

Учреждение образования  
«Белорусский государственный  
технологический университет»

# ТРУДЫ БГТУ

**Научный журнал**

*Издается с июля 1993 года*

**Серия 3**

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ  
НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

**№ 2 (248) 2021 год**

*Выходит два раза в год*

Минск 2021

Educational institution  
“Belarusian State Technological University”

# PROCEEDINGS OF BSTU

**Scientific Journal**

*Published monthly since July 1993*

**Issue 3**

**PHYSICS  
AND MATHEMATICS.  
INFORMATICS**

**No. 2 (248) 2021**

*Published biannually*

Minsk 2021

*Учредитель* – учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет»

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

**Редакционная коллегия журнала:**

Шетько С. В., кандидат технических наук, доцент (заместитель главного редактора), Республика Беларусь;  
Жарский И. М., кандидат химических наук, профессор (заместитель главного редактора), Республика Беларусь;  
Черная Н. В., 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;  
Новикова И. В., доктор экономических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Наркевич И. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Куликович В. И., кандидат филологических наук, доцент, Республика Беларусь;  
Торчик В. И., доктор биологических наук, Республика Беларусь;  
Барчик Стэфан, доктор наук, профессор, Словацкая Республика;  
Жантасов К. Т., доктор технических наук, профессор, Республика Казахстан;  
Харша Ратнавира, доктор наук, профессор, Королевство Норвегия;  
Пайвинен Ристо, доктор наук, профессор, Финляндская Республика;  
Шкляр Б. Ш., профессор, Государство Израиль;  
Кох Барбара, доктор наук, профессор, Федеративная Республика Германия;  
Лакида П. И., доктор сельскохозяйственных наук, профессор, Украина;  
Головко М. Ф., член-корреспондент НАН Украины, доктор физико-математических наук, профессор, Украина;  
Бир Петр, доктор технических наук, профессор, Республика Польша;  
Савельев А. Г., кандидат технических наук, профессор, Латвийская Республика;  
Агриракис Панос, доктор наук, Греческая Республика;  
Горинштейн Ш., доктор наук, профессор, Государство Израиль;  
Эркаев А. У., доктор технических наук, профессор, Республика Узбекистан;  
Башкиров В. Н., доктор технических наук, профессор, Российская Федерация;  
Каклаускас А., доктор экономических наук, профессор, Литовская Республика;  
Каухова И. Е., доктор фармацевтических наук, профессор, Российская Федерация;  
Хассель Л. Г., доктор наук, профессор, Королевство Швеция;  
Флюрик 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;  
Карпович Д. С., кандидат технических наук, доцент, Республика Беларусь;  
Романенко Д. М., кандидат технических наук, доцент, Республика Беларусь;  
Пацей Н. В., кандидат технических наук, доцент, Республика Беларусь;  
Грода Я. Г., кандидат физико-математических наук, доцент, Республика Беларусь;  
Асмыкович И. К., кандидат физико-математических наук, доцент, 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, профессор, Республика Беларусь;  
Леваков А. А., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Мазаник С. А., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Щекин А. К., член-корреспондент, доктор физико-математических наук, профессор, Российская Федерация;  
Головко М. Ф., член-корреспондент, доктор физико-математических наук, профессор, Украина;  
Бартосевич Збигнев, доктор габилитованный, Республика Польша;  
Шкляр Бенцион, профессор, Государство Израиль;  
Агриракис Панос, доктор наук, профессор, Греческая Республика;  
Орлюкас Антанас Феликас, доктор наук, профессор, Литовская Республика;  
Соловьева И. Ф., кандидат физико-математических наук, доцент (ответственный секретарь), Республика Беларусь.

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

Телефоны: главного редактора журнала – (+375 17) 343-94-32;

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»*

**Publisher** – educational institution “Belarusian State Technological University”

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

**Editorial (Journal):**

Shet’ko S. V., PhD (Engineering), Associate Professor (deputy editor-in-chief), Republic of Belarus;  
Zharskiy I. M., PhD (Chemistry), Professor (deputy editor-in-chief), Republic of Belarus;  
Chernaya N. V., 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;  
Novikova I. V., DSc (Economics), Professor, Republic of Belarus;  
Narkevich I. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Kulikovich V. I., PhD (Philology), Associate Professor, Republic of Belarus;  
Torchik V. I., DSc (Biology), Republic of Belarus;  
Barcik Štefan, DSc, Professor, Slovak Republic;  
Zhantasov K. T., DSc (Engineering), Professor, Republic of Kazakhstan;  
Harsha Ratnaweera, DSc, Professor, Kingdom of Norway;  
Paivinen Risto, DSc, Professor, Republic of Finland;  
Shklyar B. Sh., Professor, State of Israel;  
Koch Barbara, DSc, Professor, Federal Republic of Germany;  
Lakida P. I., DSc (Agriculture), Professor, Ukraine;  
Golovko M. F., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Ukraine, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Ukraine;  
Beer Piotr, DSc (Engineering), Professor, Republic of Poland;  
Savel’ev A. G., PhD (Engineering), Professor, Republic of Latvia;  
Agryrakis Panos, DSc, Republic of Greece;  
Gorinshteyn Sh., DSc, Professor, State of Israel;  
Erkayev A. U., DSc (Engineering), Professor, Republic of Uzbekistan;  
Bashkirov V. N., DSc (Engineering), Professor, Russian Federation;  
Kaklauskas A., DSc (Economics), Professor, Republic of Lithuania;  
Kaukhova I. E., DSc (Pharmaceutics), Professor, Russian Federation;  
Hassel L. G., DSc, Professor, Kingdom of Sweden;  
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;  
Karpovich D. S., PhD (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus;  
Romanenko D. M., PhD (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus;  
Patsei N. V., PhD (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus;  
Groda Ja. G., PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Republic of Belarus;  
Asmykovich I. K., PhD (Physics and Mathematics), Associate 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), Professor, Republic of Belarus;  
Levakov A. A., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Mazanik S. A., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Shchekin A. K., Corresponding Member, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Russian Federation;  
Golovko M. F., Corresponding Member, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Ukraine;  
Bartosevich Zbigniew, DSc, Republic of Poland;  
Shklyar Benzion, Professor, State of Israel;  
Argyarakis Panos, DSc, Professor, Republic of Greece;  
Orlukas Antanas Feliksas, DSc, Professor, Republic of Lithuania;  
Solov’yeva I. F., PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor (executive editor), Republic of Belarus.

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

Telephones: editor-in-chief (+375 17) 343-94-32;

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

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

# ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

---

## МАТЕМАТИКА MATHEMATICS

---

УДК 517.977

**А. А. Якименко**

Белорусский государственный технологический университет

### **К ВОПРОСУ О МОДАЛЬНОМ УПРАВЛЕНИИ ОДНОЙ ТРЕХМЕРНОЙ СИСТЕМОЙ НЕЙТРАЛЬНОГО ТИПА В ОБЩЕЦИКЛИЧЕСКОМ СЛУЧАЕ ПРИ КРАТНЫХ КОРНЯХ**

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

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

**Для цитирования:** Якименко А. А. К вопросу о модальном управлении одной трехмерной системой нейтрального типа в общециклическом случае при кратных корнях // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 5–10.

**A. A. Yakimenka**

Belarusian State Technological University

### **TO THE QUESTION OF MODAL CONTROL FOR ONE THREE-DIMENSIONAL NEUTRAL TYPE SYSTEM IN GENERAL CYCLIC CASE WITH DOUBLE ROOTS**

The paper deals with the solution of the modal control problem for a three-dimensional stationary dynamic system with a delayed argument of a neutral type with one input and one state delay in general cyclic case with double roots of equation for founding regulators. The definition of the problem of modal control for the studied system is given. To solve this problem, linear feedback regulators are used that contain both linear and integral parts. These regulators use information about the current state of the system, as well as state vectors and their derivatives at previous times. Regulators are obtained in explicit form as elementary functions of the parameters of the original system and its state vector. The characteristic quasi-polynomial of the initial neutral type system closed by this regulator is given.

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

**For citation:** Yakimenka A. A. To the question of modal control for one three-dimensional neutral type system in general cyclic case with double roots. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics, Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 5–10.

**Введение.** Задача модального управления является одной из основных задач теории управления. Она хорошо изучена для систем без запаздывания. Для систем с запаздывающим аргументом, а также систем нейтрального типа решение задачи модального управления значительно сложнее [1–8]. В статье обобщаются результаты, полученные в работе [8], на одну трехмерную систему нейтрального типа в общециклическом случае при кратных корнях.

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

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

где  $A_i, i = 0, 1, 2$  – постоянные  $3 \times 3$ -матрицы;  $h > 0$  – постоянное запаздывание;  $b$  – ненулевой 3-вектор. Не ограничивая общности, считаем  $b' = [0, 0, 1]$  («'» означает транспонирование).

Присоединим к системе (1) регулятор вида

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

где  $q_{00}, q_{ij}$  – 3-векторы;  $g(s), s \in [-h, 0]$  – непрерывная 3-вектор-функция;  $L, M \in \mathbb{N}$ ;

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

Характеристическое уравнение системы (1) имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \det [A_0 + A_1 e^{-\lambda h} + A_2 \lambda e^{-\lambda h} - \lambda I_3] &\equiv \\ &\equiv \sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^3 \tilde{\alpha}_{ij} \lambda^i e^{-j\lambda h} = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где числа  $\tilde{\alpha}_{ij}$  вычисляются как функции матриц  $A_i, i = 0, 1, 2$ , в частности  $\tilde{\alpha}_{00} = \det A_0, \tilde{\alpha}_{30} = 1, \tilde{\alpha}_{33} = \det A_2$ .

**Определение 1.** Система (1) модально управляема регулятором вида (2), если для любых наперед заданных чисел  $\alpha_{ij}, i = 0, 1, 2, 3, j = 0, 1, 2, 3, \alpha_{30} = 1$ , найдется такой регулятор (2), при котором характеристическое уравнение замкнутой системы (1), (2) имеет вид (сравните с (3)):

$$\begin{aligned} \det [A_0 + A_1 e^{-\lambda h} + A_2 \lambda e^{-\lambda h} - \lambda I_3 + bU(\lambda)] &\equiv \\ &\equiv \sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^3 \alpha_{ij} \lambda^i e^{-j\lambda h} = 0, \end{aligned}$$

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

Рассмотрим еще одно определение модальной управляемости.

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

$$\begin{aligned} \det [A_0 + A_1 e^{-\lambda h} + A_2 \lambda e^{-\lambda h} - \lambda I_3 + bU(\lambda)] &\equiv \\ &\equiv \left( \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^2 \alpha_{ij} \lambda^i e^{-j\lambda h} \right) \times \\ &\times (\alpha_{30} + \alpha_{31} e^{-j\lambda h} + \alpha_{32} \lambda e^{-j\lambda h} + \lambda) = 0. \end{aligned}$$

Можно показать, что определения 1 и 2 эквивалентны.

Введем  $(3 \times 3)$ -матрицы:

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

$$W(\lambda) = [A^2(\lambda)b, A(\lambda)b, b], \quad \lambda \in \mathbb{C}.$$

Рассмотрим общециклический случай:

$$\det W(\lambda) = c(\gamma_0 + \gamma_1 e^{-\lambda h} + \lambda e^{-\lambda h}), \quad (c \neq 0).$$

Пусть матрица  $A(\lambda)$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} A(\lambda) &= \begin{bmatrix} \beta_0 + \beta_1 e^{-\lambda h} + \beta_2 \lambda e^{-\lambda h} & c(\gamma_0 + \gamma_1 e^{-\lambda h} + \lambda e^{-\lambda h}) & 0 \\ a_{21}(\lambda) & a_{22}(\lambda) & 1 \\ a_{31}(\lambda) & a_{32}(\lambda) & a_{33}(\lambda) \end{bmatrix} \equiv \\ &\equiv \begin{bmatrix} a_{11}(\lambda) & a_{12}(\lambda) & 0 \\ a_{21}(\lambda) & a_{22}(\lambda) & 1 \\ a_{31}(\lambda) & a_{32}(\lambda) & a_{33}(\lambda) \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

здесь  $\beta_i, i = 0, 1, 2, c, \gamma_0, \gamma_1$  – некоторые действительные числа;  $a_{ij}(\lambda), i = 1, 2, 3, j = 1, 2, 3$  – квазиполиномы:

$$a_{ij}(\lambda) = a_{ij0} + a_{ij1} e^{-\lambda h} + a_{ij2} \lambda e^{-\lambda h},$$

где  $a_{ijk} \in \mathbb{R}; k = 0, 1, 2$ .

