров кристаллических наночастиц со структурой алмазной решетки // Труды БГТУ. 2016. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 71–75.

References

1. Narkevich I. I. *Molekulyarno-statisticheskaya teoriya neodnorodnykh kondensirovannykh sred. Dis. dokt. fiz.-mat. nauk* [Molecular-statistical theory of the non-homogeneous condensed matter. Doct. Diss.]. St. Petersburg, 1993. 242 p.
2. Narkevich I. I., Kvasov N. T., Kozich E. Yu. Two-level molecular-statistical description of the structure and thermodynamic characteristics of homogeneous macroscopic systems and spherical nanoparticles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2016, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 61–65 (In Russian).
3. Bokun G. S. The algorithmization of the two-level molecular-statistical approach for calculation of parameters of crystal nanoparticles with diamond lattice. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2016, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 71–75 (In Russian).

Информация об авторах

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

Наркевич Иван Иванович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: inarkevich@mail.ru

Information about the authors

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

Narkevich Ivan Ivanovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: inarkevich@mail.ru

Поступила 20.12.2016

УДК 539.197; 674.055:621.934(043.3)

В. В. Чаевский¹, П. В. Рудак¹, А. К. Кулешов²¹Белорусский государственный технологический университет²Белорусский государственный университет**ИЗНОС ЛЕЗВИЙ НОЖЕЙ ДЕРЕВОРЕЖУЩЕГО ФРЕЗЕРНОГО ИНСТРУМЕНТА С ZrC-, ZrC-Ni-УДА-ПОКРЫТИЯМИ**

Показан износ лезвий с ZrC-, ZrC-Ni-УДА-покрытиями ножей из карбида вольфрама твердых сплавов фрезерного инструмента при резании ламинированных древесностружечных плит (ДСтП). ZrC-покрытия формировались методом конденсации с ионной бомбардировкой. Композиционные Ni-УДА-покрытия были осаждены из сульфатно-хлоридных электролитов на лезвия ножей фрез. Комбинированные ZrC-Ni-УДА-покрытия содержат отдельные фазы никеля, Ni-УДА, графитоподобные фазы ультрадисперсных алмазов, а также фазы ZrC.

Установлено, что в условиях производства при резании модифицированными фрезами с покрытиями лезвий ножей ламинированных ДСтП наблюдается интенсивный абразивный износ лезвий ножей. Лезвия ножей с ZrC-покрытиями являются более износостойкими, чем с комбинированными ZrC-Ni-УДА-покрытиями. Рассчитанный износ лезвий ножей с ZrC-покрытием в 1,3 раза меньше по сравнению с необработанным инструментом.

Ключевые слова: износ, покрытие, лезвие ножа, режущий инструмент, ультрадисперсные алмазы, никель.

V. V. Chayevski¹, P. V. Rudak¹, A. K. Kuleshov²¹Belarusian State Technological University²Belarusian State University**KNIFE BLADES WEAR OF WOOD-CUTTING TOOL WITH THE ZrC-, ZrC-Ni-UDD-COATINGS**

Laminated chipboards milled by a tool with tungsten carbide hard alloy knives were coated with ZrC, ZrC-Ni-UDD. The wear of knives blades is shown. ZrC-coatings were formed by the method of plasma vacuum deposition. Composite Ni-UDD-coatings were plated on knife blades of milling tools from sulfate-chloride electrolytes. The combined ZrC-Ni-UDD-coatings consist of separate phases of nickel, Ni-UDD, ultradisperse diamonds phases similar to the graphite phase and ZrC-phase.

Intensive abrasive wear of knife blades occurred when cutting laminated chipboard with a modified cutting tool in a production environment. Knife blades with ZrC-coatings are more wear resistant than cutter edge coated with combined ZrC-Ni-UDD. The value of wear of knife blades with coatings was calculated. If compared with bare tool, the wear of ZrC-coated blade is 1.3 times less.

Key words: wear, coating, knife blade, cutting tool, ultradisperse diamonds, nickel.

Введение. Стойкость и надежность режущего инструмента современного оборудования на деревообрабатывающих производствах является одним из основных условий эффективности его работы. Уровень показателей стойкости и надежности режущего инструмента определяется, в первую очередь, характеристиками физико-механических свойств инструментального материала. При резании композиционных материалов на древесной основе (ДСтП, слоистые пластики, стеклотекстолит и др.) действие входящих в их состав абразивосодержащих частиц, имеющих твердость, соизмеримую с твердостью инструментального материала, приводит к возрастанию сил трения на задней поверхности резца и к более интенсивному абразивному износу контактных поверхностей инструмента [1]. Повышение износостойкости поверхностей с помощью специальных покры-

тий, в том числе композиционных электролитических покрытий (КЭП), показывающих высокие физико-механические и электрохимические свойства [2], по-прежнему представляет собой один из наиболее эффективных методов улучшения функционально-эксплуатационных характеристик изделий и деталей различного назначения. Использование ультрадисперсных алмазов (УДА), получаемых детонацией взрывчатых веществ, в качестве композиционного материала в электрохимических и химических металл-алмазных покрытиях приводит также к повышению их износостойкости, существенной адгезии, резкому снижению коэффициента трения [3]. Установлено, что сформированные гальваническим методом и методом конденсации с ионно-плазменной бомбардировкой (КИБ) комбинированные ZrN-Ni-Co-покрытия на лезвиях стальных ножей хвостовых фрез

обеспечивают при резании материалов из ламинированных ДСтП и хвойных пород древесины повышение периода стойкости режущего инструмента [4].

В связи с этим целью данной работы было сформировать методами КИБ и электрохимического осаждения градиентные ионно-плазменные и гальванические (на основе УДА) покрытия на поверхности твердосплавных лезвий ножей из карбида вольфрама дереворежущего инструмента и исследовать физико-механические свойства (фазовый и элементный состав, износостойкость) режущих элементов инструмента и сформированных слоев.

Основная часть. Гальванические Ni-УДА-КЭП наносили на кафедре химии, технологии электрохимических производств и материалов электронной техники (Х,ТЭПиМЭТ) БГТУ на подготовленную поверхность лезвий ножей на экспериментальной установке с применением источника постоянного тока марки DC POWER SUPPLY HY3005-3 при плотностях тока 1–24 А/дм² в гальваностатическом и импульсном режимах электролиза из электролитов, состав которых представлен в табл. 1. Толщина покрытий не превышала 10 мкм.

Таблица 1
Состав используемых электролитов при 50°C и pH 4,5

Компоненты, г/дм ³	Электролит № 1	Электролит № 2
NiSO ₄ · 7H ₂ O	300	300
NiCl ₂ · 6H ₂ O	40	40
H ₃ BO ₃	30	30
УДА	1	2–5
Додецилсульфат натрия	–	0,1

Кислотность (pH) электролита измерялась рН-метром рН-150 с точностью ±0,05%. Уровень рН до нужного значения корректировался концентрированным раствором серной кислоты. Перед осаждением покрытий проводилась подготовка образцов, которая представляла собой химическое обезжиривание при температуре 60–80°C на протяжении 5–10 мин, промывку в горячей (при температуре 40–60°C) и холодной (при температуре 18–25°C) воде, травление (в растворе H₂SO₄ (300 г/л) при температуре 18–25°C в течение 3 мин) и холодную промывку, активацию, промывку.

В качестве дисперсной фазы использовали УДА (ТУ РБ 28619110.001-95), являющиеся продуктом детонационного превращения взрывчатых веществ с размерами 3–5 нм, развитой

удельной поверхностью 200–450 м²/г. Процесс электроосаждения КЭП проводили при повышенной температуре 40–50°C и постоянном перемешивании электролита-суспензии для поддержания частиц УДА во взвешенном состоянии. Режимы электролиза для осаждения Ni-УДА-покрытий и полученные результаты представлены в табл. 2.

Таблица 2
Условия и результаты синтеза Ni-УДА-покрытий

t, мин	m _{нач} , г	ВТ, %	I, А	δ, мкм	m _{кон} , г
30	1,106	80,27	0,16	4,3	1,176
30	1,214	95,18	0,16	6,2	1,297
15	1,172	97,50	0,32	6,2	1,258

Ионно-плазменные ZrC-покрытия осаждались методом КИБ на поверхность ножей хвостовых фрез и поверхность ножей с Ni-УДА-покрытием на установке ВУ-1Б «Булат» по стандартной методике [5]: с предварительной обработкой ионами циркония подложки в вакууме 10⁻³ Па при потенциале подложки, равном –1 кВ, и последующим нанесением покрытий при токах горения дуги катода 80–100 А и опорном напряжении, равном –100 В, в атмосфере углеводорода CH₄ при давлении 10⁻¹ Па. Температура при осаждении соответствовала 400–450°C. Толщина ZrC-покрытий не превышала 1,5 мкм.

Для формирования комбинированных ZrC-Ni-УДА-покрытий предварительно на поверхность твердосплавных ножей фирмы Leiz (Германия) осаждались Ni-УДА-КЭП с последующим напылением ZrC-покрытия.

Фазовый состав полученных покрытий исследовался методом рентгеноструктурного анализа (РСА) при помощи дифрактометра Ultima IV (Rugaku, Япония) в Cu-K_α излучении.

Морфология поверхности образцов изучалась методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с использованием микроскопа LEO-1455 VP, который также применялся для определения элементного состава полученных покрытий методами СЭМ и рентгено-спектрального микроанализа (РСМА).

Опытно-промышленные испытания на период стойкости модифицированных ножей сборной фрезы диаметром 21 мм при резании ламинированных ДСтП толщиной 16 мм проводили на станке с ЧПУ RANC-330AE при следующих режимах: число ножей на фрезе – 1; частота вращения фрезы – 12 000 мин⁻¹; скорость подачи – 4 м/мин. Рассчитанная длина

резания ДСтП составила 9000–10 000 п. м с точностью ± 1000 п. м. Критерием потери режущей способности резца являлось появление сколов отделки плиты.

Объемный износ лезвия ножа после опытно-промышленных испытаний рассчитывался по методике определения поперечных размеров кромки лезвия по всей ее длине с помощью оптического микроскопа Microvert (холдинг «Планар», Республика Беларусь) в 2 этапа с учетом первоначального неизношенного угла заточки лезвия [6]. Для оценки износа лезвия ножей с учетом крупных участков разрушения лезвия

проводилась математическая обработка оптических снимков этих участков.

Процесс резания модифицированными фрезами с покрытиями лезвий ножей ламинированных ДСтП в промышленных условиях сопровождался интенсивным абразивным износом ножей фрезерного инструмента. При этом на лезвиях ножей наблюдались многочисленные разного размера участки разрушения лезвий в виде оставшихся после вырывания материала основы (в том числе с покрытиями) углублений, пустот, сколов (рис. 1–3), а также истирания покрытий лезвия (рис. 3).

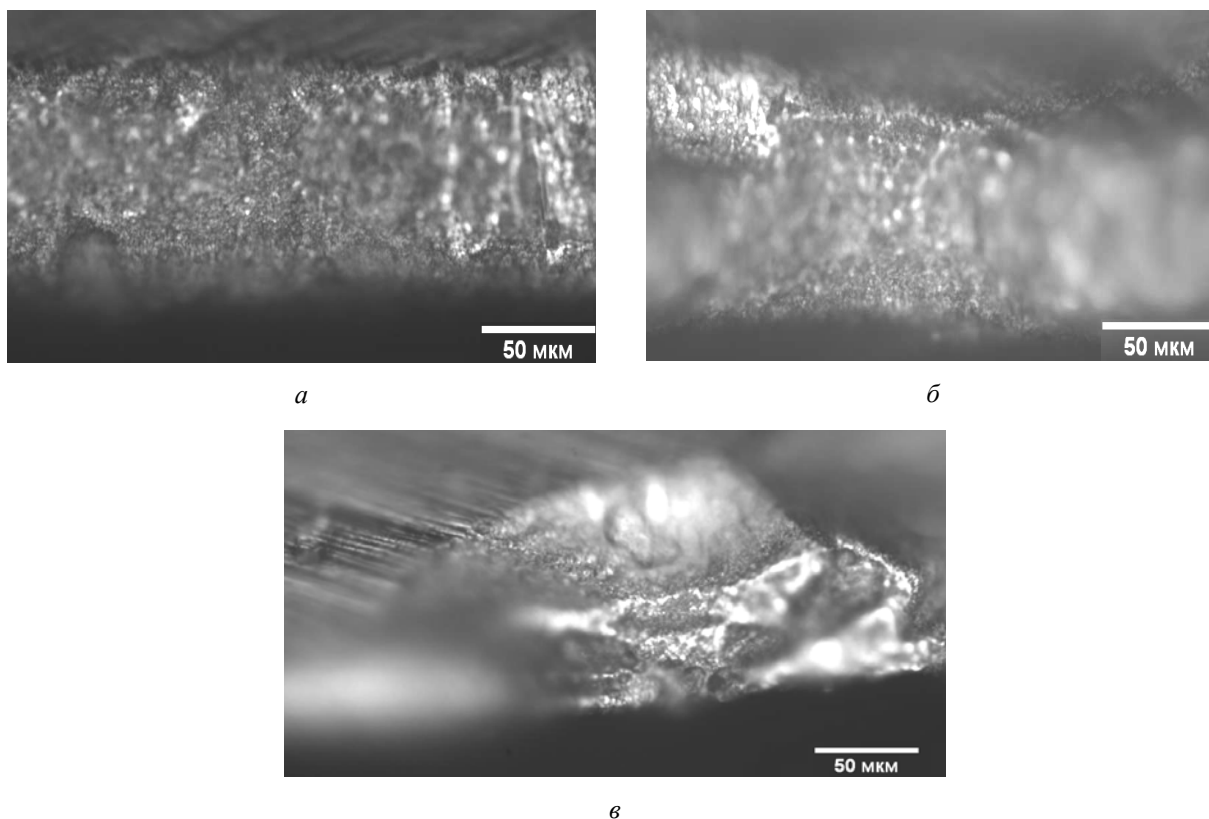


Рис. 1. Оптические снимки изношенного лезвия ножа без покрытия (а, б) и крупного участка разрушения ножа с ZrC-покрытием (в)

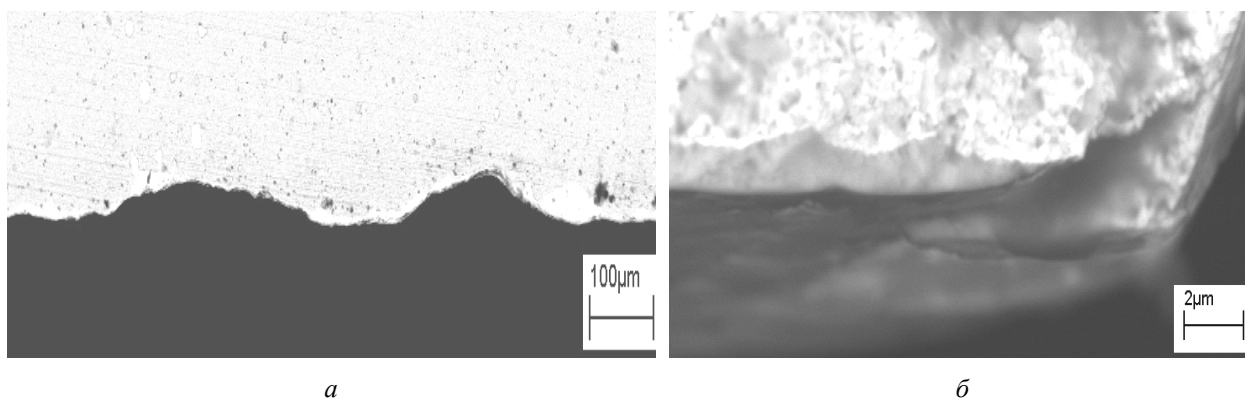


Рис. 2. РЭМ-снимки разрушенного участка лезвия ножа с покрытием (а) и скола лезвия (б)

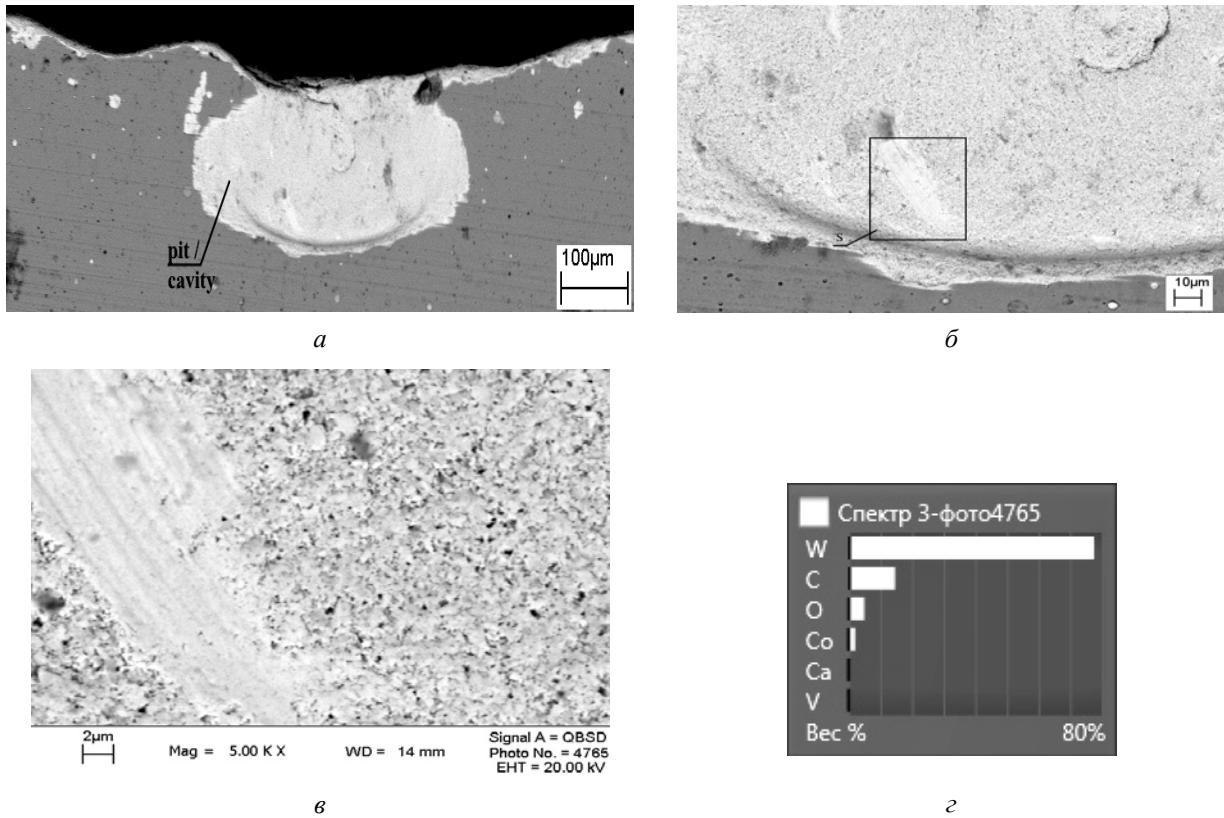


Рис. 3. РЭМ-снимки разрушенного участка лезвия ножа с вырыванием покрытия с основой, истиранием покрытия (а) и выделенного фрагмента полосы истирания покрытия (б, в) с РСМА-определением элементов на полосе (г)

Для ZrC-покрытий, осажденных на твердосплавное лезвие ножа из карбида вольфрама, наблюдается достаточно четкая граница истирания на расстояниях до ~50 мкм от острия

лезвия (рис. 4) в отличие от ZrC-Ni-УДА-покрытий, для которых характерна переходная область истирания (до ~100 мкм), связанная с наличием переходного Ni-УДА-слоя (рис. 5).