Сделаем в системе (1) замену переменной по правилу

$$x = T_1(\lambda) y,$$

$$\text{где } T_1(\lambda) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -a_{11}(\lambda) + \eta_1(\lambda) & -a_{12}(\lambda) + \eta_2(\lambda) & 1 \end{bmatrix}.$$

Тогда система (1) с новой переменной в частотной области примет вид

$$\lambda y = \tilde{A}(\lambda)y + bU(\lambda)y, \quad (4)$$

$$\text{где } \tilde{A}(\lambda) = \begin{bmatrix} a_{11}(\lambda) & a_{12}(\lambda) & 0 \\ \eta_1(\lambda) & \eta_2(\lambda) & 1 \\ b_{31}(\lambda) & b_{32}(\lambda) & b_{33}(\lambda) \end{bmatrix};$$

$$b_{31}(\lambda) = a_{31}(\lambda) + a_{11}(\lambda)a_{21}(\lambda) - a_{11}(\lambda)\eta_1(\lambda) - a_{21}(\lambda)a_{33}(\lambda) + a_{22}(\lambda)\eta_1(\lambda) + a_{33}(\lambda)\eta_1(\lambda) - \eta_1(\lambda)\eta_2(\lambda);$$

$$b_{32}(\lambda) = a_{32}(\lambda) + a_{12}(\lambda)a_{21}(\lambda) - a_{12}(\lambda)\eta_1(\lambda) - a_{22}(\lambda)a_{33}(\lambda) + a_{22}(\lambda)\eta_2(\lambda) + a_{33}(\lambda)\eta_2(\lambda) - \eta_2^2(\lambda);$$

$$b_{33}(\lambda) = a_{22}(\lambda) + a_{33}(\lambda) - \eta_2(\lambda);$$

$\eta_1(\lambda), \eta_2(\lambda)$  – функции, которые определим ниже.  
Регулятор вида (2) в частотной области будем искать в виде

$$U_1(\lambda)y = (-b_{31}(\lambda), -b_{32}(\lambda), \eta_3(\lambda) - b_{33}(\lambda))y. \quad (5)$$

Тогда матрица  $\tilde{A}(\lambda)$  системы (4), замкнутой этим регулятором, примет вид

$$\tilde{A}(\lambda) = \begin{bmatrix} a_{11}(\lambda) & a_{12}(\lambda) & 0 \\ \eta_1(\lambda) & \eta_2(\lambda) & 1 \\ 0 & 0 & \eta_3(\lambda) \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Рассмотрим уравнение

$$\lambda^2 + (\gamma_1 - \beta_0)\lambda + \beta_1\gamma_0 - \beta_0\gamma_1 \equiv (\lambda - \xi_1)(\lambda - \xi_2) = 0, \quad \lambda, \xi_1, \xi_2 \in \mathbb{C}.$$

Пусть выполнено условие

$$\xi_1 = \xi_2 = \xi. \quad (7)$$

Рассмотрим величину

$$\delta(\xi) = \beta_0 + \beta_1 e^{-\xi h} - \xi. \quad (8)$$

Пусть  $\delta(\xi) \neq 0$  и функции  $\eta_1(\lambda), \eta_2(\lambda)$  в (6) имеют следующий вид:

$$\eta_1(\lambda) = -\alpha_{22}\lambda e^{-\lambda h} + (\alpha_{22}\beta_0 - \alpha_{21}\beta_1 - \alpha_{12} - 2\alpha_{22}\xi)e^{-\lambda h} - \frac{1}{\delta^2(\xi)}(\beta_0^2\beta_1 + \beta_1^3 e^{-2\xi h} + \alpha_{00}\beta_1 - \alpha_{12}\beta_0\beta_1 e^{-2\xi h} - 2\alpha_{22}\beta_0\beta_1 \xi e^{-2\xi h} - 2\alpha_{02}\beta_0 \xi h e^{-\xi h} - 2\alpha_{12}\beta_0 \xi^2 h e^{-\xi h} - 2\alpha_{22}\beta_0 \xi^3 h e^{-\xi h} +$$

$$+ \alpha_{01}\beta_1 \xi h e^{-\xi h} + 2\alpha_{21}\beta_0\beta_1 \xi e^{-\xi h} + 2\beta_0\beta_1^2 e^{-\xi h} - 2\alpha_{22}\xi^3 e^{-\xi h} + \alpha_{21}\beta_1 \xi^3 h e^{-\xi h} + \alpha_{10}\beta_1^2 \xi h e^{-\xi h} - \alpha_{01}\beta_0\beta_1 h e^{-\xi h} + \alpha_{11}\beta_1 \xi^2 h e^{-\xi h} - \alpha_{21}\beta_0\beta_1 \xi^2 h e^{-\xi h} - \alpha_{11}\beta_0\beta_1 \xi h e^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_0^2 \xi h e^{-\xi h} + \alpha_{22}\beta_0^2 \xi^2 h e^{-\xi h} - \alpha_{21}\beta_1 \xi^2 e^{-\xi h} + \beta_1^2 \xi^2 h e^{-\xi h} + \alpha_{00}\beta_1^2 h e^{-\xi h} + \alpha_{11}\beta_0\beta_1 e^{-\xi h} + \alpha_{02}\beta_0^2 h e^{-\xi h} + \alpha_{12}\xi^3 h e^{-\xi h} + \alpha_{10}\beta_1^2 e^{-\xi h} + \alpha_{22}\xi^4 h e^{-\xi h} + \alpha_{02}\xi^2 h e^{-\xi h} + 3\alpha_{22}\beta_1 \xi^2 e^{-2\xi h} + 2\alpha_{21}\beta_1^2 \xi e^{-2\xi h} + 2\alpha_{12}\beta_1 \xi e^{-2\xi h} + 2\alpha_{12}\beta_0 \xi e^{-\xi h} + 4\alpha_{22}\beta_0 \xi^2 e^{-\xi h} - 2\alpha_{22}\beta_0^2 \xi e^{-\xi h} + \alpha_{10}\beta_0\beta_1 - \alpha_{12}\xi^2 e^{-\xi h} - \alpha_{12}\beta_0^2 e^{-\xi h} + \alpha_{11}\beta_1^2 e^{-2\xi h} + \alpha_{02}\beta_1 e^{-2\xi h}) - (-\alpha_{02}\xi^2 - \alpha_{02}\beta_0^2 + \alpha_{00}\beta_1^2 + \alpha_{12}\beta_0^3 - \beta_1^2 \xi^2 - 3\alpha_{22}\xi^4 - 4\alpha_{12}\beta_0\beta_1 \xi e^{-\xi h} + 2\alpha_{22}\beta_0^2 \beta_1 \xi e^{-\xi h} - 2\alpha_{12}\xi^3 - 2\alpha_{21}\beta_0\beta_1^2 \xi e^{-\xi h} - 2\alpha_{22}\beta_0\beta_1 \xi^3 h e^{-\xi h} - \alpha_{11}\beta_0\beta_1^2 \xi h e^{-\xi h} - \alpha_{01}\beta_0\beta_1^2 h e^{-\xi h} - 2\alpha_{12}\beta_0\beta_1 \xi^2 h e^{-\xi h} - 2\alpha_{02}\beta_0\beta_1 \xi h e^{-\xi h} + 8\alpha_{22}\beta_0 \xi^3 - 7\alpha_{22}\beta_0^2 \xi^2 + \alpha_{10}\beta_0\beta_1^2 + 5\alpha_{12}\beta_0 \xi^2 - 2\alpha_{21}\beta_1 \xi^3 - 4\alpha_{12}\beta_0^2 \xi + 2\alpha_{02}\beta_0 \xi + 4\alpha_{21}\beta_0\beta_1 \xi^2 - 6\alpha_{22}\beta_0\beta_1 \xi^2 e^{-\xi h} + 2\alpha_{22}\beta_0^3 \xi + 2\beta_0\beta_1^2 \xi + 2\beta_1^3 \xi e^{-\xi h} + \alpha_{22}\beta_0^2 \beta_1 \xi^2 h e^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_0^2 \beta_1 \xi h e^{-\xi h} - \alpha_{21}\beta_0\beta_1^2 \xi^2 h e^{-\xi h} + \alpha_{01}\beta_1^2 \xi h e^{-\xi h} + \alpha_{11}\beta_1^2 \xi^2 h e^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_1 \xi^3 h e^{-\xi h} + \alpha_{10}\beta_1^3 \xi h e^{-\xi h} + \alpha_{21}\beta_1^2 \xi^3 h e^{-\xi h} + \alpha_{02}\beta_0^2 \beta_1 h e^{-\xi h} + \alpha_{22}\beta_1 \xi^4 h e^{-\xi h} - \alpha_{11}\beta_1 \xi^2 + \alpha_{10}\beta_1^3 e^{-\xi h} + \alpha_{01}\beta_1^2 e^{-\xi h} - \alpha_{11}\beta_0^2 \beta_1 - \alpha_{11}\beta_0\beta_1^2 e^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_0^2 \beta_1 e^{-\xi h} + \alpha_{00}\beta_1^3 h e^{-\xi h} + \beta_1^3 \xi^2 h e^{-\xi h} + \alpha_{02}\beta_1 \xi^2 h e^{-\xi h} + 2\alpha_{11}\beta_0\beta_1 \xi + 4\alpha_{22}\beta_1 \xi^3 e^{-\xi h} + 3\alpha_{12}\beta_1 \xi^2 e^{-\xi h} + 2\alpha_{02}\beta_1 \xi e^{-\xi h} + 3\alpha_{21}\beta_1^2 \xi^2 e^{-\xi h} + 2\alpha_{11}\beta_1^2 \xi e^{-\xi h} - 2\alpha_{02}\beta_0\beta_1 e^{-\xi h} - 2\alpha_{21}\beta_0^2 \beta_1 \xi) \times \frac{1}{\delta^2(\xi)} \frac{e^{-\xi h} - e^{-\lambda h}}{\lambda - \xi} + (-\alpha_{22}\xi^4 - \alpha_{01}\beta_1 \xi - \alpha_{11}\beta_1 \xi^2 -$$