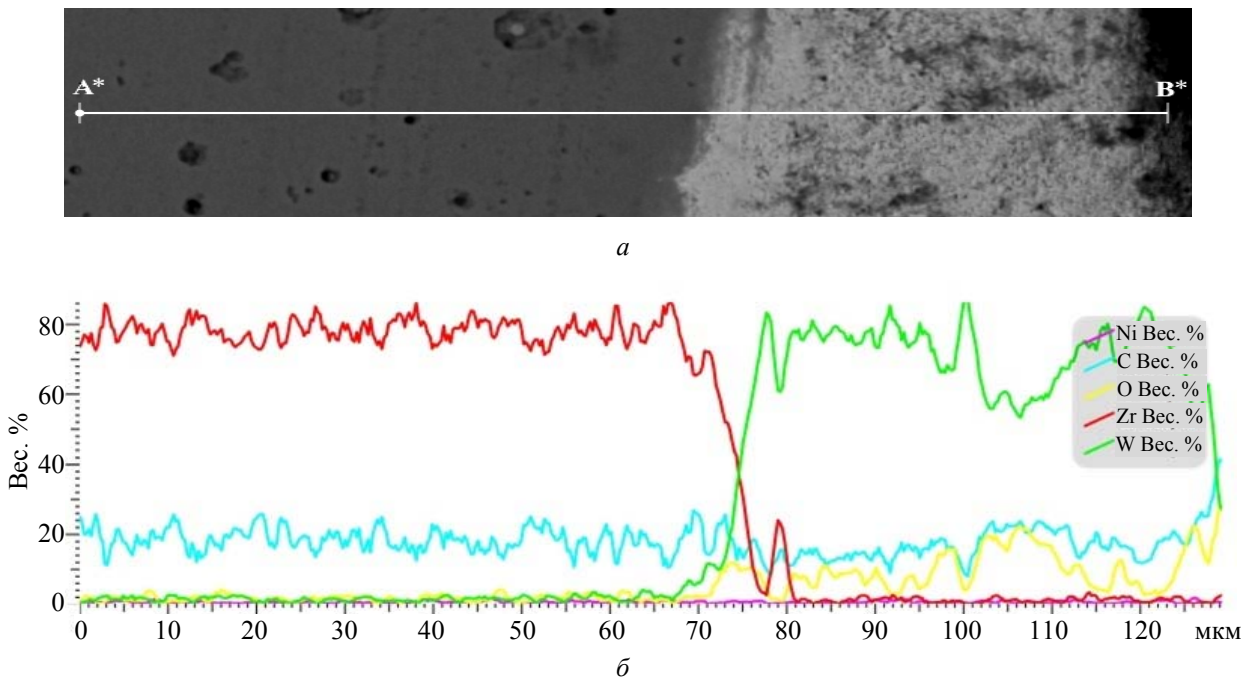


Рис. 4. РЭМ-снимок изношенного участка лезвия ножа с ZrC-покрытием (а) и распределение концентрации элементов вдоль линии А*В* (б)

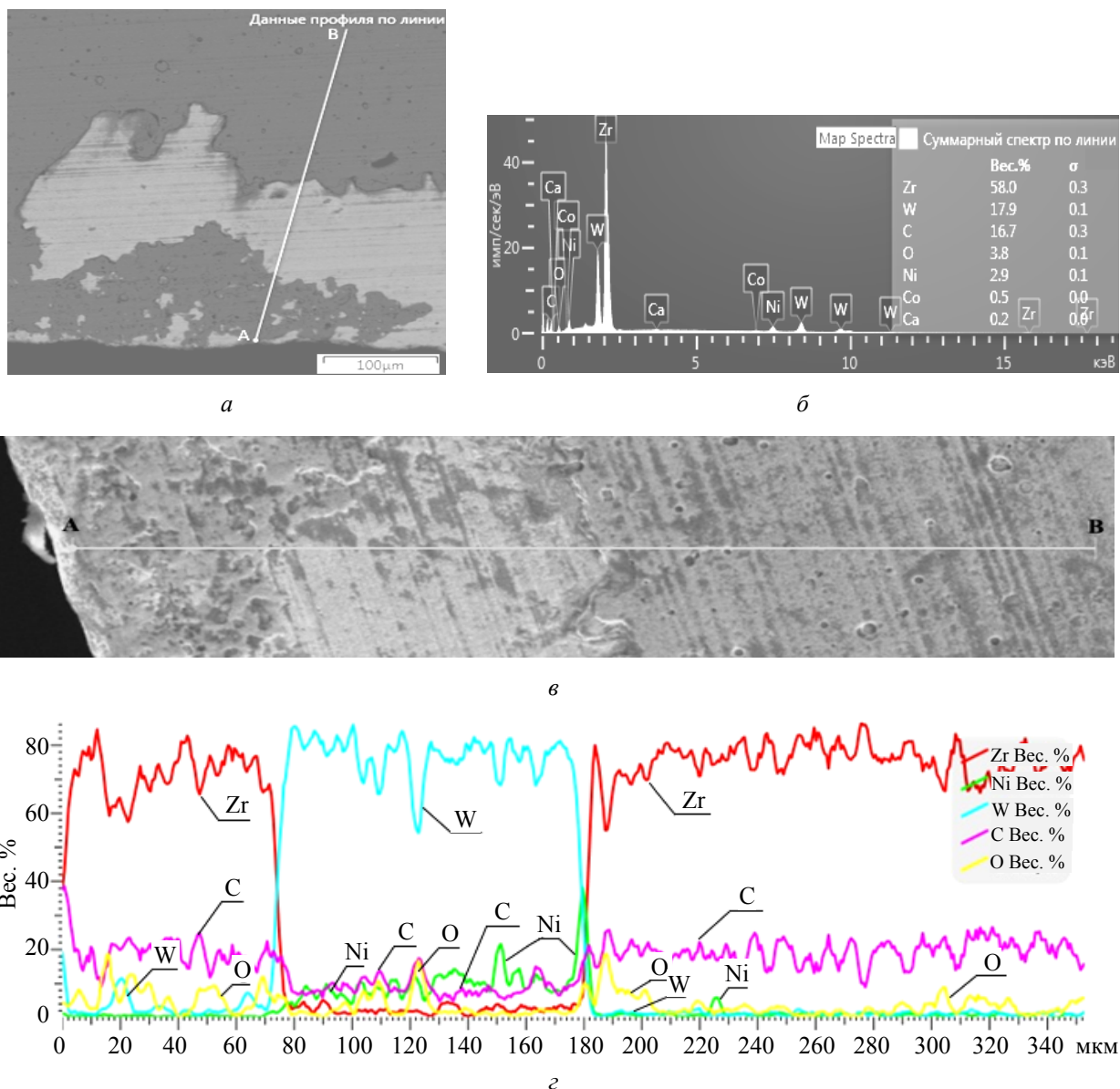


Рис. 5. РЭМ-снимки морфологии изношенного участка лезвия ножа с ZrC-Ni-УДА-покрытием (а, в), суммарный спектр (б) и распределение концентрации элементов вдоль линии АВ (г)

Выполненные расчетные оценки объемного износа лезвия ножей после опытно-промышленных испытаний модифицированных фрез (табл. 3) свидетельствуют, что объемный износ лезвия с ZrC-покрытием уменьшается более чем в 1,3 раза по сравнению с лезвием без покрытия. Объемный износ лезвия с ZrC-Ni-УДА-покрытием незначительно снижается по сравнению с необработанным инструментом.

Таблица 3

Результаты расчета объемного износа лезвия ножей после резания ламинированной ДСтП

Вид обработки	Объемный износ, $\times 10^7$ мкм ³
Без покрытия	129,9 ± 0,9
ZrC-покрытие	93,6 ± 0,6
ZrC-Ni-УДА-покрытие	115,2 ± 0,8

Оптические снимки изношенной кромки лезвия ножа с ZrC- и ZrC-Ni-УДА-покрытиями подтверждают расчеты объемного износа и показывают, что степень износа лезвия ножей с ZrC-покрытием меньше, чем в случае лезвия ножей с ZrC-Ni-УДА-покрытием.

Закключение. Подобраны режимы осаждения и получены Ni-УДА-КЭП и комбинированные ZrC-Ni-УДА-покрытия на ножах твердосплавного дереворежущего фрезерного инструмента. Показано, что при резании ламинированных ДСтП в условиях производства необработанные лезвия ножей фрез и лезвия с покрытиями испытывают интенсивный абразивный износ. Однако износ лезвий ножей с ZrC-покрытием уменьшается в 1,3 раза по сравнению с необработанным инструментом.

Литература

1. Абразумов В. В., Котенко В. Д. Анализ явлений на контактных поверхностях режущего клина при резании плитных древесных композиционных материалов на минеральных вяжущих // Вестник Московского государственного университета леса. Лесной вестник. 2006. № 6. С. 138–141.
2. Чаевский В. В., Дроздович В. Б. Изучение состава и структуры Ni- и Cr-композиционных электролитических покрытий, содержащих углеродные наноматериалы на стали // Труды БГТУ. 2010. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 96–98.
3. Долматов В. Ю. Ультрадисперсные алмазы детонационного синтеза: свойства и применение // Успехи химии. 2001. Т. 70, № 7. С. 687–708.
4. Физико-механические свойства ZrN-Ni-Co-покрытий на лезвиях стальных ножей дереворежущего инструмента / В. В. Чаевский [и др.] // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 97–101.
5. 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 информатика. 2008. Вып. XVI. С. 52–54.
6. Influence of high energy treatment on wear of edges knives of wood-cutting tool / V. Chayauski [et al.] // MM (Modern Machinery) Science Journal. 2016. No. 6. P. 1519–1523.

References

1. Abrazumov V. V., Kotenko V. D. The analysis of the phenomena on contact surfaces of a cutting at cutting board wood composite materials. *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo universiteta lesa. Lesnoy vestnik* [Forestry Bulletin], 2006, no. 6, pp. 138–141 (In Russian).
2. Chayauski V. V., Drozdovich V. B. The study of the composition and structure of Ni- and Cr-composite electrolytic coatings containing carbon nanomaterials on steel. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2010, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 96–98 (In Russian).
3. Dolmatov V. Yu. Detonation synthesis ultradispersed diamonds: properties and applications. *Uspekhi khimii* [Russian Chemical Reviews], 2001, vol. 70, no. 7, pp. 687–708 (In Russian).
4. Chayauski V. V., Grishkevich A. A., Zhyllinskiy V. V., Cernashejus O. Physical and mechanical properties of ZrN-Ni-Co-coatings on the edges of steel knives of wood-cutting tools. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 97–101 (In Russian).
5. Grishkevich A. A., Chayauski V. V., Uglov V. V., Kuleshov A. K. Efficiency of use of TiN-, ZrN-, Ti-Zr-N-, and Ti-coatings on hard alloy during machining of laminated woodchip board using tail cutters. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physical-mathematical sciences and informatics, 2008, issue XVI, pp. 52–54 (In Russian).
6. Chayauski V., Zhyllinskiy V., Grishkevich A., Rudak P., Barcik Š. Influence of high energy treatment on wear of edges knives of wood-cutting tool. *MM (Modern Machinery) Science Journal*, 2016, no. 6, pp. 1519–1523.

Информация об авторах

Чаевский Вадим Витальевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: tchayevsky@tut.by

Рудак Павел Викторович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры материаловедения и технологии металлов. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: RudakPV@belstu.by

Кулешов Андрей Константинович – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией кафедры физики твердого тела. Белорусский государственный университет (220030, г. Минск, пр-т Независимости, 4, Республика Беларусь). E-mail: kuleshak@bsu.by

Information about the authors

Chayauski Vadzim Vitalievich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: chayauski@belstu.by

Rudak Pavel Viktorovich – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Material Science and Metal Technology. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: RudakPV@belstu.by

Kuleshov Andrey Konstantinovich – PhD (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of the Department of Solid State Physics. Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kuleshak@bsu.by

Поступила 15.12.2016

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

УДК 681.511

Д. С. Карпович, А. Н. Шумский

Белорусский государственный технологический университет

СИНТЕЗ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ С НЕЧЕТКИМ РЕГУЛЯТОРОМ И ШУМОМ ВО ВХОДНОМ КАНАЛЕ

Сформулирована методика синтеза системы управления с применением теории нечетких множеств. Приведены результаты имитационного моделирования системы с нечетким логическим контроллером при зашумленности входной информации.

Произведен синтез системы управления с нечетким регулятором и шумом во входном канале. Исследование динамики нечеткой системы управления проводилось в среде графического моделирования Simulink пакета Matlab. На основании полученных результатов моделирования выбраны рациональные алгоритмы управления для нечеткого регулятора с шумом во входном канале.

Выполнен анализ работы нечеткого регулятора. Рассмотрены основные процессы, происходящие в нечетком выводе в нечетких системах автоматического управления, а также система автоматического управления с нечетким контроллером и управлением по состоянию.

В данной статье предлагается подход синтеза нечеткого закона управления для объекта второго порядка, имеющего упрощенную динамику модели и минимальную исходную информацию о параметрах.

Ключевые слова: система управления, нечеткий регулятор, лингвистическая переменная.

D. S. Karpovich, A. N. Shumski

Belarusian State Technological University

SYNTHESIS OF CONTROL SYSTEMS WITH FUZZY CONTROLLER AND THE NOISE IN THE INPUT CHANNEL

The method of synthesis of a control system using fuzzy sets theory is formulated. The results of the simulation system with fuzzy logic controller with the noise of the input information are given.

Synthesis control system with fuzzy controller and the noise in the input channel is carried out. Investigation of the dynamics of fuzzy control system was carried out in an environment of graphic modeling Simulink Matlab package. Based on the simulation results, rational control algorithms for fuzzy control noise in the input channel were selected.

The analysis of the work of fuzzy controller is carried out. The main processes in the fuzzy inference in the fuzzy automatic control systems are considered. An automatic control system with fuzzy controller and controlled by state is also investigated.

This article proposes an approach of synthesis of fuzzy control law for an object having a second order, simplified dynamics model and a minimum initial information on the parameters.

Key words: control system, fuzzy control, linguistic variable.

Введение. В последнее время нечеткое моделирование является одним из наиболее активных и перспективных направлений прикладных исследований в области управления и принятия

решений. Нечеткое моделирование оказывается особенно полезным, когда в описании технических систем и бизнес-процессов присутствует неопределенность, которая затрудняет или да-

же исключает применение точных количественных методов и подходов [1].

В области управления техническими системами нечеткое моделирование позволяет получать более адекватные результаты по сравнению с результатами, которые основываются на использовании традиционных аналитических моделей и алгоритмов управления. Диапазон применения нечетких методов с каждым годом расширяется, охватывая такие области, как проектирование промышленных роботов и бытовых электроприборов, управление доменными печами и движением поездов метро, автоматическое распознавание речи и изображений.

Нечеткая логика, которая служит основой для реализации методов нечеткого управления, более естественно описывает характер человеческого мышления и ход его рассуждений, чем традиционные формально-логические системы. Именно поэтому изучение и использование математических средств для представления нечеткой исходной информации позволяет строить модели, которые наиболее адекватно отражают различные аспекты неопределенности, постоянно присутствующей в окружающей нас реальности.

Основная часть. Перспективным направлением развития для систем автоматического управления (САУ) объектами со сложной математической моделью и большим числом экспериментально определяемых параметров является применение нечеткого логического вывода в системе управления. Нечеткий логический вывод позволяет использовать для управления информацию качественного характера, которую невозможно формализовать при реализации традиционных законов регулирования. При этом нечеткое регулирование оказывается малочувствительным к возмущениям в определенном диапазоне и демонстрирует лучшие показатели качества переходного процесса по сравнению с классическими регуляторами.

Свойства нечеткого вывода обрабатывать неполную информацию, моделировать человеческие знания и выдавать обоснованные решения предполагают ее интенсивное использование для наблюдения в реальном времени за технологическими процессами, а также решение проблем, связанных с практической реализацией систем управления технологическими процессами [2].

Понятие нечеткого вывода занимает центральное место в нечеткой логике и в теории нечеткого управления. Говоря о нечеткой логике в системах управления, можно дать следующее определение системы нечеткого вывода.

Система нечеткого вывода – это процесс получения нечетких заключений о требуемом

управлении объектом на основе нечетких условий или предпосылок, представляющих собой информацию о текущем состоянии объекта. Разработка и применение систем нечеткого вывода включает в себя ряд этапов, а именно: формирование базы правил, фазификация, агрегирование, активизация, аккумулялирование, дефазификация (рис. 1).



Рис. 1. Диаграмма процесса нечеткого вывода в нечетких САУ

База правил систем нечеткого вывода предназначена для формального представления эмпирических знаний или знаний экспертов в той или иной проблемной области. Таким образом, база нечетких продукционных правил системы нечеткого вывода – это система нечетких продукционных правил, отражающая знания экспертов о методах управления объектом в различных ситуациях, характере его функционирования в различных условиях и т. п., т. е. содержащая формализованные человеческие знания.

База правил нечетких продукций представляет собой конечное множество правил нечетких продукций, согласованных относительно используемых в них лингвистических переменных. Наиболее часто база правил записывается в форме структурированного текста:

Правило_1: ЕСЛИ «Условие_1» И «Условие_2», ТО «Заключение_1»

Правило_n: ЕСЛИ «Условие_n1» И «Условие_n2», ТО «Заключение_n»

В системах нечеткого вывода лингвистические переменные, которые используются в нечетких высказываниях подусловий правил нечетких продукций, часто называют входными лингвистическими переменными, а переменные, которые используются в нечетких высказываниях подзаключений правил нечетких продукций, часто называют выходными лингвистическими переменными.

Фазификация. В контексте нечеткой логики под фазификацией понимается не только отдельный этап выполнения нечеткого вывода, но и собственно процесс или процедура нахождения значений функций принадлежности нечетких множеств (термов) на основе обычных (не нечетких) исходных данных. Фазификацию еще называют введением нечеткости.

Целью этапа фазификации является установление соответствия между конкретным (обычно – численным) значением отдельной входной переменной системы нечеткого вывода и значением функции принадлежности соответствующего ей терма входной лингвистической переменной. После завершения этого этапа для всех входных переменных должны быть определены конкретные значения функций принадлежности по каждому из лингвистических термов, которые используются в подусловиях базы правил системы нечеткого вывода.

Агрегирование – это процедура определения степени истинности условий по каждому из правил системы нечеткого вывода. При этом используются полученные на этапе фазификации значения функций принадлежности термов лингвистических переменных.

Если условие нечеткого продукционного правила является простым нечетким высказыванием, то степень его истинности соответствует значению функции принадлежности соответствующего терма лингвистической переменной.

Если условие представляет составное высказывание, то степень истинности сложного высказывания определяется на основе известных значений истинности составляющих его элементарных высказываний при помощи введенных ранее нечетких логических операций в одном из оговоренных заранее базисов.

Активизация в системах нечеткого вывода – это процедура или процесс нахождения степени истинности каждого из элементарных логических высказываний (подзаключений), всех составляющих нечетких продукционных правил. Поскольку заключения делаются относительно выходных лингвистических переменных, то степеням истинности элементарных подзаключений при активизации ставятся в соответствие элементарные функции принадлежности.

Если заключение нечеткого продукционного правила является простым нечетким высказыванием, то степень его истинности равна алгебраическому произведению весового коэффициента и степени истинности antecedента данного нечеткого продукционного правила.

Если заключение представляет составное высказывание, то степень истинности каждого из элементарных высказываний равна алгебраическому произведению весового коэффици-

ента и степени истинности antecedента данного нечеткого продукционного правила.

Если весовые коэффициенты продукционных правил не указаны явно на этапе формирования базы правил, то их значения по умолчанию равны единице.

Аккумуляция, или аккумулярование в системах нечеткого вывода, представляет собой процедуру или процесс нахождения функции принадлежности для каждой из выходных лингвистических переменных множества.

Цель аккумуляции заключается в том, чтобы объединить или аккумуляровать все степени истинности заключений (подзаключений) для получения функции принадлежности каждой из выходных переменных. Причина необходимости выполнения этого этапа состоит в том, что подзаключения, относящиеся к одной и той же выходной лингвистической переменной, принадлежат различным правилам системы нечеткого вывода.

Дефазификация в системах нечеткого вывода – это процесс перехода от функции принадлежности выходной лингвистической переменной к четкому (числовому) значению. Цель дефазификации состоит в том, чтобы, используя результаты аккумуляции всех выходных лингвистических переменных, получить количественные значения для каждой выходной переменной, которая используется внешними по отношению к системе нечеткого вывода устройствами (исполнительными механизмами интеллектуальной САУ).

Система автоматического управления с нечетким контроллером. Архитектура системы автоматического управления с нечетким контроллером, реализующей управление по состоянию, представлена на рис. 2. Обобщенный объект управления включает в себя непосредственно управляемый технологический процесс, усилительно преобразующие механизмы, органы регулирования и датчики измерения переменных состояния объекта управления [3]. Входные переменные, характеризующие реальное и желаемое состояния объекта управления, подвергаются фазификации и используются в системе нечеткого вывода. Система нечеткого вывода содержит базу нечетких продукционных правил обобщенного вида ЕСЛИ «состояние объекта», ТО «воздействие на объект», в которой в нечеткой форме представлены знания экспертов по управлению данным технологическим процессом при движении к желаемому состоянию объекта на основе знаний о величинах, характеризующих действительное состояние объекта. В результате нечеткого вывода и последующей дефазификации получают четкие значения выходных переменных, кото-

рые используются для последующего управления технологическим процессом.

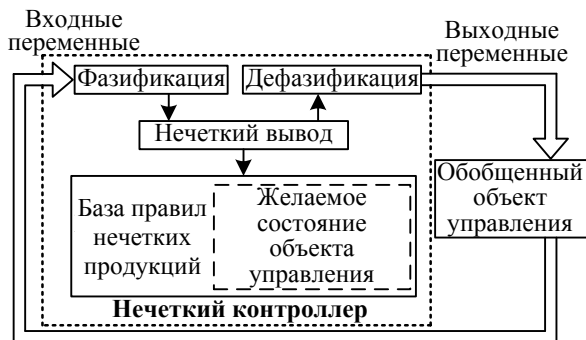


Рис. 2. САУ с нечетким контроллером и управлением по состоянию

Отдельный интерес вызывают исследования нечетких систем регулирования в условиях возникновения ошибок в каналах передачи данных или изменения погрешности в измерительной части схемы управления измерений. Это может быть обусловлено большим количеством внешних факторов электромагнитной природы, оказывающих влияние на элементы технических средств системы управления.

Рассмотрим систему управления с пропорционально-интегральным (ПИ) регулятором и наличием шума во входном канале управления (рис. 3).

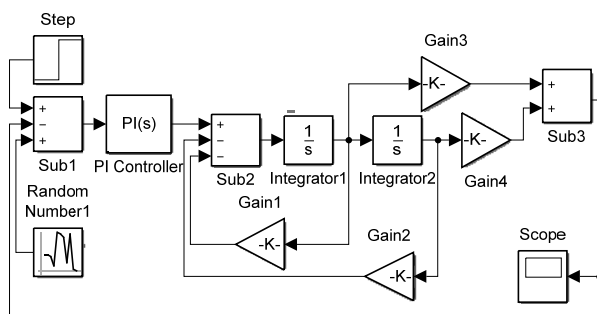


Рис. 3. Структурная схема системы управления с ПИ-регулятором и шумом во входном канале

Графики переходных процессов с ПИ-регулятором с наличием шума и без него приведены на рис. 4.

Для синтеза нечеткого регулятора необходимо определить лингвистические переменные, составить их терм-множества и функции принадлежности. Входными сигналами для контроллера, основанного на нечеткой логике, являются пропорциональная составляющая P и интегральная составляющая I ПИ подобного нечеткого регулятора. Применительно к контроллеру эти сигналы – лингвистические переменные. Для этих переменных вводятся следующие термы. Для P, I лингвистических переменных (рис. 5 и 6):

- отрицательное (Negative);
- нулевое (Zero);
- положительное (Positive).

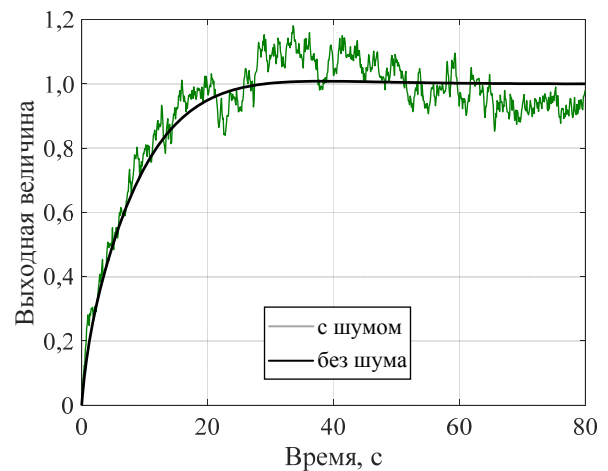


Рис. 4. Переходный процесс системы с ПИ-регулятором с шумом и без него

Для выходной лингвистической переменной (рис. 7):

- небольшое (Small);
- среднее (Medium);
- большое (Large).

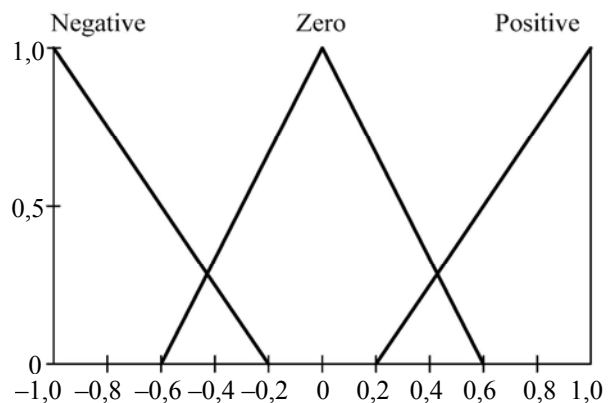


Рис. 5. Функция принадлежности для терм-множества лингвистической переменной P

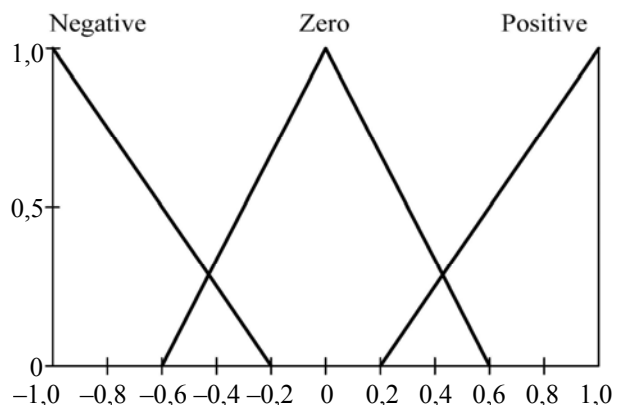


Рис. 6. Функция принадлежности для терм-множества лингвистической переменной I

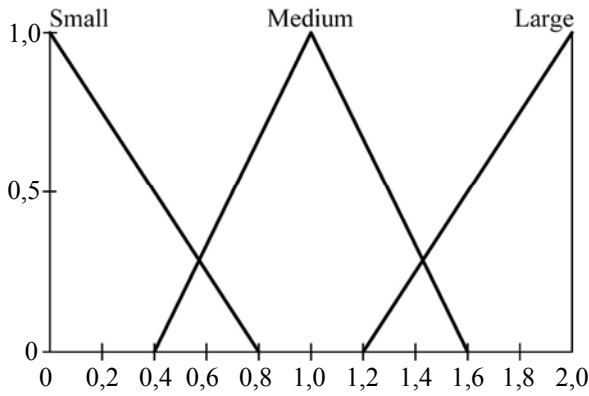


Рис. 7. Функция принадлежности для терм-множества выходной лингвистической переменной

База правил имеет следующий вид:

1. If (P is Negative) and (I is Negative) then (U is Small).
2. If (P is Negative) then (U is Small).
3. If (P is Negative) then (U is Medium).
4. If (P is Negative) then (U is Medium).
5. If (P is Negative) and (I is Positive) then (U is Medium).
6. If (I is Negative) then (U is Small).
7. If (I is Positive) then (U is Medium).
8. If (I is Zero) then (U is Medium).
9. If (P is Zero) then (U is Medium).
10. If (P is Zero) and (I is Zero) then (U is Medium).
11. If (I is Negative) then (U is Medium).
12. If (I is Positive) then (U is Large).
13. If (I is Negative) then (U is Medium).
14. If (I is Positive) then (U is Large).
15. If (P is Positive) and (I is Negative) then (U is Medium).
16. If (P is Positive) then (U is Medium).
17. If (P is Positive) then (U is Large).
18. If (P is Positive) then (U is Large).
19. If (P is Positive) and (I is Positive) then (U is Large).

Поверхность нечеткого вывода показана на рис. 8.

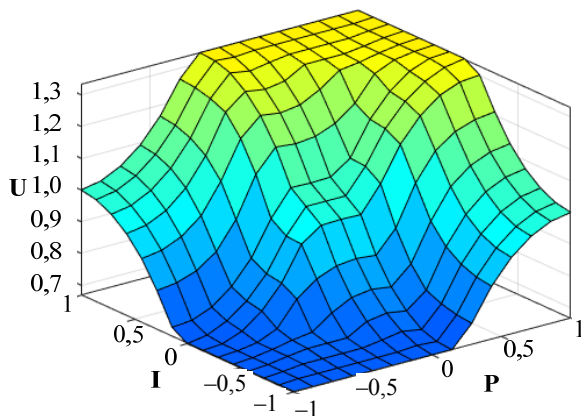


Рис. 8. Поверхность нечеткого вывода

Рассмотрим систему управления и график переходного процесса с ПИ подобным нечетким регулятором с наличием шума во входном канале управления и без него (рис. 9 и 10).

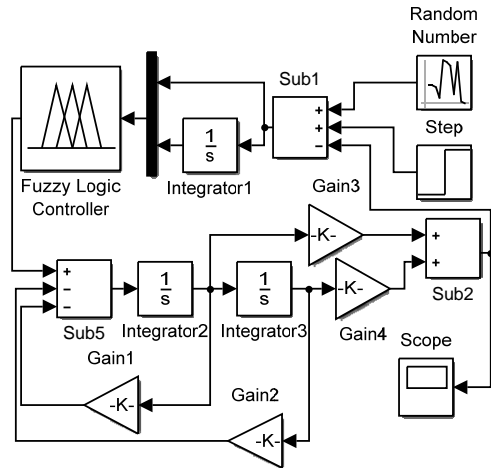


Рис. 9. Структурная схема системы управления с ПИ подобным нечетким регулятором и шумом во входном канале

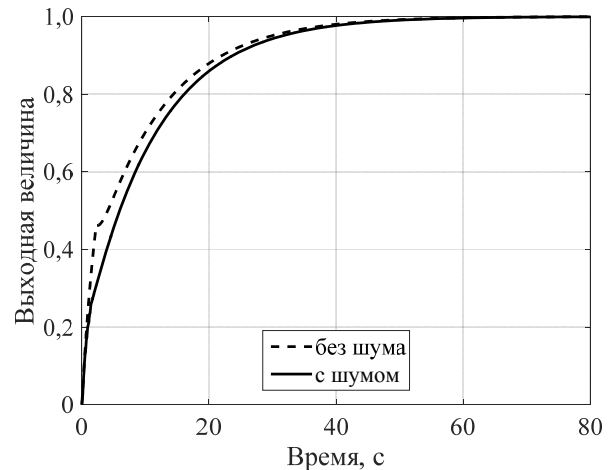


Рис. 10. Переходный процесс системы с ПИ подобным нечетким регулятором с шумом и без него

Время переходного процесса для системы с шумом – 31,5 с (без шума – 29,8 с), перерегулирование – 0%, статическая ошибка – 0%.

Использование ПИ подобного нечеткого регулятора в условиях наличия шума во входном канале управления незначительно увеличивает время переходного процесса по сравнению с системой без шума.

На основании графиков переходного процесса (рис. 4 и 10) можно сделать вывод, что при наличии сложной системы управления в условиях зашумленности входной информации использование ПИ-регулятора не эффективно, в таком случае необходимо применять ПИ-регулятор, основанный на нечеткой логике, кото-

рый обеспечивает желаемое качество переходного процесса. Таким образом, нечеткий регулятор может быть использован в качестве фильтра для незначительного шума во входной информации.

Заключение. При синтезе систем автоматического управления с нечетким контроллером основная доля работы приходится на конструирование базы нечетких продукционных правил. Нечеткий контроллер реализует управление по состоянию, если продукции базы правил строятся с использованием лингвистических переменных, характеризующих состояние

объекта. В этом случае цель управления в виде желаемого состояния объекта управления неявно вводится в базу правил экспертом на стадии формирования базы нечетких продукционных правил. Определение функций принадлежности – наиболее трудоемкий процесс, в наибольшей степени определяющий качество процесса управления системой. Так, для составления наиболее адекватной модели требуется не только знание характера поведения системы в целом, но и определенное число экспериментов, позволяющее оценить недостатки нечеткой модели и устранить их.

Литература

1. Леоненков А. В. Нечеткое моделирование в среде MATLAB и fuzzyTECH. СПб.: БХВ-Петербург, 2005. 736 с.

2. Заде Л. А. Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений. М.: Мир, 1976. 165 с.

3. Рубанов В. Г. Интеллектуальные системы автоматического управления. Нечеткое управление в технических системах. Белгород: Изд-во БГТУ им. В. Г. Шухова, 2010. 170 с.

References

1. Leonenkov A. V. *Nechetkoye modelirovaniye v srede MATLAB i fuzzyTECH* [Fuzzy modeling in MATLAB environment and fuzzyTECH]. St. Petersburg, BHV-Peterburg Publ., 2005. 736 p.

2. Zade L. A. *Ponyatiye lingvisticheskoy peremennoy i yego primeneniye k prinyatiyu priblizhennykh resheniy* [The concept of linguistic variable and its application to the adoption of the approximate solutions]. Moscow, Mir Publ., 1976. 165 p.

3. Rubanov V. G. *Intellektual'nyye sistemy avtomaticheskogo upravleniya. Nechetkoye upravleniye v tekhnicheskikh sistemakh* [Intelligent automatic control system. Fuzzy control in technical systems]. Belgorod, Izdatel'stvo BGTU imeni V. G. Shukhova Publ., 2010. 170 p.

Информация об авторах

Карпович Дмитрий Семенович – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: karpovich@tut.by

Шумский Андрей Николаевич – аспирант кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: andreishumski91@gmail.com

Information about the authors

Karpovich Dmitriy Semenovich – PhD (Engineering), Associate Professor, Head of the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: karpovich@tut.by

Shumski Andrei Nikolaevich – PhD student, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: andreishumski91@gmail.com

Поступила 15.12.2016

УДК 62.50

И. Ф. Кузьмицкий, И. К. Асмыкович, А. В. Лапето
Белорусский государственный технологический университет

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ВЛОЖЕНИЯ ПРИ СИНТЕЗЕ ДИСКРЕТНЫХ ЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ С ЭЛЕМЕНТАМИ ЗАПАЗДЫВАНИЯ

Работа посвящена матричным методам синтеза устройства управления непрерывными объектами. Рассматривается необходимая последовательность математических преобразований для формирования совокупности желаемых законов управления.

Теория вложения разработана в качестве математического аппарата для систем уравнений, в которых отсутствуют отклоняющиеся аргументы по каналам управления. Для объектов управления, описываемых линейными динамическими моделями с отклоняющимися аргументами по каналам управления, предлагается вначале использовать передаточные матрицы, содержащие звенья запаздывания. Затем каждый из элементов дискретной передаточной матрицы преобразуется в дробно-рациональную дискретную передаточную функцию, что дает возможность исключить в явной форме звенья запаздывания.

Применительно к преобразованной математической модели объекта управления используется технология вложения, которая позволяет согласовать матричные уравнения с различной формой и размерностью матриц. Далее формируются желаемые дискретные передаточные матрицы.

Поскольку дискретные передаточные функции формируются относительно переменных состояния, а их размерность увеличена за счет преобразования моделей звеньев запаздывания, то возникает дополнительная проблема в получении информации о части переменных состояния. Для решения этой задачи предложено использовать алгоритм наблюдателя Люенбергера.

Ключевые слова: запаздывание, объект управления, модель, матрица, наблюдатель.

I. F. Kuz'mitskiy, I. K. Asmykovich, A. V. Lapeto
Belarusian State Technological University

USING THE EMBEDDING TECHNOLOGY IN THE SYNTHESIS OF LINEAR DISCRETE SYSTEMS WITH DELAY ELEMENTS

The work is devoted to the matrix methods of synthesis of control systems. The sequence of mathematical transformations necessary to generate the desired set of control laws was considered.

The embedding theory is designed as a mathematical instrument for systems of equations, in which there are no divergent arguments control channels. To control the objects described by linear dynamic models with deviating arguments for control channels is proposed first to use the transfer matrix containing the delay units. Then convert the original transfer matrix. Each of the discrete elements of the transfer matrix is converted to a fractional rational discrete transfer function, which eliminates explicit delay units.

With respect to the transformed mathematical model of the control object the attachment technology that allows you to align the matrix with different shape and dimension of the matrix is used. The next step is the formation of the desired discrete transfer matrices.

Since the discrete transfer functions are formed with respect to the state variables and their dimension is increased due to the conversion of units of delay models, there is the additional problem of obtaining information about the state of the variables. To solve this problem it is proposed to use Luenberger's observer algorithm.

Key words: delay, control object, model, matrix, observer.

Введение. Непрерывные технологические объекты содержат значительное количество распределенных в пространстве управляющих устройств.

При описании таких объектов сосредоточенной линейной моделью имеем запаздывания по каналам управления, что можно представить в виде передаточной матрицы:

$$W_0(p) = \begin{bmatrix} W_{1,1}(p)e^{-\tau_{1,1}p} & \dots & W_{1,s}e^{-\tau_{1,s}p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{m,1}(p)e^{\tau_{m,1}} & \dots & W_{m,s}e^{-\tau_{m,s}p} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где m, s – размерности вектора выхода и вектора управляющих воздействий соответственно; τ_{ij} – величины запаздывания соответствующих пар управляющих и выходных переменных.

При использовании такого подхода возникает ряд трудностей в нахождении законов управления из-за наличия звеньев запаздывания в составе объекта управления. Рассмотрим алгоритм решения подобных задач для дискретных систем управления.

Основная часть. При переходе к дискретному аналогу этой модели имеем:

$$W_0(z) = \begin{bmatrix} W_{1,1}(z)z^{-q_{1,1}} & \dots & W_{1,s}z^{-q_{1,s}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{m,1}(z)z^{-q_{m,1}} & \dots & W_{m,s}z^{-q_{m,s}} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Расширим модели дискретных передаточных функций передаточной матрицы $W_0(z)$ путем включения в их модели элементов запаздывания:

$$W_0 = \begin{bmatrix} W_{1,1}(z) & \dots & W_{1,s}(z) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{m,1}(z) & \dots & W_{m,s}(z) \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Например, передаточную функцию

$$\frac{z^{-1}}{1+2 \cdot z^{-1}} \cdot z^{-2}$$

подставим в виде

$$\frac{0 \cdot z^{-1} + 0 \cdot z^{-2} + z^{-3}}{1 + 2 \cdot z^{-1} + 0 \cdot z^{-2} + 0 \cdot z^{-3}}.$$

В пространстве переменных состояния модель объекта управления примет следующий вид:

$$\begin{aligned} z \cdot x(z) &= A \cdot x(z) + B \cdot v(z), \\ y(z) &= C \cdot x(z), \\ x \in R^n, v \in R^s, y \in R^m, \end{aligned} \quad (4)$$

где x – вектор состояния; v – входной вектор; y – выходной вектор.

Пусть линейный регулятор имеет вид

$$v = G \cdot u - K \cdot y, \quad U \in R^l, \quad (5)$$

где G – матрица связей предкомпенсатора; u – вектор управления на входе систем; K – матрица связей регулятора.

При условии физической наблюдаемости переменных состояния x можем записать вектор состояния:

$$x(z) = W_x^u(z) \cdot u(z). \quad (6)$$

Требуется выбрать матрицы обратных связей регулятора $K(z)$ и предкомпенсатора $G(z)$, чтобы одна или некоторая совокупность передаточных функций приняла желаемое значение $W_{x,j}^u(z)$. Традиционными методами [1, 2] решение ограничено большим числом разных условий.

На основе технологии вложения систем [1] имеем:

$$\begin{aligned} (z \cdot I_n - A) \cdot x - B \cdot v &= 0, \\ -C \cdot x + y &= 0, \\ K(z) \cdot y + v - G(z) \cdot u &= 0, \\ u &= u_1, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\Omega = \begin{bmatrix} z \cdot I_n - A & 0 & -B & 0 \\ -C & I_m & 0 & 0 \\ 0 & K(z) & I_s & -G(z) \\ 0 & 0 & 0 & I_e \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Основные соотношения технологии вложения:

$$\begin{aligned} \Omega &= \Sigma \cdot \Xi, \quad \alpha = \Sigma \cdot \delta, \\ \beta &= \pi \cdot \Xi, \quad W_{\text{ж}} = \pi \cdot \delta, \end{aligned} \quad (9)$$

где Σ, Ξ – обратимые (полные) матрицы; α, β – матрицы вложения; π, δ – дополнительные матрицы собственных размеров.

Для нашей модели:

$$\begin{aligned} \alpha &= [0 \quad 0 \quad 0 \quad I_l]^T, \\ \beta &= [I_n \quad 0 \quad 0 \quad 0]. \end{aligned} \quad (10)$$

В результате подстановки и преобразований получаем:

$$\begin{aligned} \pi_x \cdot B \cdot K(z) \cdot C &= I_n - \pi_x \cdot (I_n - A), \\ \pi_x \cdot B \cdot G(z) &= W_x^u(z). \end{aligned} \quad (11)$$

Задавая некоторую дробно-рациональную матрицу π_x , можно найти $K(z)$ и $G(z)$.

Если учесть, что часть переменных недоступна измерению, то можно дополнить модель системы наблюдателем состояния Люенбергера:

$$\begin{aligned} z \cdot \tilde{x}(z) &= A \cdot \tilde{x}(z) + L \cdot (y - \tilde{y}) + B \cdot v, \\ \tilde{y} &= C \cdot \tilde{x}, \quad \tilde{x}(0) = \tilde{x}_0, \quad \tilde{x} \in R^n, \end{aligned} \quad (12)$$

где \tilde{x} – оценка состояния объекта; L – матрица обратных связей наблюдателя; \tilde{x}_0 – начальное значение \tilde{x} .