$$\begin{aligned}
& -\alpha_{12}\xi^3 + \alpha_{01}\beta_0\beta_1 - \alpha_{10}\beta_1^2\xi - \alpha_{21}\beta_1\xi^3 - \alpha_{02}\beta_0^2 - \\
& -\alpha_{02}\xi^2 + \alpha_{21}\beta_0\beta_1\xi^2 + 2\alpha_{22}\beta_0\xi^3 - \alpha_{22}\beta_0^2\xi^2 + \\
& + 2\alpha_{12}\beta_0\xi^2 - \alpha_{12}\beta_0^2\xi + 2\alpha_{02}\beta_0\xi + \alpha_{11}\beta_0\beta_1\xi - \\
& -\alpha_{00}\beta_1^2 - \beta_1^2\xi^2) \cdot \frac{1}{\delta(\xi)} \left( \frac{e^{-\xi h} - e^{-\lambda h}}{(\lambda - \xi)^2} - \frac{he^{-\xi h}}{(\lambda - \xi)} \right) \cdot \\
& \eta_2(\lambda) = -\beta_0 - \alpha_{10} - \alpha_{21}\lambda e^{-\lambda h} + \frac{1}{\delta^2(\xi)\beta_1} \times \\
& \times (\alpha_{00}\beta_1^2 - \beta_1^2\xi^2 + \alpha_{22}\xi^4 + \alpha_{22}\beta_0^4 + 2\alpha_{12}\beta_0\beta_1\xi e^{-\xi h} + \\
& + \alpha_{02}\beta_1^2 e^{-2\xi h} - \alpha_{21}\beta_0^3\beta_1 - 8\alpha_{22}\beta_0^2\beta_1\xi e^{-\xi h} + \\
& + 4\alpha_{21}\beta_0\beta_1^2\xi e^{-\xi h} - 2\alpha_{22}\beta_0\beta_1\xi^3 he^{-\xi h} - \\
& - 2\alpha_{12}\beta_0\beta_1\xi^2 he^{-\xi h} - 2\alpha_{02}\beta_0\beta_1\xi he^{-\xi h} - \\
& - 4\alpha_{22}\beta_0\xi^3 + 6\alpha_{22}\beta_0^2\xi^2 - \alpha_{21}\beta_0\beta_1\xi^2 + \\
& + \alpha_{11}\beta_1^2\xi^2 he^{-\xi h} + \alpha_{22}\beta_1\xi^4 he^{-\xi h} + 2\alpha_{11}\beta_0\beta_1\xi + \\
& + 10\alpha_{22}\beta_0\beta_1\xi^2 e^{-\xi h} - 4\alpha_{22}\beta_0^3\xi + 2\beta_0\beta_1^2\xi + \\
& + 2\beta_1^3\xi e^{-\xi h} + \alpha_{22}\beta_0^2\beta_1\xi^2 he^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_0^2\beta_1\xi he^{-\xi h} - \\
& - \alpha_{11}\beta_0\beta_1^2\xi he^{-\xi h} - \alpha_{21}\beta_0\beta_1^2\xi^2 he^{-\xi h} + \\
& + \alpha_{01}\beta_1^2\xi he^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_1\xi^3 he^{-\xi h} - \alpha_{01}\beta_0\beta_1^2 he^{-\xi h} + \\
& + \alpha_{10}\beta_1^3\xi he^{-\xi h} + \alpha_{21}\beta_1^2\xi^3 he^{-\xi h} + \alpha_{02}\beta_0^2\beta_1 he^{-\xi h} - \\
& - \alpha_{11}\beta_1\xi^2 + \alpha_{10}\beta_1^3 e^{-\xi h} + \alpha_{10}\beta_0\beta_1^2 + \alpha_{01}\beta_1^2 e^{-\xi h} - \\
& - \alpha_{11}\beta_0^2\beta_1 - \alpha_{11}\beta_0\beta_1^2 e^{-\xi h} - \alpha_{12}\beta_0^2\beta_1 e^{-\xi h} + \\
& + \alpha_{00}\beta_1^3 he^{-\xi h} + \beta_1^3\xi^2 he^{-\xi h} + \alpha_{02}\beta_1\xi^2 he^{-\xi h} - \\
& - 4\alpha_{22}\beta_1\xi^3 e^{-\xi h} - \alpha_{12}\beta_1\xi^2 e^{-\xi h} - \alpha_{21}\beta_1^2\xi^2 e^{-\xi h} + \\
& + 2\alpha_{11}\beta_1^2\xi e^{-\xi h} + 2\alpha_{21}\beta_0^2\beta_1\xi - \alpha_{12}\beta_0\beta_1^2 e^{-2\xi h} - \\
& - \alpha_{21}\beta_0\beta_1^3 e^{-2\xi h} + \alpha_{22}\beta_0^2\beta_1^2 e^{-2\xi h} + 2\alpha_{22}\beta_0^3\beta_1 e^{-\xi h} + \\
& + 2\alpha_{12}\beta_1^2\xi e^{-2\xi h} + 2\alpha_{21}\beta_1^3\xi e^{-2\xi h} + 4\alpha_{22}\beta_1^2\xi^2 e^{-2\xi h} - \\
& - 2\alpha_{21}\beta_0^2\beta_1^2 e^{-\xi h} - 4\alpha_{22}\beta_0\beta_1^2\xi e^{-2\xi h}) e^{-\lambda h} + \\
& + (-\alpha_{12}\xi^4 - \alpha_{12}\beta_0^4 + \beta_1^3\xi^2 e^{-\xi h} - \alpha_{21}\beta_1\xi^4 + \alpha_{01}\beta_1\xi^2 + \\
& + \alpha_{01}\beta_0^2\beta_1 + \alpha_{10}\beta_1^2\xi^2 - \alpha_{10}\beta_0^2\beta_1^2 + \alpha_{11}\beta_0^3\beta_1 - \\
& - \alpha_{00}\beta_1^3 e^{-\xi h} + \alpha_{10}\beta_1^3\xi^2 he^{-\xi h} + \alpha_{12}\beta_1\xi^4 he^{-\xi h} + \\
& + \alpha_{21}\beta_1^2\xi^4 he^{-\xi h} + \alpha_{21}\beta_0^2\beta_1^2\xi^2 he^{-\xi h} - \\
& - \alpha_{22}\beta_0^3\beta_1\xi^2 he^{-\xi h} - \alpha_{12}\beta_0^3\beta_1\xi he^{-\xi h} + \\
& + \alpha_{11}\beta_0^2\beta_1^2\xi he^{-\xi h} + \alpha_{11}\beta_0\beta_1^3\xi^2 e^{-\xi h} + \\
& + \alpha_{02}\beta_1^2\xi^2 e^{-\xi h} + \beta_1^3\xi^3 he^{-\xi h} - \\
& - \alpha_{10}\beta_0\beta_1^3 e^{-\xi h} - \alpha_{12}\beta_0^3\beta_1 e^{-\xi h} + 4\alpha_{21}\beta_0\beta_1\xi^3 + \\
& + 2\alpha_{21}\beta_1^2\xi^3 e^{-\xi h} - 2\alpha_{02}\beta_0\beta_1\xi e^{-\xi h} - 2\alpha_{01}\beta_0\beta_1\xi^2 - \\
& - 2\beta_0\beta_1^3\xi e^{-\xi h} - 2\alpha_{11}\beta_0^2\beta_1\xi + 7\alpha_{22}\beta_0^2\beta_1\xi^2 e^{-\xi h} - \\
& - 4\alpha_{21}\beta_0\beta_1^2\xi^2 e^{-\xi h} - 5\alpha_{12}\beta_0\beta_1\xi^2 e^{-\xi h} - \\
& - 2\alpha_{11}\beta_0\beta_1^2\xi e^{-\xi h} - 8\alpha_{22}\beta_0\beta_1\xi^3 e^{-\xi h} + \\
& + 4\alpha_{12}\beta_0^2\beta_1\xi e^{-\xi h} - 2\alpha_{11}\beta_0\beta_1^2\xi^2 he^{-\xi h} - \\
& - 2\alpha_{21}\beta_0\beta_1^2\xi^3 he^{-\xi h} + 3\alpha_{22}\beta_0^2\beta_1\xi^3 he^{-\xi h} + \\
& + 3\alpha_{12}\beta_0^2\beta_1\xi^2 he^{-\xi h} + 3\alpha_{02}\beta_0^2\beta_1\xi he^{-\xi h} - \\
& - 3\alpha_{22}\beta_0\beta_1\xi^4 he^{-\xi h} - 3\alpha_{12}\beta_0\beta_1\xi^3 he^{-\xi h} - \\
& - 3\alpha_{02}\beta_0\beta_1\xi^2 he^{-\xi h} + 2\alpha_{21}\beta_0^2\beta_1^2\xi e^{-\xi h} - \\
& - 2\alpha_{22}\beta_0^3\beta_1\xi e^{-\xi h} - 2\alpha_{01}\beta_0\beta_1^2\xi he^{-\xi h} - \\
& - 2\alpha_{22}\xi^5 - \alpha_{10}\beta_0\beta_1^3\xi he^{-\xi h} - 2\beta_0^2\beta_1^2\xi + 2\beta_0\beta_1^2\xi^2 + \\
& + 8\alpha_{22}\beta_0\xi^4 + \alpha_{00}\beta_1^3\xi he^{-\xi h} + \alpha_{01}\beta_1^2\xi^2 he^{-\xi h} - \\
& - 12\alpha_{22}\beta_0^2\xi^3 + 4\alpha_{12}\beta_0\xi^3 - 6\alpha_{12}\beta_0^2\xi^2 + 4\alpha_{12}\beta_0^3\xi - \\
& - 2\alpha_{00}\beta_0\beta_1^2 - 2\alpha_{22}\beta_0^4\xi + 8\alpha_{22}\beta_0^3\xi^2 + 2\alpha_{00}\beta_1^2\xi - \\
& - \alpha_{02}\beta_0^3\beta_1 he^{-\xi h} - \beta_0\beta_1^3\xi^2 he^{-\xi h} + \alpha_{11}\beta_1^2\xi^3 he^{-\xi h} + \\
& + \alpha_{22}\beta_1\xi^5 he^{-\xi h} + \alpha_{02}\beta_1\xi^3 he^{-\xi h} + \alpha_{01}\beta_0^2\beta_1^2 he^{-\xi h}) \times \\
& \times \frac{1}{\delta^2(\xi)\beta_1} \frac{e^{-\xi h} - e^{-\lambda h}}{\lambda - \xi} - (\beta_0 - \xi) \times \\
& \times (\alpha_{22}\xi^4 + \alpha_{01}\beta_1\xi + \alpha_{11}\beta_1\xi^2 + \alpha_{12}\xi^3 - \alpha_{01}\beta_0\beta_1 + \\
& + \alpha_{10}\beta_1^2\xi + \alpha_{21}\beta_1\xi^3 + \alpha_{02}\beta_0^2 + \alpha_{02}\xi^2 - \alpha_{21}\beta_0\beta_1\xi^2 - \\
& - 2\alpha_{22}\beta_0\xi^3 + \alpha_{22}\beta_0^2\xi^2 - 2\alpha_{12}\beta_0\xi^2 + \alpha_{12}\beta_0^2\xi - \\
& - 2\alpha_{02}\beta_0\xi - \alpha_{11}\beta_0\beta_1\xi^2 + \alpha_{00}\beta_1^2 + \beta_1^2\xi^2) \times \\
& \times \frac{1}{\delta(\xi)\beta_1} \left( \frac{e^{-\xi h} - e^{-\lambda h}}{(\lambda - \xi)^2} - \frac{he^{-\xi h}}{(\lambda - \xi)} \right).
\end{aligned}$$

Пусть  $\eta_3(\lambda)$  в регуляторе (5) имеет вид

$$\eta_3(\lambda) = -\alpha_{30} - \alpha_{31}e^{-j\lambda h} - \alpha_{32}\lambda e^{-j\lambda h}.$$

Нетрудно проверить, что регулятор (5) решает задачу модального управления для системы (4), а регулятор

$$U(\lambda)x = U_1(\lambda)T^{-1}(\lambda)x$$

решает данную задачу для системы (1).

Таким образом, доказана теорема.

**Теорема.** Для того, чтобы система (1) была модально управляема регулятором вида (2) в случае (7), необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$\delta(\xi) \neq 0,$$

где  $\delta(\xi)$  определено в (8).

**Замечание.** В полученных регуляторах требуется перейти из частотной во временную область. При этом необходимо следовать нижеприведенным правилам.

1. Слагаемые вида  $\alpha\lambda^i e^{-j\lambda h} x_k(\lambda)$ ,  $k=1, 2$ ,  $i, j \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ ,  $\alpha \in \mathbb{R}$  в частотной области соответствуют следующим слагаемым во временной области:

$$\alpha \frac{d^i x_k(t-jh)}{dt^i}.$$

2. Слагаемые вида  $\alpha \frac{e^{-\xi h} - e^{-\lambda h}}{\lambda - \xi} x_k(\lambda)$ ,  $k=1, 2$ ,

$\alpha \in \mathbb{R}$ ,  $\lambda, \xi \in \mathbb{C}$  в частотной области, согласно теореме о свертке, соответствуют следующим слагаемым:

$$\alpha \int_{-h}^0 H(t+s)H(h+s)e^{-(h+s)\xi} x_k(t+s) ds.$$

3. Слагаемые вида  $\alpha \left( \frac{e^{-\xi h} - e^{-\lambda h}}{(\lambda - \xi)^2} - \frac{he^{-\xi h}}{(\lambda - \xi)} \right) \times$

$\times x_k(\lambda)$ ,  $k=1, 2$ ,  $\alpha \in \mathbb{R}$ ,  $\lambda, \xi \in \mathbb{C}$  в частотной области соответствуют слагаемым вида

$$\alpha \int_{-h}^0 H(t+s)H(h+s)(-h-s)e^{-(h+s)\xi} x_k(t+s) ds.$$

**Заключение.** Таким образом, полученные регуляторы решают задачу модального управления для рассматриваемой системы в общециклическом случае при кратных корнях.

### Список литературы

1. Марченко В. М. О проблеме модального управления в линейных системах с запаздыванием // Доклады Академии наук БССР. 1978. № 5. С. 401–404.
2. Salamon D. Control and Observation of Neutral Systems. Pitman Press, 1984. 362 p.
3. Wonham W. M. On pole assignment in multi-input controllable systems // IEEE Trans. Automat. Contr. 1967. Vol. AC-12, no. 6. P. 660–665.
4. Spong M. W. A semistate approach to feedback stabilization of neutral delay systems // Circuits Systems Signal Process. 1986. Vol. 5, no. 1. P. 69–84.
5. Якименко А. А. Модальное управление одной запаздывающей системой // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 3–7.
6. Якименко А. А. Модальное управление одной системой нейтрального типа // Труды БГТУ. 2016. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 18–21.
7. Якименко А. А. Модальное управление одной системой нейтрального типа в общециклическом случае // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2017. № 2 (200). С. 25–27.
8. Якименко А. А. Модальное управление одной системой нейтрального типа в общециклическом случае при кратных корнях // Труды БГТУ. 2018. № 1 (206). Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. С. 5–8.

### References

1. Marchenko V. M. On problem of modal control in linear systems with delay. *Doklady Akademii nauk BSSR* [Reports of the BSSR Academy of Science], 1978, no. 5, pp. 401–404 (In Russian).
2. Salamon D. Control and Observation of Neutral Systems. Pitman Press, 1984, 362 p.
3. Wonham W. M. On pole assignment in multi-input controllable systems. *IEEE Trans. Automat. Contr.*, 1967, vol. AC-12, no. 6, pp. 660–665.
4. Spong M. W. A semistate approach to feedback stabilization of neutral delay systems. *Circuits Systems Signal Process*, 1986, vol. 5, no. 1, pp. 69–84.
5. Yakimenka A. A. Modal control for one delayed system. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2013, no. 6: Physics and Mathematics. Informatics, pp. 3–7 (In Russian).

6. Yakimenka A. A. Modal control for one neutral type system. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2016, no. 6: Physics and Mathematics. Informatics, pp. 18–21 (In Russian).

7. Yakimenka A. A. Modal control for one neutral type system in general cyclic case. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2017, no. 2 (200), pp. 25–27 (In Russian).

8. Yakimenka A. A. Modal control for one neutral type system in general cyclic case with double roots. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2018, no. 1 (206), pp. 5–8 (In Russian).

#### **Информация об авторе**

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

#### **Information about the author**

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

*Поступила после доработки 29.04.2021*

УДК 517.15:584

**Л. Д. Яроцкая**

Белорусский государственный технологический университет

**АСИМПТОТИКА ИНТЕГРАЛОВ,  
СВЯЗАННЫХ С АППРОКСИМАЦИЕЙ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ФУНКЦИЙ  
БЕССЕЛЯ И ИХ КОМБИНАЦИЙ**

Проблема асимптотических разложений специальных функций по индексам или параметрам возникает в связи с исследованием некоторых классов индексных интегралов и преобразований по индексу, когда в одной из формул интегрирование осуществляется по параметру (индексу) функции ядра. Наиболее общими ядрами таких преобразований являются функции гипергеометрического типа, в частности функции Бесселя и их комбинации. Для таких функций справедливо свойство иметь своим преобразованием Меллина отношение произведений гамма-функций Эйлера, асимптотика которых в соответствии с формулой Стирлинга известна. В работе представлена формула Стирлинга для гамма-функции комплексного аргумента, у которого мнимая часть неограниченно увеличивается, а действительная часть фиксирована. Установлено, что при больших значениях параметра асимптотические оценки модифицированных функций Бесселя мнимого индекса и их комбинации содержат одинаковые множители независимого аргумента, которые и приводят к интегралам Фурье. Асимптотика интегралов Фурье существенно зависит от дифференциальных свойств подынтегральной функции на всей области интегрирования. В настоящей работе применяется метод стационарной фазы при исследовании асимптотики интегралов Фурье при больших значениях параметра. Согласно принципу локализации вычислены вклады в асимптотику интеграла от критических точек (стационарных точек фазы) и от границы области интегрирования.

**Ключевые слова:** асимптотические оценки, формула Стирлинга, преобразования по индексу, функции Бесселевого типа, интегралы Фурье, метод стационарной фазы.

**Для цитирования:** Яроцкая Л. Д. Асимптотика интегралов, связанных с аппроксимацией модифицированных функций Бесселя и их комбинаций // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 11–14.

**L. D. Yarotskaya**

Belarusian State Technological University

**ASYMPTOTICS OF INTEGRALS  
ASSOCIATED WITH THE APPROXIMATION  
OF MODIFIED BESSEL FUNCTIONS AND THEIR COMBINATIONS**

The problem of asymptotic expansions of special functions with respect to indices or parameters arises in connection with the certain classes of index integrals and transformations with respect to the index, when in one of the formulas the integration is carried out over a parameter (index) of the kernel. The most common kernels of such transformations are hypergeometric functions, in particular, Bessel functions and their combinations. For such functions, it is true that the Mellin transformation has the ratio of the products of Euler's gamma functions, the asymptotics of which, in accordance with the Stirling formula, is known. The paper presents the Stirling formula for the gamma function of a complex argument, in which the imaginary part increases indefinitely, and the real part is fixed. It is found that for large values of the parameter, the asymptotic estimates of the modified Bessel functions of the imaginary index and their combinations contain the same multipliers of the independent argument, which lead to Fourier integrals. The asymptotics of Fourier integrals essentially depends on the differential properties of the integral function over the entire domain of integration. In this paper, the stationary phase method is used to study the asymptotics of Fourier integrals for large values of the parameter. According to the principle of localization, the contributions to the asymptotics of the integral from the critical points (stationary points of the phase) and from the boundary of the integration region are calculated.

**Key words:** asymptotic estimates, Stirling formula, index transformations, Bessel-type functions, Fourier integrals, stationary phase method.

**For citation:** Yarotskaya L. D. Asymptotics of integrals associated with the approximation of modified Bessel functions and their combinations. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 11–14 (In Russian).

**Введение.** Проблема асимптотических разложений специальных функций по индексам или параметрам возникает в связи с исследованием некоторых классов индексных интегралов [1] и преобразований по индексу [2]. В теории интегральных преобразований известны разложения произвольных функций, записанные в виде аналогов интеграла Фурье. Данные представления порождают пары индексных преобразований, причем интегрирование в одной из формул осуществляется по индексу специальной функции, входящей в ядро. Асимптотическое поведение таких функций различно в зависимости от того, что стремится к бесконечности: параметры, независимая переменная или эти величины вместе. Исследования в этой области основаны или на интегральных представлениях, или же непосредственно на дифференциальном уравнении, либо на подходящем разложении в бесконечный ряд [3].

Настоящая работа посвящена изучению при больших значениях параметра асимптотических свойств интегралов от специальных функций, введенных в качестве ядер преобразований по индексу. Вычисление асимптотики основано на применении метода стационарной фазы для быстро осциллирующих интегралов [3, 4].

### Основная часть.

1. *Предварительные сведения.* Модифицированная функция Бесселя

$$I_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(k+\nu+1)k!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2k+\nu} \quad (1)$$

и функция Макдональда

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2 \sin(\nu\pi)} [I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)] \quad (2)$$

являются линейно независимыми решениями  $u(z)$  дифференциального уравнения Бесселя [5]:

$$u'' + \frac{1}{z}u' - \left(1 + \frac{\nu^2}{z^2}\right)u = 0,$$

где  $z$  – комплексная переменная;  $\nu$  – параметр (индекс), который может принимать любые вещественные или комплексные значения. Это уравнение встречается при рассмотрении краевых задач теории потенциала для цилиндрических областей.

Отметим [5], что  $I_\nu(z)$  и  $K_\nu(z)$  представляют собой регулярные функции  $z$  в плоскости с разрезом  $(-\infty; 0)$  и целые функции  $\nu$ , причем

$$K_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} K_\nu(z), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Установлено [2], что в силу универсальной структуры ядер, относящихся к функциям гипергеометрического типа, все известные в литературе преобразования по индексу композиционно связаны с преобразованием Конторовича – Лебедева:

$$xf(x) = \frac{2}{\pi^2} \int_0^{\infty} \tau \operatorname{sh}(\pi\tau) K_{i\tau}(x) g(\tau) d\tau, \quad x > 0; \quad (3)$$

$$g(\tau) = \int_0^{\infty} K_{i\tau}(y) f(y) dy, \quad \tau > 0,$$

или его модификацией с функцией (1)

$$f(x) = \frac{1}{\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} t K_t(x) dt \int_0^{\infty} I_t(y) f(y) \frac{dy}{y}.$$

Приведем следующие пары прямого и обратного преобразований Лебедева [2] с квадратами функций (1) и (2):

$$f(x) = \frac{i}{\sqrt{\pi}} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \tau I_{i\tau}^2(x) g(\tau) d\tau, \quad x > 0;$$

$$g(\tau) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} K_{i\tau}^2(y) f(y) dy, \quad \tau > 0,$$

и линейной комбинацией функций (1) и (2):

$$f(x) = -\frac{4}{\pi^2} \frac{d}{dx} \int_0^{\infty} \tau \operatorname{sh}(\pi\tau) K_{i\tau}^2(x) g(\tau) d\tau;$$

$$g(\tau) = \int_0^{\infty} [I_{i\tau}(y) + I_{-i\tau}(y)] K_{i\tau}(y) f(y) dy.$$

На функции  $f(x)$  или  $g(\tau)$  накладывают условия, обеспечивающие сходимость соответствующих интегралов. При этом учитывают асимптотические свойства специальной функции ядра [2].

2. *Асимптотика индексных ядер* при фиксированных  $x$  и больших  $\tau$  исследована в работах [6, 7]. В частности, на основании формулы Стирлинга для гамма-функции Эйлера на прямых, параллельных мнимой оси,

$$\Gamma(\alpha \pm i\tau) = \sqrt{2\pi\tau}^{\alpha - \frac{1}{2}} e^{-\frac{\pi\tau}{2}} \times \\ \times \exp\left[\pm i\left\{\frac{\pi}{2}\left(\alpha - \frac{1}{2}\right) + \tau \ln \tau - \tau\right\} - O\left(\frac{1}{\tau}\right)\right] \quad (4)$$

при  $\tau \rightarrow +\infty$  получены уравнения:

$$I_{\pm i\tau}(x) = \frac{e^{\pi\tau/2}}{\sqrt{2\pi\tau}} \exp\left[\mp i\left\{\frac{\pi}{4} + \tau \ln \tau - \tau\right\}\right] \times \\ \times \exp\left[\mp i\left\{-\tau \ln \frac{x}{2} + \frac{x^2}{4\tau}\right\}\right] \left(1 + O\left(\frac{1}{\tau}\right)\right); \quad (5)$$

$$K_{i\tau}(x) = \sqrt{\frac{2\pi}{\tau}} e^{-\pi\tau/2} \times \\ \times \sin\left(\frac{\pi}{4} + \tau \ln \tau - \tau - \tau \ln \frac{x}{2} + \frac{x^2}{4\tau}\right) \left(1 + O\left(\frac{1}{\tau}\right)\right); \quad (6)$$

$$[I_{i\tau}(x) + I_{-i\tau}(x)]K_{i\tau}(x) = \frac{1}{\tau} \cos 2 \left[ \tau \ln \tau - \tau - \tau \ln \frac{x}{2} + \frac{x^2}{4\tau} \right] \left( 1 + O\left(\frac{1}{\tau}\right) \right); \quad (7)$$

$$K_{i\tau}^2(x) = \frac{\pi}{2 \operatorname{sh}(\pi\tau) \sqrt{\tau^2 - x^2}} + \frac{\pi e^{-\pi\tau}}{\tau} \times \sin 2 \left( \tau \ln \tau - \tau - \tau \ln \frac{x}{2} + \frac{x^2}{4\tau} \right) \left( 1 + O\left(\frac{1}{\tau}\right) \right). \quad (8)$$

Отметим, что формула (6) уточняет асимптотическое разложение, полученное в монографии [5, с. 182].

Исследование вопросов сходимости интегралов от цилиндрических функций и их комбинаций с учетом асимптотических свойств (5)–(8) приводит к изучению поведения интегралов Фурье при больших значениях параметра.

**3. Постановка задачи.** Исследовать поведение интеграла при  $\tau \rightarrow +\infty$ :

$$I(\tau) = \int_0^\infty \exp \left[ i \left( \tau \ln x - \frac{x^2}{4\tau} \right) \right] dx. \quad (9)$$

Отметим, что выражение в показателе экспоненты присутствует в формулах (5)–(8).

С помощью замены  $x = \sqrt{2\tau t}$  преобразуем интеграл (9) к виду

$$I(\tau) = \sqrt{2\tau} e^{i\tau \ln(\sqrt{2\tau})} \int_0^\infty \exp \left[ i\tau \left( \ln t - \frac{t^2}{2} \right) \right] dt.$$

Применим метод стационарной фазы [3, 4] к исследованию интеграла Фурье:

$$\Phi(\tau) = \int_0^\infty \exp \left[ i\tau \left( \ln t - \frac{t^2}{2} \right) \right] dt. \quad (10)$$

Здесь фазовая функция

$$S(t) = \ln t - \frac{t^2}{2} \quad (11)$$

вещественнозначна и имеет в области интегрирования единственную стационарную точку  $t_0 = 1$ , причем  $S(1) = -1/2$  и  $S''(1) = -2$ .

**4. Исследование интеграла Фурье.** Суть метода заключается в том, что при достаточно больших положительных значениях  $\tau$  интеграл (10) будет мал за счет быстрой осцилляции экспоненты и основной вклад в асимптотику  $\Phi(\tau)$  могут вносить стационарные (критические) точки фазы  $S(t)$ , вблизи которых осцилляция подынтегральной функции замедляется, и граничные точки области интегрирования. Далее фазу (11) приводят к возможно более простому виду с помощью

подходящей замены переменных, затем исследуют полученные интегралы. Согласно принципу локализации,

$$\Phi(\tau) = V_0(\tau) + V_{t_0=1}(\tau) + V_{+\infty}(\tau).$$

Вклады  $V_0(\tau)$  и  $V_{+\infty}(\tau)$  вычислим интегрированием (10) по частям. Имеем

$$\begin{aligned} & \int \exp \left[ i\tau \left( \ln t - \frac{t^2}{2} \right) \right] dt = \\ & = \frac{1}{i\tau} \int \frac{t}{1-t^2} d \left( \exp \left[ i\tau \left( \ln t - \frac{t^2}{2} \right) \right] \right) = \\ & = \frac{1}{i\tau} \frac{t}{1-t^2} \exp \left[ i\tau \left( \ln t - \frac{t^2}{2} \right) \right] - \\ & - \frac{1}{(i\tau)^2} \frac{t(1+t^2)}{(1-t^2)^3} \exp \left[ i\tau \left( \ln t - \frac{t^2}{2} \right) \right] + \\ & + \frac{1}{(i\tau)^2} \int \exp \left[ i\tau \left( \ln t - \frac{t^2}{2} \right) \right] d \left( \frac{t(1+t^2)}{(1-t^2)^3} \right). \end{aligned}$$

Таким образом, на промежутках  $(0, t_0 - \varepsilon]$  и  $[t_0 + \varepsilon, +\infty)$ ,  $\varepsilon > 0$ , не содержащих стационарную точку  $t_0 = 1$ , можно убедиться, что  $V_0(\tau) = O(\tau^{-1})$  и  $V_{+\infty}(\tau) = O(\tau^{-1})$  при  $\tau \rightarrow +\infty$ .