Модель регулятора перепишем в виде

$$v = G \cdot u - K \cdot \tilde{x}, \quad u \in R^l. \quad (13)$$

Исходная система уравнений движения системы выглядит так:

$$\begin{aligned} (z \cdot I_n - A) \cdot x - B \cdot v &= x_0, \\ (z \cdot I_n - A) \cdot \tilde{x} - L(z) \cdot y + L(z) \cdot \tilde{y} - B \cdot v &= x_0, \\ -C \cdot x + y &= 0, \\ -C \cdot \tilde{x} + \tilde{y} &= 0, \\ K(z) \cdot \tilde{x} + v - G(z) \cdot u &= 0, \\ u &= v. \end{aligned} \quad (14)$$

Проматрица данной системы имеет вид

$$\Omega = \begin{bmatrix} I_n - A & 0 & 0 & 0 & -B & 0 \\ 0 & z \cdot I_n - A & -L(z) & L(z) & -B & 0 \\ -C & 0 & I_m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -C & 0 & I_m & 0 & 0 \\ 0 & K(z) & 0 & 0 & I_s & -G \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I_l \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Матрицы вложения записываются следующим образом:

$$\begin{aligned}\alpha &= [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ I_l]^T, \\ \beta &= [I_n \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0].\end{aligned}\quad (16)$$

В результате преобразования получаем:

$$\begin{aligned}(\pi_x + \pi_{\bar{x}}) \cdot B \cdot K(z) &= I_n - (\pi_x + \pi_{\bar{x}}) \cdot (z \cdot I_n - A), \\ (\pi_x + \pi_{\bar{x}}) \cdot B \cdot G(z) &= W_{ж,x}^u(z).\end{aligned}\quad (17)$$

Задавая дополнительную матрицу $(\pi_x + \pi_{\bar{x}})$, можно найти $K(z)$ и $G(z)$.

Если задать передаточную матрицу относительно начальных условий x_0 к состоянию x системы, то образ системы будет $W_{ж,x}^0(z)$ и матрицы вложения будут иметь вид

$$\begin{aligned}\alpha &= [I_n \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]^T, \\ \beta &= [I_n \ 0 \ 0 \ 0].\end{aligned}\quad (18)$$

Используя $W_{ж,x}^0(z)$, запишем уравнение для определения матрицы $K(z)$:

$$\begin{aligned}W_{ж,x}^0(z) \cdot B \cdot K(z) \cdot C &= \\ = I_n - W_{ж,x}^0(z) \cdot (z \cdot I_n - A).\end{aligned}\quad (19)$$

Объединив (17) и (19), получим систему уравнений для нахождения матриц $K(z)$ и $G(z)$:

$$\begin{aligned}W_{ж,x}^0(z) \cdot B \cdot K(z) \cdot C &= I_n - W_{ж,x}^0(z) \times \\ &\times (z \cdot I_n - A), \\ W_{ж,x}^0(z) \cdot B \cdot G(z) &= W_{ж,x}^u(z).\end{aligned}\quad (20)$$

Вид решения определяется способом факторизации проматрицы. Можно осуществить факторизацию проматрицы в виде

$$\Omega = \Omega \cdot I_{n+m+s+l}.\quad (21)$$

В этом случае роль матрицы Σ играет сама проматрица, а матрица Ξ представляет собой единичную матрицу. С учетом предложенной факторизации получаем новую систему уравнений:

$$\begin{aligned}(z \cdot I_n - A) \cdot W_{ж,x}^0(z) + B \cdot K^*(z) \times \\ \times C \cdot W_{ж,x}^0(z) &= I_n, \\ (z \cdot I_n - A) \cdot W_{ж,x}^0(z) - B \cdot G^*(z) + \\ + B \cdot K^*(z) \cdot C \cdot W_{ж,x}^u(z) &= 0.\end{aligned}\quad (22)$$

Результаты исследований [3] показывают, что матрицы $K(z) = K^*(z)$ и $G(z) = G^*(z)$.

Можно преобразовать уравнения (22), домножив слева на $(W_{ж,x}^0(z))^{-1}$, что приводит к более удобному виду:

$$\begin{aligned}B \cdot K(z) \cdot C &= (W_{ж,x}^0(z))^{-1} \cdot (z \cdot I_n - A), \\ B \cdot G(z) &= (W_{ж,x}^0(z))^{-1} \cdot W_{ж,x}^u(z).\end{aligned}\quad (23)$$

Во многих случаях желаемые матричные передаточные функции можно отразить через матрицы $A_{ж}$ и $B_{ж}$:

$$\begin{aligned}W_{ж,x}^0(z) &= (z \cdot I_n - A_{ж})^{-1}, \\ W_{ж,x}^u(z) &= (z \cdot I_n - A_{ж})^{-1} \cdot B_{ж}.\end{aligned}\quad (24)$$

Подставляя их в систему уравнений (23), получаем:

$$\begin{aligned}B \cdot K(z) \cdot C &= A - A_{ж}, \\ B \cdot G(z) &= B_{ж}.\end{aligned}\quad (25)$$

Для существования их решения необходимо выполнение тождества [1]:

$$\begin{aligned}\overline{B^L} \cdot (A - A_{ж}) &= 0, \\ (A - A_{ж}) \cdot \overline{C^R} &= 0, \\ \overline{B} \cdot B_{ж} &= 0,\end{aligned}\quad (26)$$

где $\overline{B^L}$, $\overline{C^R}$ – левый и правый делитель нуля матриц B и C соответственно. Наличие $\overline{C^R}$ свидетельствует о наличии недоступных для измерения переменных состояния, что ограничивает желаемую матрицу $A_{ж}$.

При решении задач с наблюдателем система уравнений (26) не содержит матрицы наблюдателя $L(z)$. Если использовать желаемую передаточную матрицу $W_{ж,x}^0(z)$, то имеем систему уравнений, включающих матрицу L :

$$\begin{aligned}(W_{ж,x}^0(z) + \pi_{\bar{x}}) \cdot (z \cdot I_n - A + B \cdot K(z)) &= I_n, \\ \pi_{\bar{x}} \cdot L(z) \cdot C &= W_{ж,x}^0(z) \cdot (z \cdot I_n - A) - I_n.\end{aligned}\quad (27)$$

Объединив уравнения (27) и (26), получим:

$$\begin{aligned}(W_{ж,x}^0(z) + \pi_{\bar{x}}) \cdot B \cdot K(z) &= I_n - \\ - (W_{ж,x}^0(z) + \pi_{\bar{x}}) \cdot (z \cdot I_n - A), \\ (W_{ж,x}^0(z) + \pi_{\bar{x}}) \cdot B \cdot G(z) &= W_{ж,x}^u(z), \\ (W_{ж,x}^0(z) + \pi_{\bar{x}}) \cdot (p \cdot I_n - A + B \cdot K(z)) &= I_n, \\ \pi_{\bar{x}} \cdot L(z) \cdot C &= W_{ж,x}^0(z) \cdot (z \cdot I_n - A) - I_n,\end{aligned}\quad (28)$$

где $\pi_{\bar{x}}$ – вспомогательная неизвестная матрица размера $n \times n$.

Пример. Имеем два конвейера с одним управляющим устройством. Транспортные запаздывания на каждом конвейере совпадают с периодом квантования. Соответствующая модель в пространстве состояний имеет вид (4),

$$\text{где } A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Матрица B обладает левым делителем нуля $\overline{B^L} = [\eta \ 0]$, где η – произвольный полином.

Пусть компоненты вектора состояния доступны измерению, т. е.

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (29)$$

и потребуем, чтобы динамика системы определялась желаемыми матрицами $A_{ж}$ и $B_{ж}$ вида:

$$A_{ж} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -5 \end{bmatrix}, B_{ж} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (30)$$

Желаемая матричная передаточная функция замкнутой системы по входному воздействию (24) имеет вид

$$\begin{aligned} W_{ж,x}^u(z) &= \left(\begin{bmatrix} z & 0 \\ 0 & z \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -5 \end{bmatrix} \right)^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} z & -1 \\ 1 & z+5 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{z^2 + 5 \cdot z + 1} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}. \quad (31) \end{aligned}$$

Решая вышеприведенные уравнения (28), определяем матрицу K и G :

$$\begin{aligned} K &= [1 \ 5], \\ G &= 1. \end{aligned} \quad (32)$$

Пусть доступна измерению первая координата $C = [1 \ 0]$, первый делитель нуля $\overline{C^R} = \begin{bmatrix} 0 \\ \mu \end{bmatrix}$, а μ – произвольный полином.

Подставляя исходные данные в уравнения (22), находим $K = 1$, $G = 1$.

Условия (6) не выполняются, и подставляем полученные значения K и G в уравнение

$$\begin{aligned} W_x^u(z) &= (z \cdot I_n - A + B \cdot K \cdot G)^{-1} B \cdot G = \\ &= \frac{1}{z^2 + 1} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (33)$$

которое не соответствует ранее найденной желаемой функции

$$\frac{1}{z^2 + 5 \cdot z + 1} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}.$$

Следовательно, поставленную задачу можно решить введением в состав системы наблюдателя.

Заключение. Рассмотрена необходимая последовательность математических преобразований для формирования совокупности желаемых законов управления.

Для объектов управления, описываемых линейными динамическими моделями с отклоняющимися аргументами по каналам управления, необходимо вначале использовать передаточные матрицы, содержащие звенья запаздывания. После чего каждый из элементов дискретной передаточной матрицы преобразуется в дробно-рациональную дискретную передаточную функцию, что позволяет исключить в явной форме звенья запаздывания.

Применительно к преобразованной математической модели объекта управления используется технология вложения, которая позволяет согласовать матричные уравнения с различной формой и размерностью матриц. Далее формируются желаемые дискретные передаточные матрицы.

Поскольку дискретные передаточные функции формируются относительно переменных состояния, а их размерность увеличена за счет преобразования моделей звеньев запаздывания, то возникает потребность в получении информации о части переменных состояния. Для решения этой задачи необходимо использовать алгоритм наблюдателя Люенбергера.

Литература

1. Буков В. Н. Вложение систем. Аналитический подход к анализу и синтезу матричных систем. Калуга: Изд-во науч. лит-ры Н. Ф. Бочкаревой, 2006. 720 с.
2. Буков В. Н., Косьянчук В. В., Рябченко В. Н. Вложение систем. Управление при неполной информации // *АиТ*. 2001. № 8. С. 3–20.
3. Буков В. Н., Сизых В. Н. Условия оптимальности в вырожденной задаче аналитического конструирования регуляторов // *АиТ*. 2001. № 7. С. 61–71.

References

1. Bukov V. N. *Vlozheniye sistem. Analiticheskiy podkhod k analizu i sintezu matrichnykh sistem* [Analytical approach to the analysis and synthesis of matrix systems]. Kaluga, Izdatel'stvo nauchnoy literatury N. F. Bochkarevoy, 2006. 720 p.
2. Bukov V. N., Kos'yanchuk V. V., Ryabchenko V. N. System embedding. Control under incomplete information. *AiT* [Automation and Remote Control], 2001, no. 8, pp. 3–20 (In Russian).
3. Bukov V. N., Sizykh V. N. Optimally conditions in the degenerate problem of analytical controller design. *AiT* [Automation and Remote Control], 2001, no. 7, pp. 61–71 (In Russian).

Информация об авторах

Кузьмицкий Иосиф Фелицианович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: kuzmicki@tut.by

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

Лапето Александр Васильевич – ассистент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: AVLapeto@gmail.com

Information about the authors

Kuz'mitskiy Iosif Felitsianovich – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kuzmicki@tut.by

Asmykovich Ivan Kuz'mich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: asmik@tut.by

Lapeto Aleksandr Vasil'yevich – assistant lecturer, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: AVLapeto@gmail.com

Поступила 15.12.2016

УДК 517.977.54

С. А. Овцов, В. В. Сарока

Белорусский государственный технологический университет

**РАЗРАБОТКА ОПТИМАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ
РОБОТОМ-МАНИПУЛЯТОРОМ ГАЛЬВАНИЧЕСКОЙ ЛИНИИ
ДЛЯ ПОГАШЕНИЯ КОЛЕБАНИЙ ПОДВЕСКИ В ПЕРЕХОДНЫХ РЕЖИМАХ**

В статье рассматривается проблема возникновения нежелательной инерции подвески с деталями во время передвижения гальванического робота-манипулятора порталного типа. Раскачивание штанги приводит к уменьшению точности установки рамы автооператора над гальваническими ваннами, нарушению безопасного ведения технологического процесса и увеличению себестоимости продукции.

В связи с заданными условиями, изучая двухмассовую модель системы, разработан метод по устранению колебаний при переходных режимах (разгон или торможение рамы автооператора) переноса деталей между технологическими позициями. Выявлен критерий оптимальности, который включает квадрат амплитуды колебаний, совершаемых подвеской, и квадрат электродинамического усилия, возникающего в обмотках двигателя при передвижении. Данные условия необходимы для максимального быстродействия системы, увеличения точности позиционирования и уменьшения энергозатрат.

С помощью метода динамического программирования Беллмана заданный критерий приведен к минимуму и определена функция оптимального управления робота-манипулятора. На основании полученных математических выкладок синтезирована система оптимального управления и смоделированы графики динамики системы.

В качестве сравнения в статье представлены графики динамики системы с автоматической настройкой оптимального регулятора. Данное сравнение позволяет проверить правильность и точность найденной функции оптимального управления.

Ключевые слова: оптимальное управление, автооператор, критерий оптимальности, функция оптимального управления.

S. A. Ovtsov, V. V. Saroka

Belarusian State Technological University

**THE DEVELOPMENT OF OPTIMAL CONTROL SYSTEMS
BY ROBOTIC-MANIPULATOR OF GALVANIC LINES
FOR MATURITY VIBRATIONS SUSPENSION IN TRANSITION MODES**

The article deals with the problem of unwanted inertia with suspension parts during the movement of galvanic robotic arm gantry. Rocking rod reduces the accuracy of the installation autooperator frame of galvanic baths, a breach of security of the technological process and increase sebestoimsoti products.

In connection with the given conditions, studying the two-mass model of the system, we developed a method to eliminate vibrations during transient (acceleration or deceleration of the frame autooperator) transfer of the parts between technological positions. The optimal criterion which includes the square of the amplitude of oscillations made by the suspension, and the square elektroindmacheskogo force generated in the motor windings when traveling were revealed. These conditions are necessary to maximize system performance, increase positioning accuracy and reduce energy consumption.

Using the method of dynamic programming Bellman specified criterion reduced to a minimum and determined the optimal function of the robot manipulator control. Based on mathematical calculations, synthesize optimal control system and graphics system modeled dynamics.

As a comparison, the article presents the dynamics of the system graphics with automatic adjustment of the optimal regulator. This comparison allows you to check the correctness and accuracy of the found optimal control function.

Key words: optimal control, autooperator, optimality criterion, the function of optimal control.

Введение. Работа порталного автооператора гальванической линии имеет строго циклический характер, при этом переходные режимы движения механизма занимают значительную часть от всей длительности рабочего

цикла робота. Одним из способов повышения эффективности работы автоматизированной гальванической линии является оптимизация переходных режимов движения автооператора с подвеской (разгон/торможение).

Раскачивание подвески с грузом, которое возникает в течение переходных режимов движения автооператора, является причиной его неравномерного движения, дополнительных нагрузок на элементы привода автооператора. Это угрожает безопасному ведению технологического процесса и сокращает производительность.

Колебания могут затруднять точность установки подвески над заданной позицией соответствующей ванны. Особенно это относится к крупногабаритным и тяжелым обрабатываемым деталям. Колебательный характер движения груза может вносить неопределенность в программу автоматизированной работы робота-манипулятора. Кроме того, значительно возрастают динамические нагрузки на элементы привода и металлоконструкцию автооператора, которые уменьшают их надежность.

Существуют три группы способов устранения колебаний груза:

- маневрирование автооператора за счет ручного управления;
- применение специальных подвесок или направляющих;
- использование адаптивных систем управления приводами автооператоров.

Первые два способа в современных условиях гальванического производства не способны обеспечить достаточное качество устранения колебаний подвески: первый способ связан с психофизическими особенностями рабочего-оператора (усталость и пр.), второй – с необходимостью изменения конструкции подвески и направляющих. Поэтому распространенной является третья группа способов.

Устранять колебания подвески можно, управляя скоростью движения манипулятора либо другим кинематическим или динамическим параметром.

Целесообразным является использование, например, нечеткого регулирования, которое в некотором смысле копирует логику человека, его способы принятия решений, по тем или иным воздействиям на движение автооператора. Однако нечеткому регулированию свойственны те же недостатки, что и ручному: движение портального автооператора не является оптимальным.

Характер влияния на движение элементов автооператора должен обеспечивать минимизацию нежелательных (например, динамические нагрузки, максимальное отклонение оси подвески и т. п.) или максимизацию желаемых свойств (например, плавность движения, быстродействие и т. д.) движения системы.

Основная часть. Поставим комплексную задачу оптимального управления движением автооператора с подвеской. Эта задача заключается в том, что необходимо найти оптимальное

управление движением автооператора при устранении колебаний подвески до момента остановки (т. е. рассматривается процесс торможения). Такая постановка задачи позволяет разогнать портальный автооператор по любому закону, при этом колебания подвески сохраняются в течение установившегося движения. Однако, как известно, установившееся движение автооператора составляет небольшую часть от общей продолжительности его перемещения – оно может даже отсутствовать. Поэтому целесообразно поставить задачу устранения колебаний груза именно в течение торможения подвески.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- 1) определить дифференциальное уравнение, описывающее передвижение робота-манипулятора;
- 2) выявить критерий оптимальности, учитывая необходимый параметры;
- 3) вычислить функцию оптимального управления;
- 4) выполнить синтез оптимального управления движения автооператора во время его торможения и с устранением колебаний подвески с учетом ограничений, накладываемых на величину управления.

Автооператор, как правило, может работать в недетерминированной внешней среде, поэтому важно обеспечение оптимальности процесса при воздействии стохастических внешних возмущений. Для этого необходимо получить информацию о текущем состоянии системы, т. е. следует использовать обратные связи по различным параметрам движения.

Для исследований примем двухмассовую модель механизма передвижения автооператора (рис. 1), которая достаточно широко используется в задачах исследования динамики движения роботов-манипуляторов и оптимизации их движения [1].

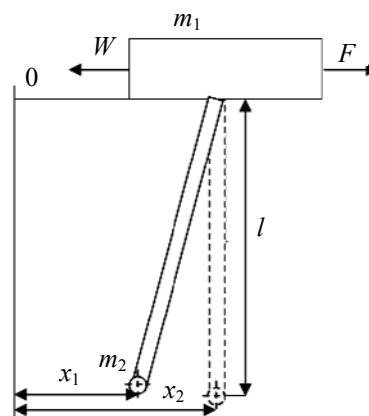


Рис. 1. Двухмассовая модель системы движения робота-манипулятора

Стоит отметить, что рассматривается весь цикл торможения/разгона робота-манипулятора, а не разбивается на определенные этапы. Такое исследование проблемы позволяет получить более точный и наглядный результат. Однако даже с учетом всех перечисленных требований всех недостатков в разработке системы оптимального управления не избежать.

Приведенная расчетная схема описывается системой дифференциальных уравнений [1]:

$$\begin{cases} m_1 \dot{x}_1 + m_2 \dot{x}_2 = F - W \operatorname{sign} \dot{x}_1, \\ \ddot{x}_2 + \frac{g}{l}(x_2 - x_1) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где m_1 – приведенная масса рамы автооператора; x_1, x_2 – начальные и конечные положения подвески при передвижении рамы автооператора соответственно; m_2 – масса подвески с грузом; F – суммарное тяговое или тормозное усилие, действующее на раму; W – приведенная сила сопротивления перемещению рамы; g – ускорение свободного падения; l – длина подвески.

Будем полагать, что при перемещении рамы в течение торможения рама не меняет свою скорость, т. е. $\operatorname{sign} \dot{x}_1 = 1$. Приведенную систему дифференциальных уравнений можно свести к одному уравнению второго порядка относительно разницы перемещений $x = x_1 - x_2$ [1]:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = \frac{F - W}{m_1}, \quad (2)$$

где $\omega = \sqrt{\frac{(m_1 + m_2)g}{m_1 l}}$ – частота собственных

маятниковых колебаний груза относительно подвижной точки подвеса.

Дифференциальное уравнение (2) можно представить в виде системы канонических уравнений, если принять следующие обозначения

$$u = \frac{F - W}{m_1}, \quad y_1 = x:$$

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = y_2, \\ \dot{y}_2 = u - \omega^2 y_1. \end{cases} \quad (3)$$

В качестве критерия оптимизации выберем комплексный (кинематически-динамический) интегральный критерий, который отражает в соответствующих пропорциях величину квадрата отклонения подвески с грузом от вертикали и величину квадрата динамической составляющей приводного усилия:

$$I = \int_0^T \left[k_1 \dot{x}^2 + k_2 \left(\frac{F - W}{m_1} \right)^2 \right] dt, \quad (4)$$

где k_1, k_2 – коэффициенты, стоящие при единичных условиях и которые можно записать в таком виде [2]:

$$\begin{cases} k_1 = \delta_1 \bar{I}_1^{-1}, \\ k_2 = (1 - \delta_1) m_1^2 \bar{I}_2^{-1}, \end{cases} \quad (5)$$

где δ_1 – весовой коэффициент, учитывающий важность первого слагаемого в подынтегральном выражении критерия (5); \bar{I}_1, \bar{I}_2 – минимально возможные значения единичных критериев.

Такая структура критерия позволяет получить оптимальное управление движением автооператора.

Поясним выбор именно такого критерия. По некоторым видам операций транспортировки требуется, чтобы величина отклонения подвески с грузом от вертикали была минимальной. Предыдущие исследования основываются на принципе максимума, что, как известно, увеличивает динамические нагрузки в приводе механизма перемещения рамы, хотя общая продолжительность торможения минимальна.

Что касается минимизации динамической составляющей приводного усилия, то это позволит сократить электрические потери в обмотках двигателя, поскольку эквивалентный момент асинхронного двигателя и двигателя постоянного тока независимого возбуждения примерно пропорциональны эквивалентному току, который определяет электрические потери [3].

С учетом введенных выше обозначений критерий по выражению (4) можно переписать в следующем виде:

$$I = \int_0^T [k_1 y_1^2 + k_2 u^2] dt. \quad (6)$$

Для минимизации критерия (6) используем метод динамического программирования Р. Беллмана [4]. Основное функциональное уравнение запишем так:

$$\min \left[k_1 y_1^2 + k_2 u^2 + \frac{\partial S}{\partial y_1} y_2 + \frac{\partial S}{\partial y_2} (u - \omega^2 y_1) \right] = 0, \quad (7)$$

где S – функция Беллмана.

Минимум правой части уравнения (7) будем искать по параметру управления u , для чего продифференцируем его по u и приравняем полученное выражение к нулю:

$$2k_2 u + \frac{\partial S}{\partial y_2} = 0. \quad (8)$$

Найдем из уравнения (8) искомое u :

$$u = -\frac{1}{2k_2} \frac{\partial S}{\partial y_2}. \quad (9)$$

Подставим найденное значение u в уравнение (7), в результате чего получим:

$$k_1 y_1^2 + \frac{\partial S}{\partial y_1} y_2 - \frac{\partial S}{\partial y_2} y_1 \omega^2 - \frac{1}{4k_2} \left(\frac{\partial S}{\partial y_2} \right)^2 = 0. \quad (10)$$

Выражение (10) является нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных. Искать его решение следует в виде квадратичной формы, как принято при решении подобных задач [5]:

$$S = A_1 y_1^2 + A_2 y_1 y_2 + A_3 y_2^2, \quad (11)$$

где A_1, A_2, A_3 – постоянные коэффициенты, которые необходимо определить.

Возьмем частные производные выражения (11) относительно y_1 и y_2 :

$$\frac{\partial S}{\partial y_1} = 2A_1 y_1 + A_2 y_2, \quad (12)$$

$$\frac{\partial S}{\partial y_2} = A_2 y_1 + 2A_3 y_2. \quad (13)$$

Подставим полученные формулы (12) и (13) в уравнение (10) и получим:

$$\left(k_1 - \frac{A_3^2}{4k_2} - A_3 \omega^2 \right) y_1^2 + \left(A_2 - \frac{A_2^2}{k_2} \right) y_1^2 + \left(2A_1 - \frac{A_2 A_3}{k_2} - 2A_2 \omega^2 \right) y_1 y_2 = 0. \quad (14)$$

Уравнение (14) будет справедливым в том случае, когда выражения в скобках будут равны нулю, поскольку $y_1 \neq 0, y_2 \neq 0$. Поэтому формулу (14) можно заменить системой нелинейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} k_1 - \frac{A_3^2}{4k_2} - A_3 \omega^2 = 0, \\ A_2 - \frac{A_2^2}{k_2} = 0, \\ 2A_1 - \frac{A_2 A_3}{k_2} - 2A_2 \omega^2 = 0. \end{cases} \quad (15)$$

Из решения системы уравнений (15) выберем один действительный корень, который не приводит к потере устойчивости системы.

Подставив найденные корни в выражение (9), получим следующую функцию оптимального управления:

$$u = \frac{y_1 \left[k_2 \omega^2 - \sqrt{k_2 (k_1 + k_2 \omega^4)} \right]}{k_2} - \frac{\sqrt{2} y_1 y_2 \sqrt{k_2 \left[\sqrt{k_2 (k_1 + k_2 \omega^4)} - k_2 \omega^4 \right]}}{k_2}. \quad (16)$$

Итак, нам удалось синтезировать функцию управления $u = u(y_1, y_2, k_1, k_2, \omega)$.

Используя пакет Matlab, можно смоделировать оптимальную систему управления передвижением робота-манипулятора с автоматической настройкой регулятора. Однако следует отметить, что установки для синтеза регулятора подобраны теоретическим путем, чтобы обеспечить идеальные переходные процессы.

После моделирования получаем следующие графики динамики системы: погашение колебаний подвески с деталями (рис. 2) и уменьшение электродинамического усилия (рис. 3).

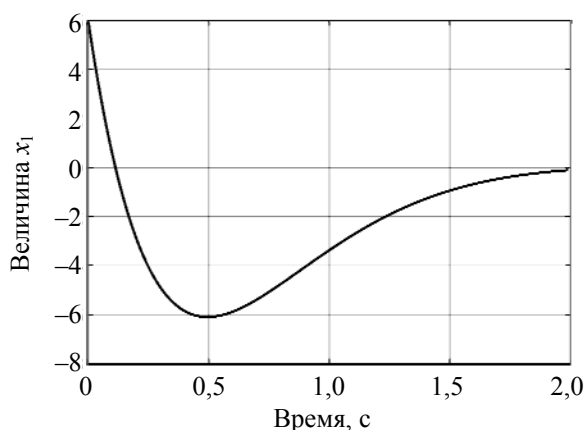


Рис. 2. График динамики системы относительно амплитуды раскачивания

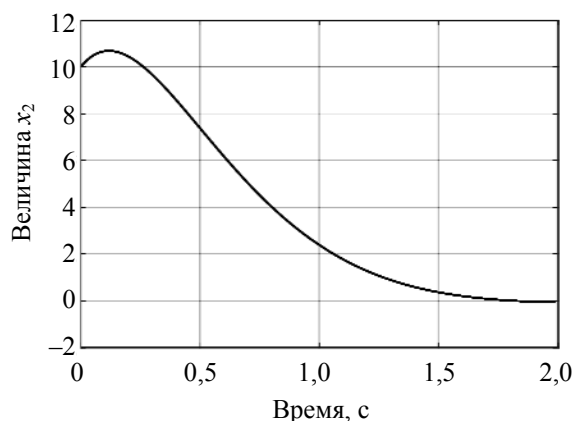


Рис. 3. График динамики системы относительно скачка электродинамического усилия

Как видно из графиков, время переходного процесса составляет 2 с, отклонение от желаемого

мой величины для амплитуды – 60%, а для электродинамического усилия – 6,5%.

С помощью найденной функции (16) можно создать структурную схему системы управления автооператором (рис. 4).

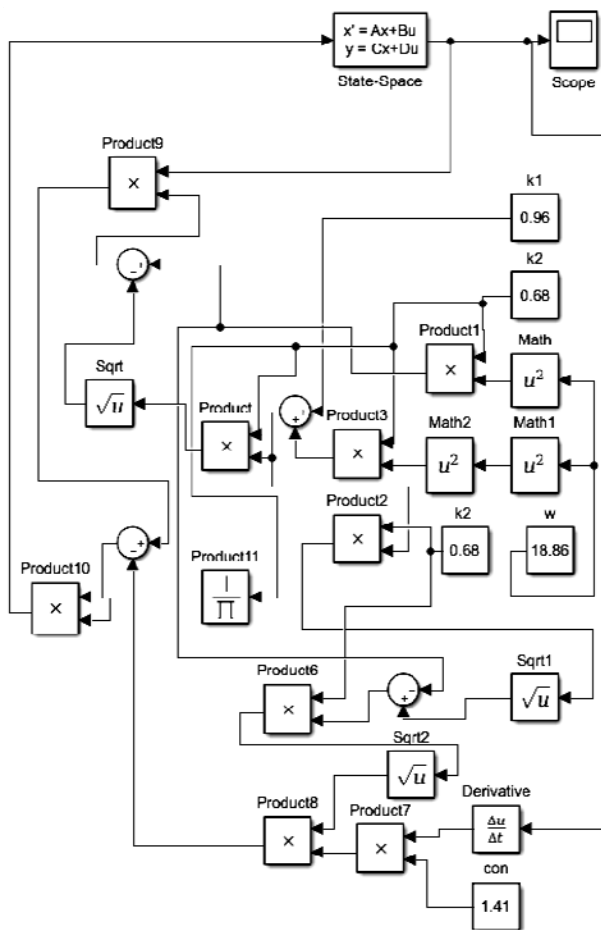


Рис. 4. Структурная схема системы управления с оптимальным регулятором

В ходе моделирования получаем следующие графики динамики системы (рис. 5 и 6).

В результате моделирования время переходного процесса улучшилось (0,9 с), а также уменьшилось отклонение от желаемой величины для амплитуды (34%). Однако стоит отметить, что отклонение для электродинамического усилия возросло (36%).

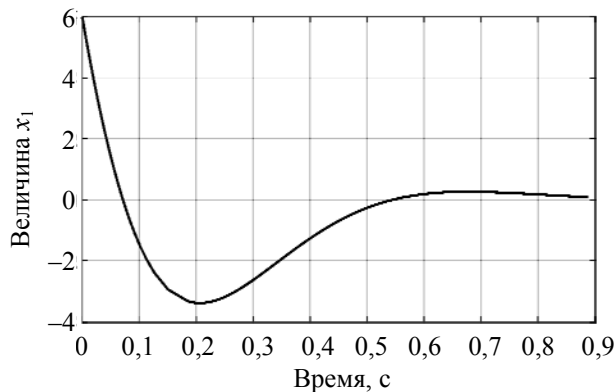


Рис. 5. График динамики системы относительно амплитуды раскачивания с оптимальным регулятором

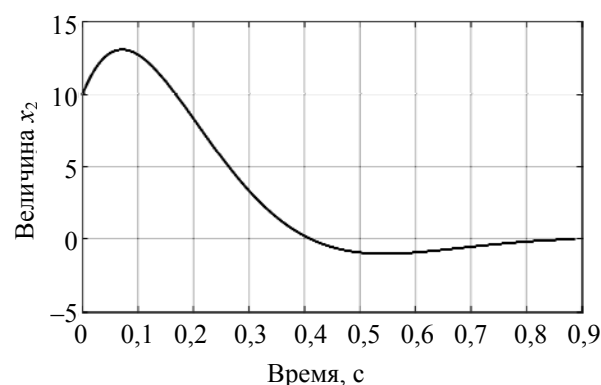


Рис. 6. График динамики системы относительно скачка электродинамического усилия с оптимальным регулятором

Заключение. Использование метода динамического программирования и прямого вариационного метода дает возможность осуществить оптимизацию режима торможения рамы, причем характер оптимального управления движением рамы в горизонтальном направлении является плавным, а абсолютное значение управления не превышает установленные пределы.

Недостатком полученного оптимального управления является то, что длина подвески остается неизменной во времени – это делает невозможным совмещать две операции: перемещение рамы и подъем/опускание груза, что, в свою очередь, увеличивает продолжительность перемещения груза из одного положения в другое.

Литература

1. Ловейкин В. С., Ромасевич Ю. О. Комплексный синтез оптимального управления движением грузоподъемного крана // Автоматизация производственных процессов в машиностроении и приборостроении. 2011. № 45. С. 385–389.
2. Геронимус Я. Л., Перельмутер М. М. О некоторых методах определения оптимального закона движения, рассматриваемого как управляющее воздействие // Машиноведение. 1966. № 6. С. 6–24.
3. Смахов А. А., Ерофеев Н. И. Оптимальное управление подъемно-транспортными машинами // М.: Машиностроение, 1975. 239 с.
4. Беллман Р., Дрейфус С. Прикладные задачи динамического программирования. М.: Наука, 1965. 460 с.

5. Олейников В. А., Золотов Н. С., Пришвин А. М. Основы оптимального и экстремального управления. М.: Высш. шк., 1969. 296 с.

References

1. Loveykin V. S., Romasevich Yu. O. A comprehensive synthesis of the optimal motion control crane. *Avtomatizatsiya proizvodstvennykh protsessov v mashinostroenii i priborostroenii* [Automation of production processes in mechanical engineering and instrument], 2011, no. 45, pp. 385–389 (In Russian).
2. Geronimus Y. L., Perel'muter M. M. Some methods of determining the optimum law of motion, considered as the control action. *Mashinovedeniye* [Knowing machines], 1966, no. 6, pp. 6–24 (In Russian).
3. Smekhov A. A., Erofeev N. I. *Optimal'noye upravleniye pod'yemno-transportnymi mashinami* [Optimal control of handling machinery]. Moscow, Mashinostroeniye Publ., 1975. 239 p.
4. Bellman R., Dreyfus S. *Prikladnyye zadachi dinamicheskogo programmirovaniya* [Applications of dynamic programming]. Moscow, Nauka Publ., 1965. 460 p.
5. Oleynikov V. A., Zolotov N. S., Prishvin A. M. *Osnovy optimal'nogo i ekstremal'nogo upravleniya* [Foundations of optimal control and extreme]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1969. 296 p.

Информация об авторах

Овцов Сергей Александрович – аспирант кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: s.ovtsov@mail.ru

Сарока Виктор Викторович – кандидат технических наук, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: viksar@mail.ru

Information about the authors

Ovtsov Sergey Aleksandrovich – PhD student, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: s.ovtsov@mail.ru

Saroka Viktor Viktorovich – PhD (Engineering), Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: viksar@mail.ru

Поступила 15.12.2016

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И ОБУЧАЮЩИЕ СИСТЕМЫ

УДК 681.518

Ю. О. Герман

Белорусский государственный технологический университет

ФОРМАЛИЗОВАННАЯ МОДЕЛЬ «ВИРТУАЛЬНОГО» УЧИТЕЛЯ

Приведено описание формализованной модели поведенческой базы знаний «виртуального» учителя в системе электронного обучения. Модель состоит из логических формул, включающих состояния «учителя» и сигналы, поступающие от «ученика». Задача вывода, решаемая на поведенческой базе знаний, требует найти новое состояние «учителя» в зависимости от предполагаемого текущего состояния «ученика» и самого «учителя». Рассмотрен вариант с противоречивой базой или нечеткой поведенческой базой знаний. Показано, как сформулировать общую математическую задачу, что позволяет с единых позиций строить поведение «виртуального» учителя в электронной обучающей системе. Задача вывода решения в противоречивой базе знаний решается с позиций отыскания максимального непротиворечивого ее подмножества, из которого выводится доказываемая формула.

Ключевые слова: база знаний, обучающая система, «виртуальный» учитель, вывод.

Yu. O. German

Belarusian State Technological University

A FORMAL MODEL OF “VIRTUAL” TUTOR

A formalized description of the behavioral knowledge base model of the virtual tutor in electronic learning system is given. The model consists of a number of logical formulas including the tutor's states and the signals coming from the disciple. An inference problem solved on the basis of the behavioral knowledge base requires to find a new state of the tutor in dependence of his current state and the state of the disciple. The paper deals with the contradictory and fuzzy knowledge bases and suggests a new general problem formulation enabling one to build a tutor behavior in electronic learning system. The inference problem in contradictory system is solved on the basis of finding a maximum non-contradictory subset of the knowledge model providing sound proving for the theorem.

Key words: knowledge base, learning system, “virtual” tutor, inference.

Введение. Современное программное обеспечение для е-обучения представлено как простыми HTML-страницами, так и сложными системами управления обучением и учебным контентом (Learning Content Management Systems), использующимися в корпоративных компьютерных сетях. Сложные современные системы е-обучения включают (в том или ином виде и объеме) мультимедийный контент, поддержку интерактивного общения на естественном языке, развитую систему поиска информации, оценки знаний, средства обучения решению задач, техническую поддержку общения на разных уровнях и т. д.

В организации электронного обучения в настоящее время стандартом является SCORM (Shareable Content Object Reference Model) – международный стандарт для обмена учебными материалами на базе адаптированных спе-

цификаций. Цель SCORM можно определить как независимость содержания электронного учебника от программы управления, что обеспечивает многократность использования учебных модулей, их переносимость и модификацию. В настоящее время рынок обучающих электронных систем представлен разными по сложности и возможностям адаптации к «личности» обучаемого программными системами. Современные тенденции развития рынка обучающих е-систем направлены в сторону унификации и увеличения функциональности систем. Использование коммерческих систем управления электронным обучением не доступно большинству отечественных вузов по причине их высокой стоимости и необходимости продления лицензии на каждый учебный год. Системы с открытым исходным кодом позволяют реализовать тот же набор

возможностей, что и коммерческие с существенно меньшими затратами и большей эффективностью. В конце прошлого века в связи с бурным развитием теоретико-прикладных аспектов искусственного интеллекта Брауном и Венгером было введено понятие «интеллектуальные обучающие системы» (ITS – Intelligent Tutoring System) [1, 2]. Ранее системы такого рода существовали под названием CAES (Computer-Aided Educational Systems), что не передавало роль искусственного интеллекта в той мере, в какой эта роль, несомненно, вышла на передний план в последнее время. Архитектура ITS состоит из трех модулей: модуля знаний (по предметной области), модуля «учителя» и модуля «ученика». Последние два задают поведение участников процесса обучения. Для описания поведения используются модели (знаний) на основе правил (rule-based models), а также модели на основе ограничений (constraint-based models).

Развитая система электронного on-line обучения строится как приложение, интегрирующее процессы «учителя» и «ученика», поведение которых организуется в соответствии с поведенческой базой знаний [3]. Основная задача, которая стоит перед разработчиками таких систем и рассматривается в настоящей работе, заключается в создании и развитии формальных средств для синтеза поведения «виртуального» учителя в различных контекстах процесса обучения. Для формального представления поведенческой базы знаний необходимо ввести множество сигналов, поступающих от «ученика», и множество состояний «учителя». Отслеживание процесса обучения сводится к определению следующих признаков (состояний «ученика» – A_i) [4]:

- 1) учащийся бессистемно просматривает материал (A_1);
- 2) учащийся возвращается к ранее пройденным фрагментам учебника (A_2);
- 3) учащийся остановился на некотором вопросе на долгое время (A_3);
- 4) процесс изучения завершен (инициируется учеником) (A_4);
- 5) ученик плохо отвечает на вопросы (A_5);
- 6) ученик не отвечает на сообщение (сообщение может быть нейтральным) (A_6);
- 7) ученик отказался от прохождения теста (A_7);
- 8) ученик прошел тест успешно (плохо) (A_8);
- 9) ученик слишком быстро просматривает страницы (A_9);
- 10) часто используется хэлпер (помощник) (A_{10});
- 11) выполнен переход на другую (не связанную) тему (A_{11});
- 12) ученик не пользуется хэлпером (A_{12});

13) ученик часто переходит к одной и той же странице (A_{13});

14) ученик проскакивает через страницы (A_{14});

15) ученик задерживается мало времени на более сложных страницах (A_{15});

16) ученик игнорирует инструкции «учителя» (A_{16});

17) ученик игнорирует предложение помощи или запрос (A_{17});

18) выбрана новая тема для изучения (A_{18});

19) истекло контрольное время (A_{19}).

Автомат «учитель» может находиться в следующих обобщенных состояниях [4]:

W_{obs} – наблюдение;

W_{contr} – контроль знаний;

W_{distr} – вмешательство;

W_{plan} – оценка состояния и планирование стратегии поведения.

В состоянии «Наблюдение» автомат «учитель» не вмешивается в процесс обучения, но отслеживает поведение ученика, а именно: что просматривает ученик, сколько времени, просматривает ли он материал в некоторой допустимой последовательности или хаотически и т. д. В состоянии «Контроль знаний» выполняется проверка усвоения материала в форме тестов или вопросов. Состояние «Вмешательство» предполагает, что учитель обнаружил отклонение от процесса обучения и требует от ученика выполнить определенные действия, например, вернуться к конкретному материалу, ответить на вопросы (пройти тест), сделать напоминание о том, что поведение ученика контролируется и оценивается и т. п. В состоянии «Оценка состояния и планирование стратегии поведения» выполняется коррекция состояния «учителя».

Перейдем к описанию поведенческой базы знаний системы с помощью формул логики.