Вычислим вклад  $V_{t_0=1}(\tau)$  в асимптотику  $\Phi(\tau)$  от стационарной точки фазы (11). На малом отрезке  $[t_0 - \varepsilon, t_0 + \varepsilon]$ ,  $\varepsilon > 0$  заменим

$$S(t) \approx S(t_0) + \frac{1}{2} S''(t_0) (t - t_0)^2 = -\frac{1}{2} - (t - 1)^2,$$

тогда

$$\begin{aligned} V_{t_0=1}(\tau) & \approx e^{-i\tau/2} \int_{1-\varepsilon}^{1+\varepsilon} \exp \left[ -i\tau(t-1)^2 \right] dt = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2\tau}} e^{-i\tau/2} \int_{-\varepsilon\sqrt{2\tau}}^{\varepsilon\sqrt{2\tau}} e^{-iy^2/2} dy, \end{aligned}$$

где  $y = \sqrt{2\tau}(t-1)$ . При  $\tau \rightarrow +\infty$  последний интеграл стремится к интегралу Френеля вида

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-it^2/2} dt = \sqrt{2\pi} e^{-i\pi/4}.$$

Далее имеем

$$V_{t_0=1}(\tau) \approx \sqrt{\frac{\pi}{\tau}} e^{-i\left(\frac{\tau}{2} + \frac{\pi}{4}\right)}.$$

Таким образом, вклады на границе области интегрирования имеют порядок  $O(\tau^{-1})$ , а от стационарной точки – порядок  $O(\tau^{-1})$ , так что последний в общем случае больше. Учитывая полученные результаты, запишем при  $\tau \rightarrow +\infty$  главный член асимптотики интеграла (9):

$$I(\tau) = \sqrt{2\pi\tau} \exp\left\{i\left(\tau \ln \sqrt{2}\tau - \frac{\tau}{2} + \frac{\pi}{4}\right)\right\}.$$

**Заключение.** Получены асимптотические оценки интегралов специального вида (интегралов Фурье) при больших положительных значениях параметров, которые возникают при исследовании условий существования преобразований по индексу и сходимости связанных с ними интегралов. В частности, для интегральных преобразований по индексу с модифицированными функциями Бесселя и их комбинациями.

### Список литературы

1. Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. Специальные функции. М.: Наука, 1983. 800 с.
2. Yakubovich S. B. Index transforms. Singapore: World Scientific Publ., 1996. 252 p.
3. Олвер Ф. Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990. 528 с.
4. Федорюк М. В. Метод перевала. М.: Наука, 1977. 366 с.
5. Лебедев Н. Н. Специальные функции и их приложения. М.; Л.: Физматгиз, 1963. 379 с.
6. Yakubovich S. B., Saigo M., Gusarevich L. D. Some asymptotic expansions of special functions by their indices // Fukuoka Univ. Sci. Reports. 1995. Vol. 25, no. 1. P. 23–32.
7. Яроцкая Л. Д. Асимптотические представления по индексу функций бесселевого типа // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2004. Вып. XII. С. 18–21.

### References

1. Prudnikov A. P., Brychkov Ju. A., Marichev O. I. *Integraly i ryady. Spetsial'nyye funktsii* [Integrals and Series. Special functions]. Moscow, Nauka Publ., 1983. 800 p.
2. Yakubovich S. B. Index transforms. Singapore, World Scientific Publ., 1996. 252 p.
3. Olver F. *Asimptotika i spetsial'nyye funktsii* [Asymptotics and special functions]. Moscow, Nauka Publ., 1990. 528 p.
4. Fedoryuk M. V. *Metod perevala* [Pass method]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 366 p.
5. Lebedev N. N. *Spetsial'nyye funktsii i ikh prilozheniya* [Special functions and their applications]. Moscow; Leningrad., Fizmatgiz Publ., 1963. 379 p.
6. Yakubovich S. B., Saigo M., Gusarevich L. D. Some asymptotic expansions of special functions by their indices. *Fukuoka Univ. Sci. Reports*, 1995, vol. 25, no. 1, pp. 23–32.
7. Yarotskaya L. D. Asymptotic representations of the Bessel type functions by their indices. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physics and Mathematics. Informatics, 2004, issue XII, pp. 18–21 (In Russian).

### Информация об авторе

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

### Information about the author

**Yarotskaya Lyudmila Dmitrievna** – 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: yarockaya@belstu.by

Поступила после доработки 08.04.2021

УДК 514.144

**Н. П. Можей**

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

**ЧЕТЫРЕХМЕРНЫЕ ОДНОРОДНЫЕ ПРОСТРАНСТВА  
С ПОЧТИ СИМПЛЕКТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ. ВЕЩЕСТВЕННЫЙ СЛУЧАЙ**

Целью данной работы является описание четырехмерных изотропно-точных однородных пространств с инвариантной невырожденной почти симплектической структурой над полем действительных чисел. В публикации определены основные понятия: почти симплектическая структура, изотропное представление, изотропно-точная пара, комплексификация алгебры Ли, антиинволюция, вещественная форма. Приведен алгоритм классификации изотропно-точных однородных пространств с инвариантной невырожденной почти симплектической структурой. Описано нахождение вещественных форм как подалгебр линейных алгебр Ли, так и изотропно-точных пар и проведено в явном виде описание четырехмерных изотропно-точных почти симплектических однородных пространств в вещественном случае. Особенностью методов, представленных в работе, является применение чисто алгебраического подхода к описанию однородных пространств и структур на них. Полученные результаты могут быть применены в работах по дифференциальной геометрии, дифференциальным уравнениям, топологии, а также в других разделах математики и физики, а алгоритмы, приведенные в работе, могут быть компьютеризованы и использованы для решения аналогичных задач в больших размерностях.

**Ключевые слова:** алгебра Ли, однородное пространство, вещественная форма, изотропное представление, почти симплектическая структура.

**Для цитирования:** Можей Н. П. Четырехмерные однородные пространства с почти симплектической структурой. Вещественный случай // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 15–21.

**N. P. Mozhey**

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

**FOUR-DIMENSIONAL HOMOGENEOUS SPACES  
WITH ALMOST SYMPLECTIC STRUCTURE. THE REAL CASE**

The purpose of the work is a description of four-dimensional isotropically-faithful homogeneous spaces with an invariant non-degenerate almost symplectic structure over the field of real numbers. It defines the basic concepts: almost symplectic structure, isotropic representation, isotropically-faithful pair, complexification of Lie algebra, anti-involution, real form. The algorithm for classifying isotropically-faithful homogeneous spaces with an invariant non-degenerate almost symplectic structure is presented. Finding real forms of both subalgebras of linear Lie algebras and isotropically-faithful pairs is described, and an explicit description of four-dimensional isotropically-faithful almost symplectic homogeneous spaces in the real case is given. The features of the methods presented in the work are the application of a purely algebraic approach to the description of homogeneous spaces and structures on them. The results obtained in the paper can be used in works on differential geometry, differential equations, topology, as well as in other areas of mathematics and physics. The algorithms given in the work can be computerized and used for the decision of similar problems in large dimensions.

**Key words:** Lie algebra, homogeneous space, real form, isotropic representation, almost symplectic structure.

**For citation:** Mozhey N. P. Four-dimensional homogeneous spaces with almost symplectic structure. The real case. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 15–21 (In Russian).

**Введение.** Симплектическое многообразие – это многообразие с заданной на нем симплектической формой (замкнутой невырожденной дифференциальной 2-формой). Интерес к симплектическим многообразиям возродился после публикации трудов А. Лихнеровича [1], А. Кириллова [2], А. Вайнштейна [3] и др. Симплектическое многообразие позволяет естественным геометрическим

образом ввести гамильтонову механику и дает наглядное толкование многим ее свойствам. Аппарат симплектической геометрии переносится с геометрической оптики и классической механики и на квантовую механику.

В работе [4] автором описаны подалгебры алгебры Ли  $\mathfrak{sp}(4, \mathbb{C})$ , а в работе [5] – четырехмерные изотропно-точные почти симплектические

однородные пространства над полем  $\mathbb{C}$ , там же даны основные определения и приведено более подробное обоснование применяемых методов, целью же данной работы является классификация четырехмерных изотропно-точных однородных пространств с инвариантной невырожденной почти симплектической структурой над полем  $\mathbb{R}$ .

**Основная часть.** Пусть  $(G, M)$  – четырехмерное однородное пространство, а  $G = G_x$  – стабилизатор произвольной точки  $x \in M$ . Паре  $(G, G)$  поставим в соответствие пару  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ , где  $\bar{\mathfrak{g}}$  – алгебра Ли группы  $G$  и  $\mathfrak{g}$  – подалгебра в  $\bar{\mathfrak{g}}$ , соответствующая подгруппе  $G$ . *Изотропное представление* пары  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$  – это отображение

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

Пара  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$  называется *изотропно-точной*, если точно изотропное представление  $\mathfrak{g}$ .

Пространство  $V^{\mathbb{C}} = V \otimes_{\mathbb{R}} \mathbb{C}$  называется *комплексификацией* вещественного векторного пространства  $V$ . Если на  $V$  задана структура вещественной алгебры Ли  $\mathfrak{g}$ , то она продолжается до структуры комплексной алгебры  $\mathfrak{g}^{\mathbb{C}}$ :

$$[g_1 \otimes z_1, g_2 \otimes z_2] = [g_1, g_2] \otimes z_1 z_2; \\ g_1, g_2 \in \mathfrak{g}, z_1, z_2 \in \mathbb{C}.$$

Алгебра  $\mathfrak{g}^{\mathbb{C}}$  называется *комплексификацией алгебры Ли  $\mathfrak{g}$* .

Пусть теперь  $\mathfrak{g}$  – алгебра Ли над  $\mathbb{C}$ , а – вещественная подалгебра в  $\mathfrak{g}$ ,  $\mathfrak{a} \subset \mathfrak{g}_{\mathbb{R}}$  (алгебру над  $\mathbb{C}$  можно рассматривать как алгебру над  $\mathbb{R}$  вдвое большей размерности). Подалгебра  $\mathfrak{a}$  называется *вещественной формой алгебры Ли  $\mathfrak{g}$* , если  $\mathfrak{a} \oplus i\mathfrak{a} = \mathfrak{g}$ ,  $\mathfrak{a} \cap i\mathfrak{a} = 0$  (тогда  $\mathfrak{a}^{\mathbb{C}} = \mathfrak{g}$ ).

Пусть  $\alpha$  – вещественная форма алгебры  $\mathfrak{g}$ . *Сопряжением относительно  $\alpha$  называется отображение  $\sigma: \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ ,  $\sigma(x + iy) = x - iy \forall x, y \in \mathfrak{a}$* . Отображение называется *антиинволюцией*, если оно обладает следующими свойствами:

$$\sigma^2 = id_{\mathfrak{g}}; \quad [\sigma(x), \sigma(y)] = \sigma([x, y]); \\ \sigma(\lambda x + \mu y) = \bar{\lambda}\sigma(x) + \bar{\mu}\sigma(y) \quad \forall x, y \in \mathfrak{g}, \lambda, \mu \in \mathbb{C}.$$

Нетрудно проверить, что сопряжение является антиинволюцией.

*Вещественные формы алгебры Ли – неподвижные точки антиинволюций.* Действительно, если  $\mathfrak{a}$  – вещественная форма, то множество  $\{\mathfrak{g} \mid \sigma(\mathfrak{g}) = \mathfrak{g}\}$  есть алгебра  $\mathfrak{a}$ :

$$x + iy = \sigma(x + iy) = x - iy; \quad y = 0, x \in \mathfrak{a}.$$

С другой стороны, пусть  $\sigma$  – антиинволюция,

$$\mathfrak{g} = P_+(\mathfrak{g}) \oplus P_-(\mathfrak{g}),$$

где  $P_{\pm} = \frac{1 \pm \sigma}{2}$ ;  $P^2 = P$ ;  $P_+(\mathfrak{g})$  – множество неподвижных точек  $\sigma$ .

*Две вещественные формы переводятся друг в друга автоморфизмом тогда и только тогда, когда соответствующие антиинволюции сопряжены.* Действительно, если  $\sigma$  – антиинволюция,  $\varphi$  – автоморфизм  $\mathfrak{g}$ , то  $\bar{\sigma} = \varphi\sigma\varphi^{-1}$  – тоже антиинволюция, причем если  $\sigma(\mathfrak{a}) = \mathfrak{a}$ , то  $\bar{\sigma}(\varphi(\mathfrak{a})) = \varphi(\mathfrak{a})$ .

Таким образом, чтобы классифицировать вещественные формы абстрактной алгебры Ли, нужно классифицировать с точностью до группы автоморфизмов все антиинволюции.

Пусть  $V = \bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g} - \mathfrak{g}$ -модуль, соответствующий изотропному представлению. Пространство  $B(V)$  билинейных форм на  $V$  естественным образом становится  $\mathfrak{g}$ -модулем, если положить

$$(x.b)(v_1, v_2) = -b(x.v_1, v_2) - b(v_1, x.v_2),$$

где  $x \in \mathfrak{g}$ ,  $v_1, v_2 \in V$ ,  $b \in B(V)$ . *Почти симплектической структурой на  $\mathfrak{g}$ -модуле  $V$*  называется невырожденная, кососимметрическая билинейная форма  $b \in B(V)$  такая, что  $x.b = 0$  для всех  $x \in \mathfrak{g}$ . Другими словами,  $b \in B(V)$ .<sup>9</sup> Множество всех эндоморфизмов пространства  $V$ , сохраняющих невырожденную кососимметрическую билинейную форму  $b$ , является алгеброй Ли, которая обозначается  $\mathfrak{sp}(4, \mathbb{R})$ .

Возникает вопрос: как связаны между собой классификации подалгебр в  $\mathfrak{sp}(4, \mathbb{R})$  и в  $\mathfrak{sp}(4, \mathbb{C})$ , т. е. в вещественном и комплексном случаях. Можно классифицировать подалгебры над полем  $\mathbb{R}$ , используя классификацию над полем  $\mathbb{C}$ . Этот способ основан на понятии вещественных форм линейных алгебр Ли. Основная идея – нахождение всех вещественных форм для комплексной линейной алгебры Ли. Выше определены основные понятия для абстрактного случая. Рассмотрим теперь случай линейных алгебр Ли.