Основная часть. Формулы поведенческой базы знаний могут быть представлены следующим (упрощенным) образом:

$$\begin{aligned}
 & W_{obs}(t) \vee W_{distr}(t) \vee W_{contr}(t) \vee W_{plan}(t), \\
 & \neg W_{obs}(t) \vee \neg W_{distr}(t), \neg W_{obs}(t) \vee \neg W_{contr}(t), \\
 & \neg W_{obs}(t) \vee \neg W_{plan}(t), \neg W_{distr}(t) \vee \neg W_{contr}(t), \\
 & \neg W_{distr}(t) \vee \neg W_{plan}(t), \neg W_{contr}(t) \vee \neg W_{plan}(t), \\
 & W_{obs}(t+1) \vee W_{distr}(t+1) \vee W_{contr}(t+1) \vee \\
 & \quad \vee W_{plan}(t+1) \vee Stop, \\
 & \neg W_{obs}(t+1) \vee \neg W_{distr}(t+1), \neg W_{obs}(t+1) \vee \\
 & \quad \vee \neg W_{contr}(t), \neg W_{obs}(t+1) \vee \neg W_{plan}(t+1), \\
 & \quad \neg W_{distr}(t+1) \vee \neg W_{contr}(t+1), \\
 & \quad \neg W_{distr}(t+1) \vee \neg W_{plan}(t+1), \\
 & \quad \neg W_{contr}(t+1) \vee \neg W_{plan}(t+1), \\
 & nil \rightarrow \neg A_1 \& \neg A_2 \& \neg A_3 \& \dots \& \neg A_{19}, \\
 & nil \vee A_1 \vee A_2 \vee A_3 \vee \dots \vee A_{19}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& Stop \rightarrow \neg W_{obs}(t+1) \& \neg W_{distr}(t+1) \& \\
& \quad \& \neg W_{contr}(t+1) \& \neg W_{plan}(t+1), \\
& \quad A_4 \rightarrow Stop, A_{18} \rightarrow W_{contr}(t+1), \\
& W_{obs}(t) \& A_{10} \rightarrow W_{distr}(t+1) \vee W_{contr}(t+1), \\
& W_{obs}(t) \& (A_1 \vee A_2 \vee A_3 \vee A_{11} \vee A_{13}) \rightarrow W_{distr}(t+1), \\
& \quad W_{obs}(t) \& (A_6 \vee A_7) \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& \quad W_{obs}(t) \& A_{10} \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& \quad W_{obs}(t) \& A_{12} \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& W_{obs}(t) \& (A_9 \vee A_{14} \vee A_{15}) \rightarrow W_{distr}(t+1) \vee \\
& \quad \vee W_{contr}(t+1), \\
& \quad W_{obs}(t) \& nil \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& \quad W_{distr}(t) \& nil \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& \quad W_{contr}(t) \& nil \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& \quad W_{plan}(t) \& nil \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& W_{distr}(t) \& A_5 \rightarrow W_{obs}(t+1) \vee W_{contr}(t+1), \\
& \quad W_{distr}(t) \& (A_6 \vee A_{17}) \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& W_{distr}(t) \& A_{19} \rightarrow W_{obs}(t+1) \vee W_{plan}(t+1), \\
& \quad W_{contr}(t) \& A_3 \rightarrow W_{plan}(t+1), \\
& \quad W_{contr}(t) \& (A_4 \vee A_8) \rightarrow W_{obs}(t+1), \\
& \quad W_{contr}(t) \& A_{19} \rightarrow Stop, \\
& \quad W_{plan}(t) \& (A_3 \vee A_{19}) \rightarrow W_{obs}(t+1).
\end{aligned}$$

В системе (1) *nil* соответствует отсутствию сигнала или нераспознанному сигналу. Итак, система «учитель – ученик» описывается как система взаимодействующих автоматов, причем поведение автомата «учитель» основано на поведенческой базе знаний, а поведение автомата «ученик» реализуется «учителем» гипотетически (модельно) на основании распознавания состояния «ученика» по сигналам (признакам). «Учитель» работает за «ученика» в том смысле, что принимает решения о его поведении по поступающим сигналам. Рассмотрим, как получить вывод решения в системе. В общем случае эта система может быть противоречивой или нечеткой. Пусть для каждого дизъюнкта D_k известна нечеткая мера p_k принадлежности его к множеству истинных формул (т. е. мера истинности). Пусть далее требуется найти корни x_1, x_2, \dots, x_n и проверить статистическую адекватность ему решения. Для каждого дизъюнкта D_k вводим булеву переменную $q_k \in 0,1$ и две импликации:

$$\begin{aligned}
q_k &\rightarrow D_k, \\
D_k &\rightarrow q_k.
\end{aligned} \quad (2)$$

Потребуем

$$\sum_k (q_k - p_k)^2 / p_k \rightarrow \min. \quad (3)$$

Функционал (3) соответствует формуле для критерия χ^2 . Он преобразуется к линейной целевой функции после возведения в квадрат выражения под знаком суммы:

$$\sum_k (q_k - p_k)^2 / p_k = \sum_k (1 - 2p_k)q_k / p_k \rightarrow \min. \quad (4)$$

Таким образом, получаем линейную систему неравенств с целевой линейной функцией и 0,1-переменными (дизъюнкту $\bigvee_i x_i^{\alpha_i}$ соответствует алгебраическое неравенство $\sum_i x_i^{\alpha_i} \geq 1$).

Эту задачу можно решить методом, изложенным в [5]. Статистическую адекватность решения следует проверить с помощью статистического критерия (в качестве иллюстрации похожей задачи с применением критерия χ^2 и подхода к ее решению см. [6]). Таким образом, задача построения выводов в нечеткой системе сводится к следующему:

- 1) построить целевую функцию (4);
- 2) заменить дизъюнкты алгебраическими неравенствами;
- 3) добавить в систему отрицание $\neg\phi$ доказываемой формулы ϕ с мерой истинности $p_{\neg\phi} = 1 - p_\phi$. Найти корни.

Если решения нет, то формула доказана. Если решение есть, то проверить его статистическую адекватность (например, как показано в [4]). Если решение не «проходит» тест на адекватность, то считать ϕ доказанной. Если решение удовлетворяет статистическому критерию, то вывести ϕ нельзя. В случае противоречивой или четкой непротиворечивой системы функционал (4) преобразуется к виду

$$\sum_k (q_k - p_k)^2 \rightarrow \min, \quad (5)$$

и решение можно искать через определение максимального непротиворечивого подмножества дизъюнктов, из которого выводима доказываемая формула [6].

Обратимся к иллюстрации. Требуется вывести формулу $\phi = \neg x_2$ в системе с четкими формулами ($\forall k p_k = 1.0$):

$$\begin{aligned}
q_1 &\leftrightarrow x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3, \\
q_2 &\leftrightarrow \neg x_1 \vee \neg x_2, \\
q_3 &\leftrightarrow x_1 \vee \neg x_3, \\
q_4 &\leftrightarrow \neg x_1 \vee \neg x_3, \\
q_5 &\leftrightarrow x_2 \vee x_3, \\
&\quad x_2.
\end{aligned} \quad (6)$$

Целевая функция:

$$-q_1 - q_2 - q_3 - q_4 - q_5 \rightarrow \min. \quad (7)$$

Эту систему можно решить, например, в Excel, заменив символы логических операций соответствующими символами алгебраических операций и используя следующие эквивалентности:

$$\begin{aligned}
A \rightarrow B &= \neg A \vee B, \\
\neg A &= 1 - A.
\end{aligned}$$

Получаем:

$$\begin{aligned}
 & -q_1 + x_1 - x_2 + x_3 \geq -1, \\
 & \quad -x_1 + q_1 \geq 0, \\
 & \quad x_2 + q_1 \geq 1, \\
 & \quad -x_3 + q_1 \geq 0, \\
 & -q_2 - x_1 - x_2 \geq -2, \\
 & \quad x_1 + q_2 \geq 1, \\
 & \quad x_2 + q_2 \geq 1, \\
 & -q_3 + x_1 - x_3 \geq -1, \\
 & \quad -x_1 + q_3 \geq 0, \\
 & \quad x_3 + q_3 \geq 1, \\
 & -q_4 - x_1 - x_3 \geq -2, \\
 & \quad x_1 + q_4 \geq 1, \\
 & \quad x_3 + q_4 \geq 1, \\
 & -q_5 + x_2 + x_3 \geq 0, \\
 & \quad -x_2 + q_5 \geq 0, \\
 & \quad -x_3 + q_5 \geq 0, \\
 & -q_1 - q_2 - q_3 - q_4 - q_5 \rightarrow \min.
 \end{aligned}$$

Решение в Excel дает: $x_1 = 0, x_2 = 1, x_3 = 0, q_1 = 0, q_2 = q_3 = q_4 = q_5 = 1$. Можно сделать вывод о том, что максимальное по включению непротиворечивое множество содержит дизъюнкты q_2, q_3, q_4, q_5 . В этом множестве выполняется формула x_2 . Теперь следует присоединить к системе дизъюнкцию тех q_i , которые получили нулевое значение в найденном решении. В примере нужно присоединить к системе q_1 и выполнить повторный поиск решения. Новое решение будет таким: $x_1 = 0, x_2 = 1, x_3 = 1, q_1 = 1, q_2 = 1, q_3 = 0, q_4 = q_5 = 1$. Присоединим к системе формулу q_3 . К этому моменту система примет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 & -q_1 + x_1 - x_2 + x_3 \geq -1, \\
 & \quad -x_1 + q_1 \geq 0, \\
 & \quad x_2 + q_1 \geq 1, \\
 & \quad -x_3 + q_1 \geq 0, \\
 & -q_2 - x_1 - x_2 \geq -2, \\
 & \quad x_1 + q_2 \geq 1, \\
 & \quad x_2 + q_2 \geq 1, \\
 & -q_3 + x_1 - x_3 \geq -1, \\
 & \quad -x_1 + q_3 \geq 0, \\
 & \quad x_3 + q_3 \geq 1, \\
 & -q_4 - x_1 - x_3 \geq -2, \\
 & \quad x_1 + q_4 \geq 1, \\
 & \quad x_3 + q_4 \geq 1, \\
 & -q_5 + x_2 + x_3 \geq 0, \\
 & \quad -x_2 + q_5 \geq 0, \\
 & \quad -x_3 + q_5 \geq 0, \\
 & \quad q_1 = 1, \\
 & \quad q_3 = 1, \\
 & -q_1 - q_2 - q_3 - q_4 - q_5 \rightarrow \min.
 \end{aligned}$$

Решение: $x_1 = 1, x_2 = 1, x_3 = 1, q_1 = 1, q_2 = 0, q_3 = 1, q_4 = 0, q_5 = 1$. Присоединим дизъюнкт $q_2 \vee q_4$. Система становится противоречивой. Процесс завершается. В ходе итераций добавлены следующие новые формулы:

$$\begin{cases} q_2 \vee q_4, \\ q_1, \\ q_3. \end{cases}$$

Теорема. Пусть SYS^t непротиворечива, $SYS^t \& D^t \rightarrow \neg\phi$, причем не имеет места ни $SYS^t \rightarrow \neg\phi$, ни $SYS^t \rightarrow \neg D^t$. Тогда $\{SYS^t, D^t\}$ непротиворечива.

Доказательство. Перепишем $SYS^t \& D^t \rightarrow \neg\phi$ как $\neg SYS^t \vee \neg D^t \vee \neg\phi$. Допустим, что $SYS^t \rightarrow D^t$. Но тогда сразу получим, что $SYS^t \rightarrow \neg\phi$, что противоречит условиям теоремы. Следовательно, неверно, что $SYS^t \rightarrow D^t$. Если допустить, что $\{SYS^t, D^t\}$ противоречива, то ввиду непротиворечивости SYS^t заключаем, что $SYS^t \rightarrow \neg D^t$, но это исключено условиями теоремы.

Данная теорема позволяет выяснить заключительный момент, состоящий в том, что полученная противоречивая система действительно содержит непротиворечивую часть, из которой выводима доказываемая формула. Согласно теореме выше, нужно показать непротиворечивость $\{SYS^t, D^t\}$. Применительно к разобранным примеру следует найти хотя бы одну выполняющую интерпретацию для заключительной системы без доказываемой формулы (удалив x_2). Таким решением, например, является следующее: $q_1 = q_2 = q_3 = 1, q_4 = q_5 = 0, x_1 = 1, x_2 = 0, x_3 = 1$.

Итак, получен ответ на исходную задачу – интересующее нас максимальное по включению непротиворечивое подмножество дизъюнктов системы (6), из которого выводима формула $\neg x_2$, есть

$$\begin{aligned}
 & x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3, \\
 & \quad \neg x_1 \vee \neg x_2, \\
 & \quad x_1 \vee \neg x_3.
 \end{aligned}$$

Заключение. Достоинство представленного в статье подхода состоит в том, что он «сохраняет» стандартную резолюционную схему вывода и, таким образом, позволяет избежать известных аномалий нечеткого резолюционирования. В сравнении с методами нечеткого вывода типа Мамдани, Цукамото или Сугено данный подход не ограничивает степень общности представления формул. Это же касается неоднозначности представления нечеткой логической импликации (формулы «если – то»). Указанное свойство дает ключ к построению машины логического вывода в нечеткой (противоречивой) логике посредством аппроксимации нечетких значений значениями многозначной логики, достаточными для практических приложений.

В [6] представлен подход для сведения системы нечетких логических формул к задаче целочисленной оптимизации с 0,1-переменными. Ограничение этого подхода состоит в значи-

тельной вычислительной сложности процедуры целочисленной булевой оптимизации.

Таким образом, разработанный в данной статье подход обладает научной и практиче-

ской новизной, имеет положительные особенности и может быть адаптирован для задач построения выводов в различных системах знаний электронных обучающих систем.

Литература

1. Wenger E. Artificial intelligence and tutoring systems: computational and cognitive approaches to the communication of knowledge. California: Morgan Kaufmann Publishers, 1987. 486 p.

2. Brown J. S., Burton R. R., Klee de J. Pedagogical, natural language and knowledge engineering techniques in Sophie I, II, and III // *Intelligent tutoring systems*. New York: Academic Press, 1982. P. 227–282.

3. Гурин Н. И., Герман О. В., Герман Ю. О. Разработка активной обучающей среды для электронного учебника // *Информатизация образования – 2012: педагогические основы разработки и использования электронных образовательных ресурсов: материалы Междунар. науч. конф., Минск, 24–27 окт. 2012 г. / Белорус. гос. ун-т; редкол.: В. В. Казаченок (отв. ред.) [и др.]. Минск, 2012. С. 95–99.*

4. Гурин Н. И., Герман О. В., Герман Ю. О. Технология разработки компьютерных обучающих систем с функциями виртуального преподавателя // *Труды БГТУ*. 2011. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 146–149.

5. Герман Ю. О., Самко А. Р., Герман О. В. Эффективный в среднем алгоритм для задачи о покрытии с приложением к нечеткой классификации и нечеткому выводу // *Доклады БГУИР*. 2009. № 7. С. 93–100.

6. Герман О. В., Самко А. Р., Герман Ю. О. Система вывода для нечеткой логики на основе многозначных исчислений Я. Лукасевича // *Труды БГТУ*. 2010. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 190–192.

References

1. Wenger E. Artificial intelligence and tutoring systems: computational and cognitive approaches to the communication of knowledge. California, Morgan Kaufmann Publishers, 1987. 486 p.

2. Brown J. S., Burton R. R., Klee de J. Pedagogical, natural language and knowledge engineering techniques in Sophie I, II, and III. *Intelligent tutoring systems*. New York, Academic Press, 1982. P. 227–282.

3. Gurin N. I., German O. V., German Yu. O. [Development of the active learning environment for electronic tutorial]. *Materialy Mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii (Informatizatsiya obrazovaniya – 2012: pedagogicheskiye osnovy razrabotki i ispol'zovaniya elektronnykh obrazovatel'nykh resursov* [Informatization of education – 2012: the pedagogical fundamentals for the development and application of digital educational resources]. Minsk, 2012, pp. 95–99 (In Russian).

4. Gurin N. I., German O. V., German Yu. O. Technology of creating the computer-based educational systems with a virtual teacher functions. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2011, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 146–149 (In Russian).

5. German Yu. O., Samko A. R., German O. V. An efficient in average algorithm for the covering problems with application to a fuzzy classification and fuzzy inference. *Doklady BGUIR* [Reports of BSUIR], 2009, no. 7, pp. 93–100 (In Russian).

6. German O. V., Samko A. R., German Yu. O. A fuzzy logic inference system on the basis of multivalued Lukasiewicz' logics. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2010, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 190–192 (In Russian).

Информация об авторе

Герман Юлия Олеговна – старший преподаватель кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: MaksHladki@gmail.com

Information about the author

German Yuliya Olegovna – Senior Lecturer, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: MaksHladki@gmail.com

Поступила 12.12.2016

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ

УДК 519.6

М. В. Гладкий

Белорусский государственный технологический университет

МОДЕЛЬ СТОИМОСТИ ЗАТРАТ MAPREDUCE-ВЫЧИСЛЕНИЙ

Приведено описание математической модели стоимости затрат при выполнении MapReduce-заданий в распределенных средах. Выявлено, что общая стоимость всех затрат состоит из стоимости затрат на подготовку кластера к работе и запуск его задач, а также из стоимости ресурсов, необходимых на непосредственное выполнение этих задач.

Рассмотрены основные параметры, влияющие на скорость выполнения и количество потребляемых ресурсов при решении задач с использованием парадигмы MapReduce. Определено четыре класса параметров, участвующих в оптимизации MapReduce: поток данных, поля стоимости, статистика потока данных и статистика полей стоимости.

Установлен признак линейности модели стоимости затрат при решении задачи поиска частотности слов в массиве документов. Выявлено, что линейность сохраняется при решении задач, требующих последовательного применения нескольких MapReduce-моделей вычислений.

Ключевые слова: модель стоимости, MapReduce, распределенные вычисления, кластер.

M. V. Gladkiy

Belarusian State Technological University

THE COST MODEL OF MAPREDUCE COMPUTATIONS

There is a mathematical description of the cost model that executes the MapReduce jobs in a distributed environment. It is revealed that the total cost of all expenses consists of the cluster preparation work cost and tasks, start and also the cost of resources needed for direct execution of these tasks.

There are main parameters that affect the execution speed and the amount of consumed resources in solving problems using the MapReduce paradigm. Four classes of parameters which participate in MapReduce optimization are defined: dataflow field, cost field, dataflow statistic field, cost statistic field.

A sign of linearity of the cost model in solving the problem to find the words frequency in the array of documents was determined.

It was found that the linearity is maintained in solving problems that require consistent application of multiple MapReduce computation models.

Key words: cost model, MapReduce, distributed computing, cluster.

Введение. Технологии распределенной обработки больших объемов данных переживают пик своего развития. Потребность в их использовании непрерывно растет, что обусловлено активным внедрением вычислительных средств в производственный процесс. Все большее значение при разработке проектов с применением парадигмы MapReduce играют его стоимостные параметры и время реализации. Это способствует усилению значимости использования существующих стандартов и новых вычислительных технологий, позволяющих существенно сократить и удешевить этап проектирования.

Программный стек Apache Hadoop позволяет быстро реализовать распределенное приложение с требуемым функционалом, не задумываясь об архитектурных особенностях кластера, модели и концепции распределенных вычисле-

ний. Это приводит к тому, что программисты не знают или не понимают, какие параметры оказывают наибольшее влияние на скорость обработки информации в кластере, каким образом можно оптимизировать затраты и уменьшить время работы MapReduce-задач при выполнении операций в распределенных средах.

Основная часть. Затраты при использовании распределенных структур обработки данных можно разделить на следующие группы:

– затраты на покупку и обновление аппаратных частей кластеров и обслуживание внутренней инфраструктуры (серверы, сетевые хранилища, периферийные устройства);

– затраты на организацию глобальной или локальной сети между отдельными узлами кластера, а также обеспечение защищенного удаленного доступа к машинам кластера;

– стоимость разработки, сопровождения и лицензирования программного обеспечения (ПО), выполняющего определенные задачи обработки и анализа больших объемов данных в распределенных средах;

– затраты на управление и конфигурирование кластером.

Наиболее важными затратами, на которые следует обратить внимание, являются затраты на разработку и сопровождение программного обеспечения. При равных возможностях аппаратного обеспечения и количества узлов в кластере оптимизированное ПО, а также эффективные алгоритмы и методы обработки информации в распределенных средах позволяют сэкономить до 30% ресурсов кластера.

Инфраструктура Hadoop имеет встроенные механизмы анализа, настройки и оптимизации производительности. Все эти настройки основаны на создании специальных профилей выполнения. В зависимости от ситуации пользователь имеет возможность выбирать между определенными профилями. По умолчанию профилирование не используется при выполнении MapReduce-задач. Для настройки профилей в системе предусмотрен специальный класс *mapreduce.task.profile*. Программист может расширять или изменять поведение профилей, создавать новые профили, использующие определенные значения конфигурации, влияющие на логику работы всего кластера.

В основе создания конфигурационных файлов для эффективного профилирования MapReduce-задач лежит модель стоимости затрат вычислений. Модель включает в себя затраты на запуск заданий, вычисления, операции ввода/вывода на различных этапах работы фреймворка. Она параметризована с размером входных данных решаемых задач и выбранными свойствами выполняемой программой MapReduce, а также свойствами и настройками кластера, на котором программа запущена. Это помогает программисту оценить поведение масштабирования, а также определить критерии для сравнения производительности различных программ MapReduce.

Выделяют четыре класса параметров конфигурации фреймворка MapReduce, влияющих на время выполнения заданий и количество использованных кластером ресурсов [1]:

1) поток данных – количество записей, протекающих через различные задачи, и этапы выполнения MapReduce-заданий. Примерами полей являются количество выходных строк, возвращаемых в результате работы Map-задачи, количество байт, прочитанных при работе с локальной файловой системой [2];

2) поля стоимости – время выполнения задачи или фаз определенной задачи в MapRe-

duce. Примерами полей стоимости являются время, затраченное на настройку параметров кластера при запуске задачи, время, необходимое на выполнение операции Merge или Shuffle [2];

3) статистика потока данных – сбор статистических данных о потоке. Например, среднее число выходных записей Map-задачи на каждую входную запись, степень сжатия выходных данных Map-процедуры, количество оперативной памяти, необходимое в среднем на обработку одной Map-операции;

4) статистика полей стоимости – сбор статистической информации о времени выполнения MapReduce-задач. В данную группу попадают такие параметры, как затраты процессорного времени, необходимые на выполнение определенной операции, средняя стоимость операции ввода/вывода на 1 байт обработанной информации из DFS (распределенная файловая система).

Параметры конфигурации фреймворка влияют на количество задач, необходимых для решения MapReduce-задания. Для выполнения операции, в зависимости от ее типа, необходимо затратить определенное количество ресурсов: процессорное время, объем оперативной памяти, дисковое пространство и т. д. В результате общая стоимость затрат на вычисления в кластере состоит из стоимости затрат на подготовку кластера и запуск задания, а также из стоимости ресурсов, необходимых на непосредственное выполнение этой задачи:

$$C_O = C_{ST} + C_P, \quad (1)$$

где C_{ST} – затраты на запуск задач; C_P – затраты на обработку данных.

Затраты на запуск задач. Стоимость запуска задания и всех задач, выполняемых в рамках этого задания, состоит из затрат, необходимых на конфигурацию задания MapReduce, включая время работы функции Splitter (функция вычисляет границы разделения входных файлов на блоки данных) и стоимость затрат на запуск всех операций Map и Reduce в рамках определенного задания:

$$C_{ST} = C_S + C_T, \quad (2)$$

где C_S – затраты на конфигурацию кластера; C_T – затраты на запуск задач.

Стоимость затрат на запуск операций Map и Reduce прямо пропорциональна средней стоимости затрат, необходимых на подготовку к запуску одной задачи, общему количеству Map- и Reduce-задач и обратно пропорциональна количеству процессорных ядер в кластере [3]:

$$C_T = c_t \frac{N_m + N_r}{N_{cpu}}, \quad (3)$$

где c_t – стоимость запуска Map- или Reduce-задачи; N_m – количество экземпляров Map-функции; N_r – количество Reduce-задач; N_{cpu} – количество процессорных ядер в кластере.

Количество Map-задач тесно связано с количеством блоков входных данных и находится как отношение общего размера входных данных и размера блока данных в операциях ввода/вывода. Данная величина используется внутри фреймворка для организации процессов ввода/вывода между локальной и распределенной файловыми системами:

$$N_m = \frac{S_i}{S_{ch}}, \quad (4)$$

где S_i – размер входных данных; S_{ch} – размер блока данных внутри фреймворка MapReduce.

При локальном запуске MapReduce-задания значением c_t можно пренебречь. При запуске заданий в режиме кластера время запуска одной задачи будет также мало, если размеры входных файлов меньше размера блока данных DFS. В противном случае функции Splitter необходимо время для разбиения входных данных на блоки определенной длины.

Затраты на обработку данных. Стоимость обработки, свертки, перемещения данных по сети в несколько раз превышает стоимость затрат на предварительную подготовку к запуску задания и его задач [1]. Она состоит из стоимости операции ввода/вывода, включая затраты на передачу информации между узлами кластера, и стоимости задач, необходимых для выполнения всех операций над данными в модели MapReduce [2]:

$$C_p = C_{IO} + C_{MR}, \quad (5)$$

где C_{IO} – стоимость операций ввода/вывода; C_{MR} – затраты на выполнение задач в модели MapReduce.

Стоимость операций чтения данных из постоянного запоминающего устройства (ПЗУ) включает в себя стоимость чтения 1 байта данных, передаваемого по сети между узлами кластера, а также стоимость чтения 1 байта данных из DFS. Данные операции выполняются на том же узле, что и Map-задачи:

$$C_R = R_{dfs} + R_{net}, \quad (6)$$

где R_{dfs} – стоимость чтения данных из DFS; R_{net} – стоимость передачи данных по сети.

Парадигму MapReduce обычно используют для обработки данных больших объемов. Однако нельзя просто умножить стоимость затрат на чтение 1 байта информации на общее количество считанных байт, поскольку фреймворк использует кластерную архитектуру. Таким

образом, уравнение нахождения стоимости затрат на чтение данных имеет вид

$$R_{dfs} = r_{dfs} \frac{S_{mo}}{N_{cpu}}, \quad (7)$$

где r_{dfs} – стоимость чтения 1 байта данных из распределенной файловой системы; S_{mo} – общий размер выходных данных (байт) после выполнения всех Map-функций.

Стоимость считывания данных между узлами кластера зависит от размера выходных данных после выполнения всех Map-функций и числа эффективных Reduce-задач [1]:

$$R_{net} = r_{net} \frac{S_{mo}}{N_{Ref}}, \quad (8)$$

где r_{net} – стоимость передачи 1 байта данных по сети между узлами кластера; N_{Ref} – количество эффективных Reduce-задач.

Задача является неэффективной, если функция Reduce возвращает пустой массив данных. Система должна предугадывать такие исходы на ранних стадиях работы фреймворка MapReduce и освобождать ресурсы, необходимые для выполнения данных задач. Освободившиеся ресурсы должны быть использованы для более оптимального решения оставшихся подзадач [2].

Стоимость операций ввода во время выполнения задач состоит из стоимости операций ввода в локальную память узлов кластера, полученных после выполнения функции Combine, а также стоимости записи в DFS:

$$C_w = W_l + W_{dfs}, \quad (9)$$

где W_l – стоимость записи в локальную файловую систему; W_{dfs} – стоимость записи в распределенную файловую систему.

Стоимость затрат записи данных на локальный диск кластера зависит от общего размера выходных данных после выполнения всех Map-функций и функции Combine, а также количества процессорных ядер в кластере:

$$W_l = w_l \frac{S_{co}}{N_{cpu}}, \quad (10)$$

где w_l – стоимость записи 1 байта в локальную файловую систему; S_{co} – общий размер выходных данных (байт) после выполнения всех Map-функций и функции Combine.

Стоимость записи данных в распределенную файловую систему прямо пропорциональна стоимости записи 1 байта данных в DFS, общему размеру выходных данных задания и обратно пропорциональна количеству эффективных Reduce-задач [1]:

$$W_{dfs} = w_{dfs} \frac{S_o}{N_{Ref}}, \quad (11)$$

где w_{dfs} – стоимость записи в распределенную файловую систему; S_o – общий размер выходных данных.

Чтение и запись данных в DFS являются более дорогостоящими операциями по сравнению с аналогичными операциями в локальной файловой системе. В MapReduce-фреймворке существует специализированный инструмент Table Scan, основное назначение которого – считывание и запись данных в DFS при переключении между двумя Map- и Reduce-задачами. Для оптимизации Scan может помещать блоки данных в кэш. Для организации кэша используется оперативная память узла кластера. Отключение технологии кэширования блоков приводит к увеличению времени на выполнение операций ввода/вывода данных в несколько раз.

Существует способ уменьшения временных затрат на организацию операций ввода/вывода путем использования специального фреймворка Tez. Данный фреймворк был спроектирован и разработан для работы с большими данными (нескольких сотен гигабайт) в парадигме MapReduce. Tez предполагает, что все операторы должны работать в одном Tez-пространстве и, следовательно, исчезает необходимость затрачивать дополнительные ресурсы на написание промежуточного результирующего набора в DFS [1].

Стоимость выполнения задания в цепочке MapReduce равна сумме всех операций, используемых на каждой стадии работы этой цепочки. В зависимости от типа решаемой задачи могут применяться следующие стадии обработки данных: Map, Combine, Merge, Sort, Reduce [2].

Общая стоимость затрат на выполнение всех Map-задач прямо пропорциональна стоимости выполнения функции Map, размеру входных данных и обратно пропорциональна количеству процессорных ядер в кластере [3]:

$$M = m \frac{S_i}{N_{cpu}}, \quad (12)$$

где m – стоимость операции Map.

Функция Combine применяется в тех случаях, когда в результатах функции Map содержится значительное число повторяющихся значений промежуточного ключа, а определенная пользователем задача Reduce является коммутативной и ассоциативной. В таких случаях необходимо осуществить частичную агрегацию данных до их передачи по сети. Функция Com-

bine реализуется на той же машине, что и задача Map [2]. Стоимость выполнения функции Combine прямо пропорциональна стоимости агрегации 1 байта информации, размеру выходных данных после выполнения Map-функций и обратно пропорциональна числу процессорных ядер в кластере:

$$C_b = c_b \frac{S_{mo}}{N_{cpu}}, \quad (13)$$

где c_b – стоимость операции Combine.

Операция сортировки применяется только в том случае, если разные атомарные обработчики возвращают наборы с одинаковыми ключами. Стоимость данной операции рассчитывается аналогично стоимости операции Combine и зависит от размера выходных данных функции Map [2]:

$$S_r = s_r \frac{S_{mo}}{N_{cpu}}, \quad (14)$$

где s_r – стоимость операции распределенной сортировки.

Если выходные данные функции Map не поместились целиком в оперативную память и были сброшены в дополнительное хранилище кэш либо постоянную память, то к затратам на сортировку данных добавляются затраты на необходимые операции ввода/вывода.

Суммарная стоимость затрат, необходимых на выполнение операции слияния, зависит от стоимости слияния 1 байта данных, полученного из предварительно отсортированной информации, общего размер выходных данных после выполнения всех Map-функций, а также числа эффективных исходов:

$$M_e = m_e \frac{S_{mo}}{N_{Ref}}, \quad (15)$$

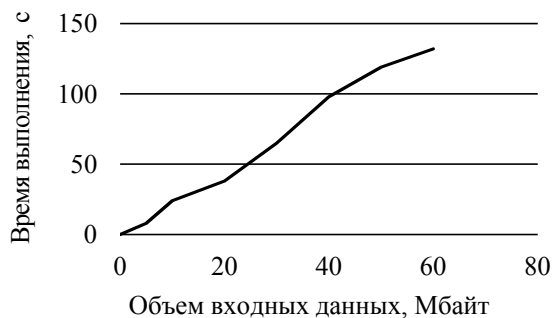
где m_e – стоимость затрат на выполнение задачи Merge.

Аналогичным образом рассчитывается стоимость затрат на выполнение операции свертки:

$$R = r \frac{S_{mo}}{N_{Ref}}, \quad (16)$$

где r – стоимость выполнения задачи Reduce.

Полученные уравнения стоимости затрат имеют линейную зависимость. Данный признак подтверждается практическими исследованиями при решении задачи подсчета слов в массиве документов. В рамках данных исследований определялась зависимость времени выполнения задания от объема информации, поступающей на вход экземплярам функции Map (рисунок).



Зависимость времени выполнения задания от объема входных данных

В результате линейного сглаживания экспериментальных данных получено следующее уравнение:

$$T = V k_3 + s, \quad (17)$$

где T – время выполнения задания; V – объем обработанных данных; k_3 – коэффициент стоимости затрат, зависящих от размера блока данных; s – временные затраты, не зависящие от размера блока данных.

В уравнении (17) значение коэффициента стоимости составляет 0,42, а значение временных затрат равно 1,25.

Заключение. В статье рассмотрена модель стоимости затрат MapReduce-вычислений в распределенных средах. Модель обладает линейностью и включает такие параметры, как стоимость затрат на 1 байт обработанной информации, общий размер входных и выходных данных, количество Map- и Reduce-задач, количество процессорных ядер в кластере и другие параметры.

Полученная модель стоимости может применяться в следующих случаях:

- как составная часть оценки эффективности реализации алгоритмов и профилей оптимизации, используемых в программном комплексе Apache Hadoop;
- для разработки функциональных моделей оптимального решения MapReduce-заданий;
- для определения загруженности процессора узла кластера на заданном временном отрезке времени.

При локальных запусках MapReduce-заданий модель стоимости затрат принимает упрощенный вид. В данном случае отсутствуют затраты на передачу данных между узлами кластера, уменьшается количество операций чтения/записи из локальной файловой системы в DFS и наоборот, исключаются затраты на конфигурацию узлов кластера.

Литература

1. Том У. Hadoop: Подробное руководство. СПб.: Питер, 2015. С. 291–293.
2. Гладкий М. В. Модель распределенных вычислений MapReduce // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 121–123.
3. Натан М. Большие данные. Принципы и практика построения масштабируемых систем обработки данных в реальном времени. М.: Вильямс, 2015. С. 147–148.

References

1. Tom U. *Hadoop: Podrobnoye rukovodstvo* [Hadoop: The Definitive Guide]. St. Petersburg, Piter Publ., 2015, pp. 291–293.
2. Gladkiy M. V. The model of distributed computing MapReduce. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2016, no. 6: Physical-mathematical sciences and informatics, pp. 121–123 (In Russian).
3. Natan M. *Bol'shiye dannye. Printsipy i praktika postroeniya masshtabiruemykh sistem obrabotki dannykh v real'nom vremeni* [Big data. Principles and practice of building highly scalable data processing systems in real time]. Moscow, Vil'yams Publ., 2015, pp. 147–148.

Информация об авторе

Гладкий Максим Валерьевич – ассистент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: MaksHladki@gmail.com

Information about the author

Gladkiy Maksim Valer'yevich – assistant lecturer, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: MaksHladki@gmail.com

Поступила 12.12.2016

УДК 004.031.43-044.962

А. Д. Новицкая, Н. А. Жилияк

Белорусский государственный технологический университет

**МЕТОДЫ РАСПОЗНАВАНИЯ И ОТСЛЕЖИВАНИЯ
ИЗМЕНЕНИЯ ОБЪЕКТА С ТЕЧЕНИЕМ ВРЕМЕНИ**

В данной статье рассмотрены простейшие методы и алгоритмы, предназначенные для распознавания объектов на изображениях как с последующим анализом исторических данных, так и с анализом данных в режиме реального времени. В качестве простейших способов описаны методы ковариации и сравнения шаблонов. Алгоритм ковариации двух изображений рассмотрен как возможный способ реализации методов сравнения шаблонов. Также изучены особенности контурного анализа для решения задачи распознавания конкретного объекта, не прибегая к попиксельному сравнению, а также для увеличения производительности программного средства.

Приведен пример реализации метода отслеживания объекта в динамике путем анализа координат изменения цвета.

Реализация вышеназванных методов поможет получить полноценную и рабочую систему анализа передвижения и изменения заданных искомым объектов на кадрах видеопотока (записи камеры видеонаблюдения).

Ключевые слова: распознавание образа, ковариация, сравнение шаблонов, контурный анализ, бинаризация.

A. D. Novitskaya, N. A. Zhilyak

Belarusian State Technological University

**METHODS OF OBJECT RECOGNITION
AND TRACKING ITS CHANGES OVER TIME**

This article describes the image recognition methods and algorithms that deal with historical analyzing and real-time processing. As the simplest ways the covariance method and the pattern matching were described. The covariance of the two images was considered as a possible way to implement the templates matching methods. The features of contour analysis as a solution of specific object recognition task without resorting to pixel comparison, as well as a way to increase software tools performance were also described.

An example of an object dynamics tracking method by analyzing the origin of color change was shown.

The implementation of the methods mentioned above will help to get a complete and working system of movement and modification analysis of desired objects in the frames of the video stream (video camera recording).

Key words: object recognition, covariance, template matching, contour analysis, binarization.

Введение. Теория распознавания образа – раздел информатики, развивающий основы и методы идентификации предметов, которые характеризуются конечным набором некоторых свойств и признаков. На основе этих методов можно найти не только объект, но и отследить и проанализировать его изменения [1].

Данная область информатики является широко используемой, поэтому существует необходимость внедрять в указанную сферу задачи, которые помогли бы развить представление о работе таких алгоритмов.

Основная часть. В большинстве случаев, когда необходимо простое сравнение двух достаточно похожих фрагментов изображения, реализация осуществляется через их ковариацию. На примере этот метод можно представить следующим образом: изображение, содержащее искомым образец, передвигается по координатам X , Y по изображению, в котором вы-

полняется поиск. Работа алгоритма считается успешной, когда находится такая точка, где отличие искомого образца от изображения, в котором производился поиск, достигает своего минимума [2]:

$$\sum_{i < W, j < H} [I(x+i, y+j) - J(i, j)],$$

где I – изображение, в котором производится поиск; J – образец для сравнения; W – ширина образца (в пикселях); H – высота образца (в пикселях); x , y – координаты текущего пикселя изображения, в котором осуществляется поиск.

Этот способ быстр в реализации и интуитивен. Однако у него есть свои недостатки:

– низкая скорость работы при обработке больших изображений. Если будет задействован образец $a \cdot a$ пикселей и изображение поиска $b \cdot b$ пикселей, то количество операций составит $a^2 \cdot (b - a)^2$;

- нестабильная работа в случае смены освещения;
- нестабильная работа при изменении масштаба или повороте изображения;
- нестабильная работа, если часть изображения – изменяющийся фон.

С этими недостатками можно бороться с помощью следующих методов:

- 1) недостатки в скорости работы устраняются путем проведения поиска с большим шагом при маленьком разрешении;
- 2) недостатки освещения можно нейтрализовать нормировкой или переходом к бинаризации области;
- 3) искажения объекта поиска можно устранить изменением разрешения при корреляции;
- 4) с коррекцией фона при вышеописанном подходе работа не проводится.

Очень схожий подход применяется при использовании методов сравнения шаблонов (Template Matching), где для сопоставления областей изображения необходимы простейшие алгоритмы наподобие попиксельного сравнения. Их основным принципом является выделение областей на изображении. Каждая совпавшая область увеличивает меру сходства [3].

При использовании таких алгоритмов можно столкнуться со следующими недостатками:

- метод ресурсоемкий (хранение промежуточной информации, эталонов для сравнения, сама обработка всей имеющейся информации);
- нестабильная работа в случае смены освещения;
- нестабильная работа при изменении масштаба или повороте изображения;
- нельзя с точностью сказать, был ли найден искомый объект, так как результатом работы является вероятностная характеристика;
- ложные срабатывания (у разных изображений могут быть сходные детали или области).

Когда мы говорим о простейших алгоритмах распознавания, то должны учитывать их ресурсоемкость и сравнительно низкую скорость работы. Одним из выходов может стать использование контурного анализа.

Контурный анализ – метод описания и поиска графических образов (объектов) по их контурам. В данном контексте контур – это кривая, которая описывает границы объекта на изображении. Предполагается, что данная линия содержит достаточно информации о форме объекта, при этом его внутренние точки не учитываются. Рассмотрение только контуров объектов позволяет уйти от пространства изображения к пространству контуров, что снижает сложность алгоритмов и вычислений. Еще одно преимущество вышеназванного метода состоит в том, что вращение, изменение масштаба и

смещение контура на изображении не влияют на скорость работы. Метод имеет следующие недостатки [4]:

- 1) нестабильная работа с изображениями, обладающими низким контрастом;
- 2) невозможность определения объекта при перекрывании его другими объектами на изображении.

На основе этих подходов можно найти не только объект, но еще обработать его в динамике. Например, определить движение. Для решения поставленной цели можно просто представить два изображения в виде матрицы и вычесть эти матрицы друг из друга.

Реализовать это можно следующим образом: создать две матрицы, которые будут содержать данные о цвете каждого пикселя. При таком подходе точные значения цвета не нужны, так как производится поиск перемещения объекта. Если движение происходило, то значение цвета будет разным, этой информации уже достаточно для оценки перемещения объекта. Чтобы максимально отсеять шумы, необходимо обработать полученное значение, задав минимальное предельно допустимое значение изменения цвета. Можно бинаризовать изображения до начала анализа, сделать их монохромными. Однако необходимо учитывать специфику задачи, чтобы знать, применима ли бинаризация, поскольку это приведет к нежелательной потере данных о цвете.

В данном случае бинаризация не применялась.

Меняя порог (допуск изменения цвета), получим различные результаты (рис. 1 и 2).



Рис. 1. Визуализация результата выполнения при пороге разности 50 (канал цвета RGB)



Рис. 2. Визуализация результата выполнения при пороге разности 20 (канал цвета RGB)

В ходе выполнения вышеописанного алгоритма имеем матрицу, содержащую координаты перемещений объекта на изображении, которая может быть использована для дальнейшей обработки данных.

Заключение. Алгоритм реализован в программном средстве, областью применения которого в совокупности с приведенными выше ме-

тодами может стать обработка различных больших массивов видеоданных, например, для анализа аварийно опасных участков дорог, отслеживания нестандартного поведения пассажиров аэропорта (метрополитена), системы видеонаблюдений на складе (отслеживание движения объектов на территории при отсутствии разрешения на передвижение), а также в жилых домах.