Пусть  $\mathfrak{g} \subset \mathfrak{gl}(V)$  – вещественная линейная алгебра Ли,  $V$  – вещественное векторное пространство. Тогда алгебра Ли  $\mathfrak{g}^{\mathbb{C}} = \mathfrak{g} \otimes_{\mathbb{R}} \mathbb{C}$  может быть естественным образом рассмотрена как алгебра Ли эндоморфизмов комплексного векторного пространства  $V^{\mathbb{C}} = V \otimes_{\mathbb{R}} \mathbb{C}$ :

$$(x \otimes \alpha).(v \otimes \beta) = (x.v) \otimes (\alpha\beta),$$

$x \in \mathfrak{g}$ ,  $v \in V$ ,  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ . Полученную линейную алгебру  $\mathfrak{g}^{\mathbb{C}} \subset \mathfrak{gl}(V^{\mathbb{C}})$  будем называть *комплексификацией линейной алгебры Ли  $\mathfrak{g} \subset \mathfrak{gl}(V)$* .

Опишем конструкцию, обратную данной. Пусть  $\mathfrak{h} \subset \mathfrak{gl}(W)$  – комплексная линейная алгебра Ли;  $W$  – комплексное векторное пространство. *Вещественной формой линейной алгебры Ли  $\mathfrak{h} \subset \mathfrak{gl}(W)$*  называется пара  $(\mathfrak{g}, V)$ , где  $\mathfrak{g}$  – вещественная форма алгебры Ли  $\mathfrak{h}$ ;  $V$  – вещественная форма пространства  $W$ , причем  $\mathfrak{g}(V) \subset V$ . В этом случае  $\mathfrak{g}$  может быть рассмотрена как подалгебра алгебры Ли  $\mathfrak{gl}(V)$ , т. е. как вещественная линейная алгебра Ли, действующая на вещественном векторном пространстве  $V$  (действительно, если  $x.V = \{0\}$

для некоторого  $x \in \mathfrak{g}$ , то  $x.(iV) = i(x.V) = \{0\}$ . Следовательно,  $x.W = \{0\}$  и  $x = 0$ .

Множество всех вещественных форм линейной алгебры Ли  $\mathfrak{h} \subset \mathfrak{gl}(W)$  находится во взаимно однозначном соответствии с множеством таких антиинволюций  $\sigma$  пространства  $W$ , что  $\sigma \circ \mathfrak{h} \circ \sigma = \mathfrak{h}$ . Действительно, пусть  $\sigma$  – такая антиинволюция пространства  $W$ , что  $\sigma \circ \mathfrak{h} \circ \sigma = \mathfrak{h}$  и  $\tilde{\sigma} : \mathfrak{h} \rightarrow \mathfrak{h}$  – антиинволюция алгебры Ли  $\mathfrak{h}$ , определенная как  $\tilde{\sigma}(y) = \sigma \circ y \circ \sigma$ . Тогда, как нетрудно проверить, пара  $(\mathfrak{h}^{\tilde{\sigma}}, W^{\sigma})$  является вещественной формой линейной алгебры Ли  $\mathfrak{h} \subset \mathfrak{gl}(W)$  и  $\sigma$  – антиинволюция пространства  $W$ , соответствующая вещественной форме  $V$ :

$$\sigma : v_1 + iv_2 \mapsto v_1 - iv_2; \quad v_1, v_2 \in V.$$

Для любого элемента  $y \in \mathfrak{h}$ , однозначно предствимого в виде  $y = x_1 + ix_2$ ,  $x_1, x_2 \in \mathfrak{g}$ , имеем:

$$\begin{aligned} \sigma \circ (x_1 + ix_2) \circ \sigma.(v_1 + iv_2) &= \sigma \circ (x_1 + ix_2).(v_1 - iv_2) = \\ &= \sigma((x_1.v_1 + x_2.v_2) - i(x_1.v_2 - x_2.v_1)) = \\ &= (x_1.v_1 + x_2.v_2) + i(x_1.v_2 - x_2.v_1) = \\ &= (x_1 - ix_2).(v_1 + iv_2), \end{aligned}$$

для всех  $v_1, v_2 \in V$ . Т. е.  $\sigma \circ (x_1 + ix_2) \circ \sigma = x_1 - ix_2$ , и отображение  $\tilde{\sigma} : y \mapsto \sigma \circ y \circ \sigma$ ,  $y \in \mathfrak{h}$  является антиинволюцией алгебры Ли  $\mathfrak{h}$ , соответствующей вещественной форме  $\mathfrak{g}$ .

Для ссылки на подалгебры, полученные в работе [4], будем использовать обозначение d.n, где d – размерность подалгебры, а n – ее порядковый номер. Будем говорить, что пара  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$  имеет тип (d.n), если изотропное представление пары сопряжено подалгебре  $\mathfrak{g}$ , номер которой (d.n). На пары, приведенные в статье [5], будем ссылаться через d.n.m, где m – порядковый номер пары типа (d.n).

В качестве примера классификации пар с заданным изотропным представлением рассмотрим пары  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$  типа 2.9, т. е. имеющие подалгебру  $\mathfrak{g}$  следующего вида:

$$\begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y \end{pmatrix}.$$

**Теорема 1.** Любая вещественная форма линейной алгебры Ли 2.9 сопряжена одной и только одной из следующих линейных алгебр Ли:

$$1. \begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y \end{pmatrix}, \quad 2. \begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y \\ 0 & 0 & -x & 0 \\ 0 & y & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$3. \begin{pmatrix} 0 & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y \\ x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & y & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad 4. \begin{pmatrix} x & -y & 0 & 0 \\ y & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -x & -y \\ 0 & 0 & y & -x \end{pmatrix}.$$

*Доказательство.* Справедливость утверждения будет следовать из классификации пар, но можно провести и независимое доказательство. Каждая антиинволюция  $\sigma$  векторного пространства  $\mathbb{C}^4$  порождается матрицей  $A$ :

$$\sigma_A : v \mapsto A\bar{v}, \quad A\bar{A} = E.$$

Из этого следует, что  $\tilde{\sigma}_A : \mathfrak{gl}(4, \mathbb{C}) \rightarrow \mathfrak{gl}(4, \mathbb{C})$ ,  $X \mapsto A\bar{X}A$ ,  $A\bar{A} = E$ .

Требование  $\tilde{\sigma}_A(\mathfrak{g}) = \mathfrak{g}$  дает ограничение на вид матрицы  $A$ :

$$A \in \left\{ \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^i \times \right. \\ \left. \times \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^j \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^k \right\} \\ abcd \neq 0, i, j, k \in \{0, 1\}, A\bar{A} = E$$

Классифицируем все такие  $A$  (соответственно  $\sigma_A$ ) с точностью до группы автоморфизмов. Если  $f.\sigma = f \circ \sigma \circ f^{-1}$ ,  $f \in A(\mathfrak{g})$ , то  $f.\sigma$  и  $\sigma$  сопряжены. В матрицах это имеет вид:  $A \mapsto FAF^{-1}$ . Условие  $f \in A(\mathfrak{g})$  в нашем случае дает

$$f \in \left\{ \begin{pmatrix} p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^i \times \right. \\ \left. \times \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^j \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^k \right\} \\ abcd \neq 0, i, j, k \in \{0, 1\}$$

Рассмотрим случаи, не сопряженные относительно  $A(\mathfrak{g})$ :

- 1)  $i = j = k = 0$ ;
- 2)  $i = 1, j = k = 0$  (или  $k = 1 = i = j$ , сопряжены относительно  $A(\mathfrak{g})$ );

3)  $j = 1, i = k = 0$  (или  $k = 1, i = j = 0$ , сопряжены относительно  $A(\mathfrak{g})$ );

4)  $j = k = 1, i = 0$ .

Если  $i = k = 1, j = 0$  или  $i = j = 1, k = 0$ , то  $A\bar{A} \neq E$ .

1) Тогда  $a\bar{a} = 1, b\bar{b} = 1, c\bar{c} = 1, d\bar{d} = 1$ . Автоморфизм переводит

$$a \mapsto pa\bar{p}^{-1}, b \mapsto qb\bar{q}^{-1}, c \mapsto rc\bar{r}^{-1}, d \mapsto sd\bar{s}^{-1}.$$

$F$  можно выбрать так, чтобы  $pa\bar{p}^{-1}, qb\bar{q}^{-1}, rc\bar{r}^{-1}, sd\bar{s}^{-1}$  стали единицами. Следовательно,  $A = E$  и  $V^{\sigma A} = \langle e_1, e_2, e_3, e_4 \rangle$ ,

$$\mathfrak{g}^{\sigma A} = \left\{ \begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y \end{pmatrix} \mid x, y \in \mathbb{R} \right\}.$$

2)  $a\bar{b} = 1, c\bar{d} = 1$ .

$$\begin{pmatrix} 0 & a & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & d & 0 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} 0 & a & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & d & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{p}^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{q}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{r}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{s}^{-1} \end{pmatrix}.$$

$$a \mapsto pa\bar{q}^{-1}, c \mapsto rc\bar{s}^{-1}.$$

$F$  можно выбрать так, чтобы

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ t \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \bar{y} \\ \bar{x} \\ \bar{t} \\ \bar{z} \end{pmatrix}$$

и  $V^{\sigma A} = \langle e_1 + e_2, ie_1 - ie_2, e_3 + e_4, ie_3 - ie_4 \rangle$ ,

$$\begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \bar{y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\bar{y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\bar{x} \end{pmatrix}.$$

$$X_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, X_2 = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{pmatrix},$$

$$\mathfrak{g}^{\sigma A} = \left\{ \begin{pmatrix} x & -y & 0 & 0 \\ y & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -x & y \\ 0 & 0 & -y & -x \end{pmatrix} \mid x, y \in \mathbb{R} \right\}.$$

Аналогично получаем

$$3) \mathfrak{g}^{\sigma A} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & -x & 0 \\ 0 & y & 0 & 0 \\ x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y \end{pmatrix} \mid x, y \in \mathbb{R} \right\};$$

$$4) \mathfrak{g}^{\sigma A} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y \\ x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & y & 0 & 0 \end{pmatrix} \mid x, y \in \mathbb{R} \right\}.$$

Теперь остановимся подробнее на классификации пар. Рассмотрим пару  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ . Пара  $(\bar{\mathfrak{g}}^{\mathbb{C}}, \mathfrak{g}^{\mathbb{C}})$  называется *комплексификацией пары*  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ ; пара  $(\bar{\mathfrak{a}}, \mathfrak{a})$  называется *вещественной формой пары*  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ , если  $\bar{\mathfrak{a}}$  – вещественная форма алгебры  $\bar{\mathfrak{g}}$ , а  $\mathfrak{a}$  – вещественная форма подалгебры  $\mathfrak{g}$ .

Множество всех вещественных форм пары  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$  находится во взаимно однозначном соответствии с множеством таких антиинволюций  $\sigma$  алгебры  $\bar{\mathfrak{g}}$ , что  $\sigma(\mathfrak{g}) = \mathfrak{g}$ .

С учетом вышеизложенного, решение проблемы классификации четырехмерных изотропно-точных однородных пространств с инвариантной невырожденной почти симплектической структурой разобьем на следующие части.

1. Классификация с точностью до сопряженности всех подалгебр  $\mathfrak{g}^{\mathbb{C}}$ , удовлетворяющих (1), что равносильно классификации (с точностью до сопряженности) подалгебр алгебры Ли  $\mathfrak{sp}(4, \mathbb{C})$ . Это проделано в работе [4].

2. Для каждой подалгебры  $\mathfrak{g}$  из пункта 1 производим классификацию (с точностью до эквивалентности) изотропно-точных пар  $(\bar{\mathfrak{g}}^{\mathbb{C}}, \mathfrak{g}^{\mathbb{C}})$ , у которых изотропное представление сопряжено подалгебре  $\mathfrak{g}^{\mathbb{C}}$ . Подробнее с этим пунктом можно ознакомиться в работе [5].

3. Для каждой пары  $(\bar{\mathfrak{g}}^{\mathbb{C}}, \mathfrak{g}^{\mathbb{C}})$  находим (с точностью до эквивалентности пар) все вещественные формы  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ .

Таким образом, остановимся подробнее на п. 3 и получим классификацию в вещественном случае. Ограничимся случаем, когда множество нильпотентных элементов алгебры  $\rho(\mathfrak{g})$  отлично от  $\rho(\mathfrak{g})$ .

Пусть  $E = \{e_1, \dots, e_n\}$  – базис алгебры Ли  $\mathfrak{g}$  ( $n = \dim \mathfrak{g}$ ) и  $\{u_1, u_2, u_3, u_4\}$  – базис векторного пространства, дополнительного к  $\mathfrak{g}$  в  $\bar{\mathfrak{g}}$ . Рассмотрим, например, пару 2.9.2, имеющую следующий вид:

2.9.2	$e_1$	$e_2$	$u_1$	$u_2$	$u_3$	$u_4$
$e_1$	0	0	$u_1$	0	$-u_3$	0
$e_2$	0	0	0	$u_2$	0	$-u_4$
$u_1$	$-u_1$	0	0	0	$e_1$	0
$u_2$	0	$-u_2$	0	0	0	0
$u_3$	$u_3$	0	$-e_1$	0	0	0
$u_4$	0	$u_4$	0	0	0	0

**Теорема.** Любая вещественная форма пары 2.9.2 (над полем  $\mathbb{C}$ ) эквивалентна одной и только одной из пар 2.9.5–2.9.10, где

2.9.5	$e_1$	$e_2$	$u_1$	$u_2$	$u_3$	$u_4$
$e_1$	0	0	$u_1$	0	$-u_3$	0
$e_2$	0	0	0	$u_2$	0	$-u_4$
$u_1$	$-u_1$	0	0	0	$e_1$	0
$u_2$	0	$-u_2$	0	0	0	0
$u_3$	$u_3$	0	$-e_1$	0	0	0
$u_4$	0	$u_4$	0	0	0	0

2.9.6	$e_1$	$e_2$	$u_1$	$u_2$	$u_3$	$u_4$
$e_1$	0	0	$u_1$	0	$-u_3$	0
$e_2$	0	0	0	$u_4$	0	$-u_2$
$u_1$	$-u_1$	0	0	0	$e_1$	0
$u_2$	0	$-u_4$	0	0	0	0
$u_3$	$u_3$	0	$-e_1$	0	0	0
$u_4$	0	$u_2$	0	0	0	0

2.9.7	$e_1$	$e_2$	$u_1$	$u_2$	$u_3$	$u_4$
$e_1$	0	0	$u_3$	0	$-u_1$	0
$e_2$	0	0	0	$u_2$	0	$-u_4$
$u_1$	$-u_3$	0	0	0	$2 e_1$	0
$u_2$	0	$-u_2$	0	0	0	0
$u_3$	$u_1$	0	$-2 e_1$	0	0	0
$u_4$	0	$u_4$	0	0	0	0

2.9.8	$e_1$	$e_2$	$u_1$	$u_2$	$u_3$	$u_4$
$e_1$	0	0	$u_3$	0	$-u_1$	0
$e_2$	0	0	0	$u_2$	0	$-u_4$
$u_1$	$-u_3$	0	0	0	$-2 e_1$	0
$u_2$	0	$-u_2$	0	0	0	0
$u_3$	$u_1$	0	$2 e_1$	0	0	0
$u_4$	0	$u_4$	0	0	0	0

2.9.9	$e_1$	$e_2$	$u_1$	$u_2$	$u_3$	$u_4$
$e_1$	0	0	$u_3$	0	$-u_1$	0
$e_2$	0	0	0	$u_4$	0	$-u_2$
$u_1$	$-u_3$	0	0	0	$2 e_1$	0
$u_2$	0	$-u_4$	0	0	0	0
$u_3$	$u_1$	0	$-2 e_1$	0	0	0
$u_4$	0	$u_2$	0	0	0	0

2.9.10	$e_1$	$e_2$	$u_1$	$u_2$	$u_3$	$u_4$
$e_1$	0	0	$u_3$	0	$-u_1$	0
$e_2$	0	0	0	$u_4$	0	$-u_2$
$u_1$	$-u_3$	0	0	0	$-2 e_1$	0
$u_2$	0	$-u_4$	0	0	0	0
$u_3$	$u_1$	0	$2 e_1$	0	0	0
$u_4$	0	$u_2$	0	0	0	0

*Доказательство.* Множество автоморфизмов пары 2.9.2 имеет вид:

$$A = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\},$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix},$$

$$\left. \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{a} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\} a, b, c \in \mathbb{C}^*.$$

Классифицируем антиинволюции с точностью до группы автоморфизмов. В матричной форме это обозначает следующее: антиинволюции  $I, \tilde{I} \in \mathcal{I}$  сопряжены тогда и только тогда, когда существует  $A \in \mathcal{A}$  такая, что  $\tilde{I} = \overline{AIA}^{-1}$ . Отсюда получаем, что любая антиинволюция пары сопряжена одной и только одной из следующих антиинволюций:

$$I_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$I_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$I_{3,4} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$I_{5,6} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Для  $I_1$  очевидно, что таблица умножения вещественной формы имеет вид 2.9.5.

Найдем множество неподвижных точек отображения  $I_2$ . Пусть  $X = (a, b, x, y, z, t)$ ,  $I_2(X) = (\bar{a}, -\bar{b}, \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \bar{t})$ ,  $I_2(X) = X$ . Следовательно, получим  $X = (a, b, x, y, z, \bar{y})$ , где  $y \in \mathbb{C}$ ,  $b \in \mathbb{R}i$ ,  $a, x, z \in \mathbb{R}$ . Выберем базис множества неподвижных точек:

$$e_1' = e_1; e_2' = ie_2; u_1' = u_1; u_2' = u_2 + u_4; \\ u_3' = u_3; u_4' = iu_2 - iu_4.$$

В этом базисе таблица умножения вещественной формы, соответствующей антиинволюции  $I_2$ , имеет вид 2.9.8.

Найдем множество неподвижных точек  $I_3$ . Пусть  $I_3(X) = (-\bar{a}, \bar{b}, -\bar{z}, \bar{y}, -\bar{x}, \bar{t})$ , откуда следует:  $X = (a, b, x, y, -\bar{x}, t)$ ,  $x \in \mathbb{C}$ ,  $a \in \mathbb{R}i$ ,  $b, y, t \in \mathbb{R}$ . Базис множества неподвижных точек:

$$e_1' = ie_1; e_2' = e_2; u_1' = u_1 - u_3; u_2' = u_2; \\ u_3' = i(u_1 + u_3); u_4' = u_4.$$

В этом базисе таблица умножения вещественной формы, соответствующей  $I_3$ , имеет вид 2.9.7.

Аналогично для отображения  $I_4$ :  $I_4(X) = (-\bar{a}, \bar{b}, \bar{z}, \bar{y}, \bar{x}, \bar{t})$ , тогда  $X = (a, b, x, y, \bar{x}, t)$ , где  $x \in \mathbb{C}$ ,  $a \in \mathbb{R}i$ ,  $b, y, t \in \mathbb{R}$ . Базис множества неподвижных точек:

$$e_1' = ie_1; e_2' = e_2; u_1' = u_1 + u_3; u_2' = u_2; \\ u_3' = i(u_1 - u_3); u_4' = u_4,$$

таблица умножения вещественной формы, которая соответствует антиинволюции  $I_4$ , имеет вид 2.9.6.

Найдем множество неподвижных точек  $I_5$ :  $I_5(X) = (-\bar{a}, -\bar{b}, -\bar{z}, \bar{t}, -\bar{x}, \bar{y})$ , откуда следует:  $X = (a, b, x, y, -\bar{x}, \bar{y})$ ,  $x, y \in \mathbb{C}$ ,  $a, b \in \mathbb{R}i$ . Базис множества неподвижных точек:

$$e_1' = ie_1; e_2' = ie_2; u_1' = u_1 - u_3; u_2' = u_2 + u_4; \\ u_3' = iu_1 + iu_3; u_4' = iu_2 - iu_4,$$

таблица умножения вещественной формы, соответствующей  $I_5$ , имеет вид 2.9.10. Аналогично для  $I_6$ :  $I_6(X) = (-\bar{a}, -\bar{b}, \bar{z}, \bar{t}, \bar{x}, \bar{y})$ , следовательно,  $X = (a, b, x, y, \bar{x}, \bar{y})$ , где  $x, y \in \mathbb{C}$ ,  $a, b \in \mathbb{R}i$ . Базис:

$$e_1' = ie_1; e_2' = ie_2; u_1' = u_1 + u_3; u_2' = u_2 + u_4; \\ u_3' = iu_1 - iu_3; u_4' = iu_2 - iu_4,$$

таблица умножения вещественной формы, соответствующей  $I_6$ , имеет вид 2.9.9.

Применяя аналогичные рассуждения для всех остальных случаев, получаем искомый результат классификации пар над полем  $\mathbb{R}$ .

**Заключение.** Приведен алгоритм классификации изотропно-точных однородных пространств с инвариантной невырожденной почти симплектической структурой. Описано нахождение вещественных форм как подалгебр линейных алгебр Ли, так и изотропно-точных пар и проведено в явном виде описание четырехмерных изотропно-точных почти симплектических однородных пространств в вещественном случае. Алгоритмы, приведенные в работе, могут быть компьютеризованы и использованы для решения аналогичных задач в больших размерностях, а полученные в работе результаты могут найти приложения в различных отраслях математики и физики.

### Список литературы

1. Lichnerowicz A. Les variétés de Poisson et leurs algèbres de Lie associées // *J. Differential Geometry*. 1977. No. 2. P. 253–300.
2. Кириллов А. А. Локальные алгебры Ли // *Успехи мат. наук*. 1976, № 4 (190). С. 57–76.
3. Weinstein A. The local structure of Poisson manifolds // *J. Differential Geom.* 1983. № 3. P. 523–557.
4. Можей Н. П. Почти симплектические однородные пространства // *Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика*. 2009. Вып. XVII. С. 17–20.
5. Можей Н. П. Четырехмерные однородные пространства с почти симплектической структурой. Комплексный случай // *Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика*. 2021. № 1 (242). С. 8–13.

### References

1. Lichnerowicz A. Les variétés de Poisson et leurs algèbres de Lie associées. *J. Differential Geometry*, 1977, no. 2, pp. 253–300.
2. Kirillov A. A. Local Lie algebras. *Uspekhi mat. nauk* [Success math. sciences], 1976, no. 4 (190), pp. 57–76 (In Russian).
3. Weinstein A. The local structure of Poisson manifolds. *J. Differential Geometry*, 1983, no. 3, pp. 523–557.

4. Mozhey N. P. Almost simplectic homogeneous spaces. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physics and Mathematics. Informatics, 2009, issue XVII, pp. 17–20 (In Russian).

5. Mozhey N. P. Four-dimensional homogeneous spaces with almost symplectic structure. The complex case. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physic and Mathematic. Informatics, 2021, no. 1 (242), pp. 8–13 (In Russian).

#### **Информация об авторе**

**Можей Наталья Павловна** – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры программного обеспечения 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, the Department of Software for Information Technologies. Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovki str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mozheynatalya@mail.ru

*Поступила после доработки 29.03.2021*

# МЕХАНИКА MECHANICS

---

УДК 531.19

**Я. Г. Грода, Н. Г. Грода, Р. Н. Ласовский, Э. Э. Бильданов, Д. В. Гапанюк**  
Белорусский государственный технологический университет

## **КИНЕТИЧЕСКАЯ ДИФФУЗИЯ В РЕШЕТОЧНОМ ФЛЮИДЕ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ НА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ**

Изучены транспортные свойства решеточного флюида с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей в простой кубической решеточной системе. Выполнено компьютерное моделирование по методу Монте-Карло диффузионного процесса в указанной системе. Определены коэффициенты кинетической диффузии и самодиффузии. Исследована зависимость от концентрации и температуры кинетического коэффициента диффузии. Определена энергия активации кинетической диффузии. Показана возможность приближенного определения кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида с конкурирующими взаимодействиями на пространственной решетке с помощью соотношения Жданова на основе информации о равновесных свойствах системы и коэффициенте диффузии лэнгмюровского решеточного газа.

**Ключевые слова:** решеточный флюид, кубическая решетка, SALR-потенциал, алгоритм Монте-Карло, формула Жданова, коэффициент диффузии, энергия активации.

**Для цитирования:** Грода Я. Г., Грода Н. Г., Ласовский Р. Н., Бильданов Э. Э., Гапанюк Д. В. Кинетическая диффузия в решеточном флюиде с конкурирующими взаимодействиями на простой кубической решетке // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 22–27.

**Ya. G. Groda, N. G. Groda, R. N. Lasovsky, E. E. Bildanau, D. V. Gapanjuk**  
Belarusian State Technological University

## **JUMP DIFFUSION IN THE LATTICE FLUID WITH COMPETING INTERACTIONS ON A SIMPLE CUBIC LATTICE**

The transport properties of the lattice fluid with the attraction of the nearest neighbors and the repulsion of the third neighbors in the simple cubic lattice system have been studied. Computer simulation by the Monte Carlo method of the diffusion process in a such system has been carried out. The jump and tracer diffusion coefficients are determined. The concentration and temperature dependence of the jump diffusion coefficient has been investigated. The activation energy of the jump diffusion is determined. The possibility of approximate determination of the jump diffusion coefficient of the lattice fluid with competing interactions on a three-dimensional lattice using the Zhdanov's relation based on information on the equilibrium properties of the system and the diffusion coefficient of a Langmuir lattice gas is shown.

**Key words:** lattice fluid, simple cubic lattice, SALR potential, Monte Carlo algorithm, Zhdanov's expression, diffusion coefficient, activation energy.

**For citation:** Groda Ya. G., Groda N. G., Lasovsky R. N., Bildanau E. E., Gapanjuk D. V. Jump diffusion in the lattice fluid with competing interactions on a simple cubic lattice. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 22–27 (In Russian).