Литература

1. Фомин Я. А. Распознавание образов: теория и применения. М.: ФАЗИС, 2012. 429 с.
2. Weisstein E. W. Covariance [Electronic resource] // Wolfram MathWorld. URL: <http://mathworld.wolfram.com/Covariance.html> (date of access: 12.12.2015).
3. Brunelli R. Template Matching Techniques in Computer Vision: Theory and Practice [Electronic resource] // Wiley. URL: <http://www.wiley.com/legacy/wileychi/brunellitemplate/supp/tmCodeCompanion.pdf> (date of access: 07.12.2015).
4. Фурман А. Я. Введение в контурный анализ. Приложения к обработке изображений и сигналов. М.: Физматлит, 2003. 592 с.

References

1. Fomin Ja. A. *Raspoznaniye obrazov: teoriya i primeneniye* [Objects recognition: Theory and practice]. Moscow, FAZIS Publ., 2012. 429 p.
2. Weisstein E. W. Covariance. *Wolfram MathWorld*. Available at: <http://mathworld.wolfram.com/Covariance.html> (accessed 12.12.2015).
3. Brunelli R. Template Matching Techniques in Computer Vision: Theory and Practice. *Wiley*. Available at: <http://www.wiley.com/legacy/wileychi/brunellitemplate/supp/tmCodeCompanion.pdf> (accessed 07.12.2015).
4. Furman A. Ya. *Vvedeniye v konturnyy analiz. Prilozheniya k obrabotke izobrazheniy i signalov* [Introduction to the contour analysis. Annexes to an image processing and signals]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2003. 592 p.

Информация об авторах

Новицкая Александра Дмитриевна – магистрант. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: liloddy@gmail.com

Жилияк Надежда Александровна – кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gh_nadya@mail.ru

Information about the authors

Novitskaya Aleksandra Dmitriyevna – Master's degree student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: liloddy@gmail.com

Zhilyak Nadezhda Aleksandrovna – PhD (Engineering), Assistant Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gh_nadya@mail.ru

Поступила 12.12.2016

УДК 51-74

Н. П. Цыганенко

Белорусский государственный технологический университет

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ КЭШИРОВАНИЯ

Работа посвящена математическому моделированию систем кэширования данных в веб-приложениях. Рассмотрена текущая ситуация на рынке веб-приложений относительно использования систем кэширования данных. Приведены основные варианты хранилищ, которые могут применяться при построении систем кэширования. Указаны их преимущества и недостатки. Также в статье вводится математический аппарат для описания таких систем. Выявлены основные характеристики систем кэширования. Рассмотрена проблема вычисления вероятности попадания в кэш, а также один из способов ее определения с использованием деревьев решений. Подробно освещены особенности процесса построения дерева решений для данного типа задач. Вместе с этим рассмотрены частные случаи, в которых вычисление данной вероятности тривиально. Приведена полученная в процессе научного исследования рекуррентная формула для нахождения вероятности попадания записей из базы данных в кэш. С использованием полученной рекуррентной формулы выведена формула для вычисления среднего времени чтения записи из системы кэширования. На основании полученной математической модели системы кэширования выведена целевая функция и описаны условия задачи оптимизации. Сделаны выводы о возможностях практического внедрения полученной математической модели и применения к ней методов оптимизации.

Ключевые слова: кэширование, математическая модель, оптимизация, дерево решений, веб-приложения.

N. P. Tsyganenko

Belarusian State Technological University

MATHEMATICAL MODELING OF CACHING SYSTEMS

This paper is devoted to mathematical modeling of data caching systems in web applications. We consider the current situation in the market of web-based applications for the use of data caching systems. The article also introduces the mathematical formalism to describe such systems. The main characteristics of caching systems are introduced. The problem of calculating the probability of falling into the cache, as well as one of the ways to calculate it using decision trees are described. The features of the process of building a decision tree for this type of tasks are studied in detail. At the same time we consider the special case in which the calculation of the probability is trivial. The recurrence formula produced in the process of scientific research is to calculate the probability that the records from the database cache. Using derived recurrence formula derived formula to calculate an average reading entries from the cache system time. Based on the caching system we produced a mathematical model of a target function and are described in terms of the optimization problem. Conclusion about the possibilities of practical application of a mathematical model and apply it to the optimization methods is made.

Key words: caching, mathematical model, optimization, decision tree, web applications.

Введение. Основная цель веб-приложений и других интернет-ресурсов заключается в предоставлении посетителям информации в различных формах (текст, графика, видео и т. д.). Интернет-пространство сегодня – это насыщенная данными среда. Поэтому, в условиях жесткой конкуренции за внимание пользователей, проблема скорости получения пользователем информации более чем актуальна. Ее решением является минимизация времени между запросом, посылаемым на сервер, и моментом полной загрузки ответного сообщения с запрашиваемым контентом.

Одной из точек минимизации времени получения информации является канал между серверным веб-приложением и реляционной базой данных. Для ускорения данного канала

используют механизм кэширования. Суть кэширования заключается в том, что часть информации из реляционной базы данных дублируется в хранилище с более высокой скоростью доступа – кэше. В момент, когда пользователь запрашивает информацию у веб-приложения, сначала проверяется кэш [1].

В случае если в нем необходимых данных не оказалось, запрос перенаправляется к реляционной базе данных. Таким образом, в случае если нужная информация находится в кэше, то получается значительный выигрыш во времени по сравнению с простым использованием базы данных.

Двумя наиболее важными характеристиками эффективности системы кэширования являются скорости доступа к хранимой информации и вероятность попадания в кэш. Скорость доступа к

информации в кэше – это время от запроса информации веб-приложением у системы кэширования до полного получения необходимых данных. Вероятность попадания в кэш – это процент успешных разрешений запросов на получение определенной информации к их общему числу.

Поскольку обе основные характеристики являются числовыми, то для того, чтобы получить наилучшие результаты при использовании систем кэширования, можно применить методы решения задач оптимизации. Эти методы относятся к математическому программированию и требуют наличия математической модели оптимизируемой системы в виде целевой функции [2].

Основная часть. Исходными данными при моделировании систем кэширования выступают множество записей в базе данных R , множество записей в кэше C и число обращений к базе данных U .

Множество записей в базе данных R мощностью n состоит из записей r_i :

$$r_i \in R, \quad (1)$$

где i – порядковый номер записи в базе данных.

Множество записей в кэше C мощностью m состоит из записей c_j :

$$c_j \in C, \quad (2)$$

где j – порядковый номер записи в кэше.

Множество записей в кэше C является подмножеством множества записей в базе данных R :

$$C \subset R. \quad (3)$$

Количество записей в кэше не может превышать количества записей в базе данных, и в большинстве веб-приложений объем базы данных в разы превышает объем кэша. Из этого следует, что мощность множества записей в кэше m не превышает мощности множества записей в базе данных n . Отсутствие системы кэширования может быть выражено пустым множеством с нулевой мощностью. Резюмируя вышеперечисленное, запишем ограничения для мощности множества записей в кэше:

$$0 \leq m \leq n. \quad (4)$$

Число обращений к множеству записей в базе данных состоит из количества обращений к отдельным записям:

$$U = \sum_{i=1}^n u_i, \quad (5)$$

где u_i – количество обращений к записи r_i .

Воспользовавшись формулой (5), выведем формулу для вычисления вероятности обращения к записи r_i через отношение количества

обращений к данной записи к общему числу обращений к базе данных:

$$p_i = \frac{u_i}{U}. \quad (6)$$

Поскольку порядковый номер записи в базе данных i представляет собой дискретную величину, то вероятность обращения к записям в базе может быть представлена в виде вектор-строки:

$$p = (p_1 \ p_2 \ \dots \ p_n). \quad (7)$$

Обозначим через P_i вероятность того, что запись r_i находится в кэше, т. е.

$$r_i \in C. \quad (8)$$

Если размер кэша равен размеру базы данных, то в кэш могут быть записаны сразу все записи из базы данных. Таким образом, вероятность попадания r_i в кэш равна 1.

Если размер кэша равен 0, т. е. система кэширования отсутствует, то в кэш не может быть помещена ни одна запись из базы данных. Итак, вероятность попадания r_i в кэш равна 0.

В случае когда p_i для всех i совпадает, т. е. обращение к любой записи равновероятно, вероятность попадания в кэш может быть вычислена следующим образом:

$$P_i = \frac{m}{n}. \quad (9)$$

В реальных веб-приложениях равномерного распределения в запросах к базе данных не наблюдается. Одни данные всегда запрашиваются чаще других. Это явление связано с наличием в базе данных служебной информации, а также с большей актуальностью и релевантностью определенных наборов данных, которые специфичны для каждого приложения.

Для построения математической модели систем кэширования необходимо вывести общую формулу для вычисления вероятности попадания r_i в кэш.

Рассмотрим частный случай. В базе данных имеется четыре записи: А, В, С, D. Вероятность того, что запросят конкретную запись, равна 0,1; 0,2; 0,3 и 0,4 соответственно. Размер кэша равен трем. Необходимо вычислить вероятность нахождения записи А в кэше.

Данная задача строится на вычислении условных вероятностей. Одним из возможных решений такого типа задач является построение дерева решений. Отличительной чертой данной задачи от типовых задач на нахождение условной вероятности является то, что события для которых вычисляется условная вероятность, находятся в одной группе.

На первом уровне дерева необходимо расположить узлы, соответствующие записям из базы данных, и соединить их с корнем. На ребрах следует записать вероятности того, что первой записью в кэше c_1 будет запись, к которой ведет ребро.

Далее для каждого из узлов первого уровня, кроме узла, обозначающего искомую запись, необходимо построить узлы второго уровня.

Для построения следующего уровня дерева решений для узла уровня i из исходного множества записей в базе данных извлекаются записи из узлов, которые ведут от узла i к корню, включая рассматриваемый узел. Полученное подмножество отражается в виде узлов, соединенных ребрами с рассматриваемым узлом. На ребрах записываются вероятности того, что $i + 1$ записью в кэше c_{i+1} будет запись, соответствующая узлу, с учетом того, что предыдущие записи в кэше уже известны.

Выведем формулу для расчета условных вероятностей, описанных выше. Пользуясь формулой (6), найдем выражение для вычисления количества обращений к записи r_i :

$$u_i = p_i U. \tag{10}$$

Вероятность того, что второй записью в кэше будет r_i при условии, что первой записью является r_j , может быть вычислена как отношение числа обращений к записи r_i к разности общего числа обращений и числа обращений к записи r_j :

$$p(i | j) = \frac{u_i}{U - u_j}. \tag{11}$$

Вероятность того, что третьей записью в кэше будет r_i при условии, что первой и второй записями являются r_j и r_k соответственно, может быть вычислена как отношение числа обращений к записи r_i к разности общего числа обращений и числа обращений к r_j и r_k :

$$p(i | j, k) = \frac{u_i}{U - u_j - u_k}. \tag{12}$$

Вероятности для остальных уровней дерева решений вычисляются по аналогии. Выражение (11) может быть записано через вероятность обращения к записи:

$$p(i | j) = \frac{p_i U}{U - p_j U}. \tag{13}$$

Если упростить, то получаем следующее соотношение:

$$p(i | j) = \frac{p_i}{1 - p_j}. \tag{14}$$

Дерево строится, пока число уровней не достигнет размера кэша. Корень является нулевым уровнем и используется для визуализации начального состояния, когда не просмотрена ни одна запись в кэше.

Дерево решений для описанной задачи представлено на рисунке.

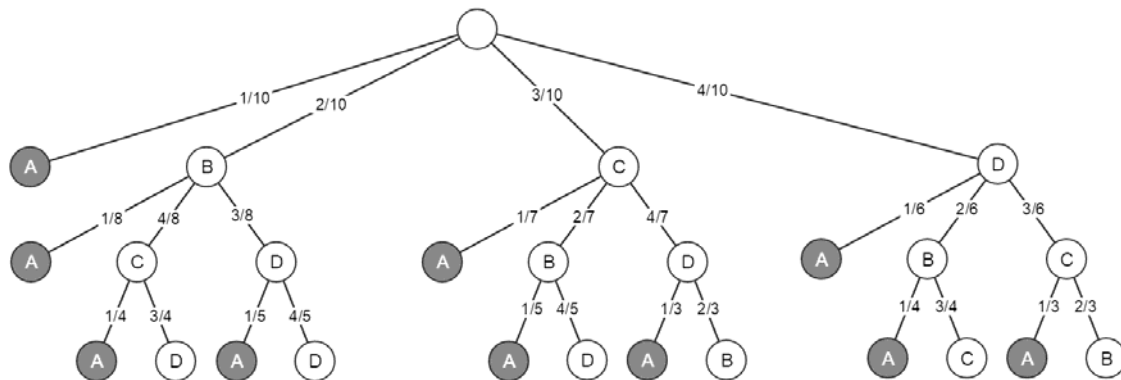
После построения дерева решений необходимо закрасить все узлы, соответствующие искомой записи. В нашей задаче это запись А.

Для расчета вероятности каждого из покрашенных листьев следует перемножить вероятности ребер на пути от листа до корня.

Базируясь на рассчитанных вероятностях покрашенных листьев, можно определить полную вероятность того, что в кэше находится искомая запись. Эта вероятность вычисляется как сумма вероятностей всех покрашенных листьев. Проанализировав частный случай, можно вывести рекуррентную формулу для определения вероятности попадания записи r_i в кэш:

$$P_i = \begin{cases} 0, & m = 0, \\ p_i + \sum_{j=1, j \neq i}^n p_j P_i(R \setminus i, CP_{p_j n}, m - 1, n - 1), & \end{cases} \tag{15}$$

где CP – функция для вычисления условных вероятностей на основании вектор-строки p и выбранного элемента p_j .



Дерево решений

Функция CP состоит из удаления из вектор-строки указанного элемента с помощью булевой матрицы A и нахождения условной вероятности для оставшихся элементов с помощью матрицы B :

$$CP(p, x, n) = p \times A \times B. \quad (16)$$

Значения для ячеек матрицы A вычисляются по следующей формуле:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & (i > x \wedge i = j - 1) \vee (i < x \wedge i = j), \\ 0. & \end{cases} \quad (17)$$

Для ячеек матрицы B применяется следующее выражение:

$$b_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{1 - p_i}, & i = j, \\ 0. & \end{cases} \quad (18)$$

Используя вероятность попадания в кэш (15), можно вывести формулу для нахождения среднего времени чтения записи r_i :

$$T_i = t_c + t_i(1 - P_i), \quad (19)$$

где t_c – время чтения из кэша; t_i – время чтения записи r_i из базы данных.

Выражение (19) является математической моделью, которая описывает процесс чтения данных из базы данных с использованием системы кэширования. Основываясь на данной модели, можно записать целевую функцию:

$$\sum_{i=1}^n T_i u_i \rightarrow \min. \quad (20)$$

Заключение. В ходе исследования была выведена математическая модель, описывающая процесс чтения из систем кэширования. С помощью нее была получена целевая функция, основывающаяся на минимизации времени чтения записей из базы данных. Минимизация этого времени позволяет приложению получить экономическое и техническое преимущество.

На целевую функцию могут накладываться ограничения для применения методов оптимизации. Описанная математическая модель может служить для создания приложений, которые имеют гарантированный максимальный порог времени чтения из базы данных при высоких нагрузках.

Литература

1. Siewiorek D. Computer Structures: Principles and Examples. NY: Mc Graw Hill, 1981. 960 p.
2. Janert P. Data Analysis with Open Source Tools. Sebastopol: O'Reilly Media, Inc., 2010. 540 p.

References

1. Siewiorek D. Computer Structures: Principles and Examples. NY, Mc Graw Hill, 1981. 960 p.
2. Janert P. Data Analysis with Open Source Tools. Sebastopol, O'Reilly Media, Inc., 2010. 540 p.

Информация об авторе

Цыганенко Никита Павлович – аспирант. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: nikitatsyganenko@belstu.by

Information about the author

Tsyganenko Nikita Pavlovich – PhD student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: nikitatsyganenko@belstu.by

Поступила 30.11.2016

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ.....	5
МАТЕМАТИКА	5
Игнатенко В. В., Крахотко В. В., Размыслович Г. П. К управляемости линейных систем дескрипторными регуляторами	5
Можей Н. П. Канонические связности на трехмерных симметрических пространствах разрешимых групп Ли.....	8
МЕХАНИКА	14
Грода Я. Г., Бильданов Э. Э., Вихренко В. С. Обобщенное квазихимическое приближение для решеточной системы с SALR-потенциалом	14
ФИЗИКА	21
Крук Н. Н., Кленицкий Д. В. Молекулярные логические элементы на основе содержащих порфирины бихромофорных супрамолекулярных систем	21
Кленицкий Д. В., Крук Н. Н. Флуоресценция и фосфоресценция красителей при стационарном фотовозбуждении	27
Наркевич И. И. Интегральное уравнение для потенциалов средних сил и свободная энергия однокомпонентной неоднородной системы в рамках двухуровневого молекулярно-статистического метода.....	32
Бокун Г. С., Наркевич И. И. Компьютерное построение алмазной решетки и ее использование для расчета унарных функций распределения атомов углерода в сферической наночастице.....	39
Чаевский В. В., Рудак П. В., Кулешов А. К. Износ лезвий ножей дереворежущего фрезерного инструмента с ZrC-, ZrC-Ni-УДА-покрытиями	46
ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ.....	52
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ	52
Карпович Д. С., Шумский А. Н. Синтез системы управления с нечетким регулятором и шумом во входном канале.....	52
Кузьмицкий И. Ф., Асмыкович И. К., Лапето А. В. Использование технологии вложения при синтезе дискретных линейных систем с элементами запаздывания	58
Овцов С. А., Сарока В. В. Разработка оптимальной системы управления роботом-манипулятором гальванической линии для погашения колебаний подвески в переходных режимах	63
СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И ОБУЧАЮЩИЕ СИСТЕМЫ.....	69
Герман Ю. О. Формализованная модель «виртуального» учителя	69
АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ	74
Гладкий М. В. Модель стоимости затрат MapReduce-вычислений.....	74
Новицкая А. Д., Жилияк Н. А. Методы распознавания и отслеживания изменения объекта с течением времени.....	79
Цыганенко Н. П. Математическое моделирование систем кэширования	82

CONTENTS

.....

PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES	5
MATHEMATICS	5
Ignatenko V. V., Krakhotko V. V., Razmyslovich G. P. To the controllability of linear systems regulators descriptor.....	5
Mozhey N. P. Canonical connections on three-dimensional symmetric spaces colvable Lie groups.....	8
MECHANICS	14
Groda Ya. G., Bildanau E. E., Vikhrenko V. S. Generalized quasi-chemical approximation for the lattice system with SALR-potential	14
PHYSICS	21
Kruk M. M., Klenitsky D. V. Molecular logic units based on the bichromophoric supramolecular systems containing porphyrins.....	21
Klenitsky D. V., Kruk M. M. Fluorescence and phosphorescence of dyes at stationary photoexcitation.....	27
Narkevich I. I. Integral equations for the potentials secondary forces and free energy inhomogeneous one-component system within two-level molecular-statistical methods	32
Bokun G. S., Narkevich I. I. Computer diamond lattice building and its use for calculation unary distribution functions of atoms of carbon in spherical nanoparticles.....	39
Chayeuski V. V., Rudak P. V., Kuleshov A. K. Knife blades wear of wood-cutting tool with the ZrC-, ZrC-Ni-UDD-coatings	46
COMPUTER SCIENCE AND ENGINEERING SCIENCES	52
MODELLING OF PROCESSES AND MANAGEMENT IN TECHNICAL SYSTEMS	52
Karpovich D. S., Shumski A. N. Synthesis of control systems with fuzzy controller and the noise in the input channel	52
Kuz'mitskiy I. F., Asmykovich I. K., Lapeto A. V. Using the embedding technology in the synthesis of linear discrete systems with delay elements	58
Ovtsov S. A., Saroka V. V. The development of optimal control systems by robotic-manipulator of galvanic lines for maturity vibrations suspension in transition modes	63
SYSTEM ANALYSIS AND TRAINING SYSTEMS	69
German Yu. O. A formal model of "virtual" tutor.....	69
ALGORITHMIC AND PROGRAMMING	74
Gladkiy M. V. The cost model of MapReduce computations	74
Novitskaya A. D., Zhilyak N. A. Methods of object recognition and tracking its changes over time	79
Tsyganenko N. P. Mathematical modeling of caching systems	82

Редактор *Е. С. Ватечкина*
Компьютерная верстка *О. Ю. Шантарович*
Корректор *Е. С. Ватечкина*

Подписано в печать 31.03.2017. Формат 60×84¹/₈.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 10,8. Уч.-изд. л. 11,2.
Тираж 100 экз. Заказ 84.

Издатель и полиграфическое исполнение:
УО «Белорусский государственный технологический университет».
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий
№ 1/227 от 20.03.2014.
Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.