**Введение.** В настоящее время наблюдается большой интерес к изучению так называемых SALR-систем (short-range attractive and long-range repulsive) [1, 2]. Характерная особенность таких систем состоит в том, что их структурные элементы притягиваются друг к другу на близком расстоянии за счет, например, сил притяжения

Ван-дер-Ваальса, а на более далеком происходит электростатическое отталкивание. Притяжение между структурными элементами системы обеспечивает разделение фаз, а отталкивание – формирование кластеров в ней.

Одним из наиболее простых методов исследования общих свойств SALR-систем является

рассмотрение их решеточных моделей, которые, с одной стороны, достаточно просты, что позволяет провести их детальное исследование как аналитическими методами, так и в рамках компьютерного моделирования по методу Монте-Карло, а с другой стороны, в их рамках можно получить описание большого числа общих свойств систем с кон-курирующими взаимодействиями.

Диффузия является одним из важнейших механизмов массопереноса в твердых телах и на их поверхностях. Во многих случаях электропроводность также может быть изучена на основе представлений о диффузии заряженных частиц [3, 4]. Таким образом, коэффициенты диффузии являются одними из наиболее важных неравновесных характеристик систем.

В данной работе исследуются транспортные свойства решеточного флюида с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке.

**Алгоритм моделирования.** Рассматриваемая в работе модель представляет собой решеточный флюид из  $n$  частиц на простой кубической 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  $J_1 < 0, J_3 > 0$ ,

$$J_1 = -J; \quad J_3 = J^* J; \quad J > 0, \quad (1)$$

что соответствует притяжению ближайших соседей и отталкиванию третьих. Ниже, по аналогии с работой [5], будет рассмотрена система с  $J^* = 3$ .

Первоначально рассматривается произвольное распределение некоторого числа частиц по решетке, содержащей  $N = L^d$  узлов ( $L$  – линейный размер решетки,  $d$  – размерность пространства,  $d = 3$  в случае простой кубической решетки). При процедуре моделирования случайным образом выбирается узел  $i$ , занятый частицей. После этого также случайно определяется направление возможного прыжка частицы в один из ближайших узлов  $j$ . Если второй выбранный узел занят частицей, то переход частицы в него, очевидно, невозможен. Однако попытка такого перехода учитывается. Если же он свободен, то переход частицы в него осуществляется с вероятностью

$$P_{ij} = P_0^{-1} \exp(\beta J [3s_3 - s_1]), \quad (2)$$

где  $P_0$  – нормировочный коэффициент, смысл которого состоит в том, что вероятность для наиболее энергетически выгодного перехода частицы принимается равной 1:

$$P_0 = \exp(-\beta z_3 J_3), \quad (3)$$

$\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура;  $s_1$  и  $s_3$  – число ближайших соседей и соседей третьего порядка для частицы, находящейся

в начальном узле соответственно;  $z_3$  – число узлов-соседей третьего порядка.

Вычисленная в соответствии с соотношением (2) вероятность  $P_{ij}$  сопоставлялась со случайным числом  $P_r$  из диапазона  $[0; 1]$ . При этом если  $P_r \leq P_{ij}$ , то переход считается произошедшим. В противном случае изменения состояния моделируемой системы не происходит. Повторение данной процедуры  $n$  раз формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

Моделируемая решетка содержит 1728 ( $12^3$ ) решеточных узлов. Для устранения влияния размеров моделируемой системы на получаемые результаты используются периодические граничные условия.

Как и в случае плоских систем [6], величинами, непосредственно определяемыми в процессе моделирования, являются зависимости от времени среднего квадрата смещения центра масс системы частиц и среднего квадрата смещения отдельной частицы.

В модели решеточного флюида при пренебрежении влияния эффектов памяти для оценки кинетического коэффициента диффузии может быть использовано соотношение Жданова [7].

$$D_J = D_0 \frac{\exp[\beta \mu]}{c} F(0; 0), \quad (4)$$

где  $D_0$  – коэффициент диффузии невзаимодействующего (ленгмюровского) решеточного газа;  $\mu$ ,  $c$  и  $F(0; 0)$  – равновесные значения химического потенциала, концентрации частиц и вероятности двум ближайшим решеточным узлам быть вакантными соответственно.

Коэффициент диффузии ленгмюровского решеточного газа не зависит от концентрации частиц и определяется простым соотношением:

$$D_0 = \frac{z_1 w a^2}{2d}, \quad (5)$$

где  $z_1$  – число ближайших соседних узлов ( $z_1 = 6$  для простой кубической решетки);  $w$  – вероятность прыжка частицы в свободный соседний узел;  $a$  – расстояние между узлами решетки (длина прыжка частицы).

Входящие в соотношение (4) равновесные характеристики модели определялись в рамках квазихимического приближения (КХП), в котором свободная энергия системы может быть записана в виде [5, 6, 8]:

$$F(c, \delta c) = \frac{k_B T}{2} \sum_{i=0}^1 c_i \left( \ln(c_i^2 - \delta c^2) - 2z_1 \ln X_i \right) - \frac{k_B T}{2} z_3 \left( \ln Z_0^p Z_0^v + c \ln \xi_v \xi_p \right) + \frac{k_B T}{2} \delta c \left( \sum_{i=0}^1 \ln \frac{c_i + \delta c}{c_i - \delta c} - z_3 \ln \frac{\xi_p}{\xi_v} \right), \quad (6)$$

где  $c_1$ ,  $c_0$  и  $\delta c$  – концентрации частиц, вакансий и параметр порядка системы соответственно,

$$c = c_1; \quad c_0 = 1 - c; \quad (7)$$

$$W = \exp\left(-\frac{J_1}{k_B T}\right); \quad \Omega = \exp\left(-\frac{J_3}{k_B T}\right); \quad (8)$$

$$\eta = -\frac{c_1 - c_0}{2c_0} + \sqrt{\left(\frac{c_1 - c_0}{2c_0}\right)^2 + \frac{c_1}{c_0} W}; \quad (9)$$

$$X_0 = \sqrt{c_0 + \frac{c_1}{\eta}}; \quad X_1 = \eta X_0; \quad (10)$$

$$\xi_{p(v)} = -\frac{c_1 - c_0 \pm 2\Omega\delta c}{2(c_0 \mp \delta c)} + \sqrt{\left(\frac{c_1 - c_0 \pm 2\Omega\delta c}{2(c_0 \mp \delta c)}\right)^2 + \frac{c_1 \pm \delta c}{c_0 \mp \delta c} \Omega}. \quad (11)$$

$$Z_0^v Z_0^p = c_0 \mp \delta c + \frac{c_1 \pm \delta c}{\xi_{p(v)}}. \quad (12)$$

Параметр порядка  $\delta c$ , определяющий подрешеточную структуру модели при низких температурах [8], может быть найден из условия экстремальности свободной энергии:

$$\frac{\partial F}{\partial \delta c} = 0, \quad (13)$$

которое эквивалентно условию равенства химических потенциалов на подрешетках. В свою очередь химический потенциал решеточного флюида и вероятность ближайшим решеточным узлам быть вакантными определяются как

$$\beta\mu = \left(\frac{\partial(\beta F)}{\partial c}\right)_T; \quad (14)$$

$$F(0;0) = 1 - 2c + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial F}{\partial J_1}\right)_T. \quad (15)$$

**Результаты моделирования.** Проведенное моделирование показало, что зависимости от времени, измеренного в шагах МК-алгоритма, среднего квадрата смещения центра масс системы частиц и среднего квадрата смещения отдельной частицы являются с высокой степенью точности линейными. Соответственно, их аппроксимация аналитической линейной функцией позволяет определить кинетический коэффициент диффузии  $D_J$  и коэффициент самодиффузии  $D_{rr}$ . Зависимость кинетического коэффициента диффузии и коэффициента самодиффузии от концентрации примесных частиц представлены на рис. 1 и 2 соответственно.

На рис. 1 также проводится сопоставление данных моделирования с результатами аналитических

оценок кинетического коэффициента диффузии в соответствии с соотношением Жданова (4) в сочетании с обобщенным квазихимическим приближением, использованным для определения равновесных характеристик системы.

Проведенное сопоставление результатов показало, что, как и в случае решеточного флюида на квадратной решетке, соотношение Жданова позволят получать адекватные оценки для кинетического коэффициента диффузии во всей области изменения термодинамических параметров за исключением области существования в системе упорядоченной фазы.

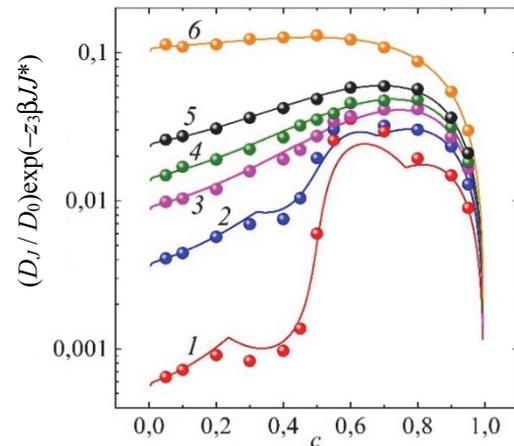


Рис. 1. Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида на простой кубической решетке при  $\beta J = 0,31$  (кривая 1); 0,2325 (2); 0,1958 (3); 0,1771 (4); 0,155 (5) и 0,093 (6).

Линиями представлены результаты аналитических расчетов, точками – данные моделирования

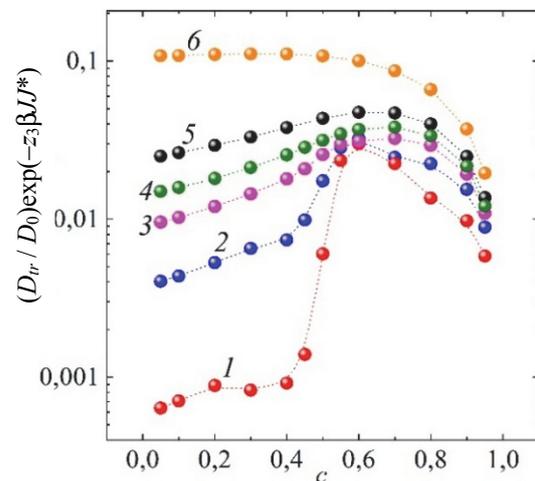


Рис. 2. Зависимость от концентрации коэффициента самодиффузии решеточного флюида на простой кубической решетке при  $\beta J = 0,31$  (кривая 1); 0,2325 (2); 0,1958 (3); 0,1771 (4); 0,155 (5) и 0,093 (6)

Также анализ полученных зависимостей выявил одну важную особенность диффузионных характеристик пространственной системы, которая отсутствует у ее двумерного аналога: при концентрациях примесных частиц, равных 0,6 и 0,7 величины коэффициентов диффузии, определенные при моделировании для температур  $0,6T_c$ ,  $0,8T_c$ ,  $0,95T_c$  и  $1,05T_c$ , являются очень близкими друг к другу. Указанное обстоятельство позволяет ожидать, что зависимость коэффициентов диффузии от обратной температуры будет отличаться от линейной.

На рис. 3 показана зависимость логарифма кинетического коэффициента диффузии от обратной температуры. В качестве примера на рисунке представлены данные, соответствующие концентрации примесных частиц, равной 0,1, 0,3, 0,5 и 0,8.

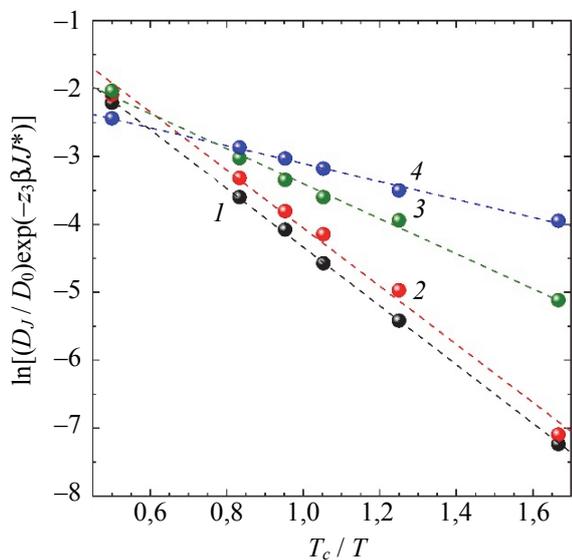


Рис. 3. Зависимость от обратной температуры кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида при  $c = 0,1$  (кривая 1); 0,3 (2); 0,5 (3) и 0,8 (4). Точками представлены результаты МК-моделирования, пунктирными линиями – результаты их линейной аппроксимации

Для всех представленных вариантов, а также для концентраций 0,05, 0,2, 0,4, 0,9 и 0,95 данная зависимость является практически строго линейной. Последнее обстоятельство позволяет легко определить энергию активации кинетической диффузии с помощью линейной аппроксимации данных моделирования. Полученная описанным образом зависимость энергии активации от концентрации примесных частиц представлена на рис. 4.

В то же время зависимость логарифма кинетического коэффициента диффузии от обратной температуры при концентрациях 0,6 и 0,7 имеет ярко выраженный нелинейный характер. Типичный вид данной зависимости представлен на рис. 5.

Полученный результат может быть интерпретирован как зависимость от температуры энергии активации, которая имеет место при указанных концентрациях примесных частиц. При этом анализ данных моделирования показывает, что при температурах, ниже критической, энергия активации становится значительно ниже, чем при высоких температурах.

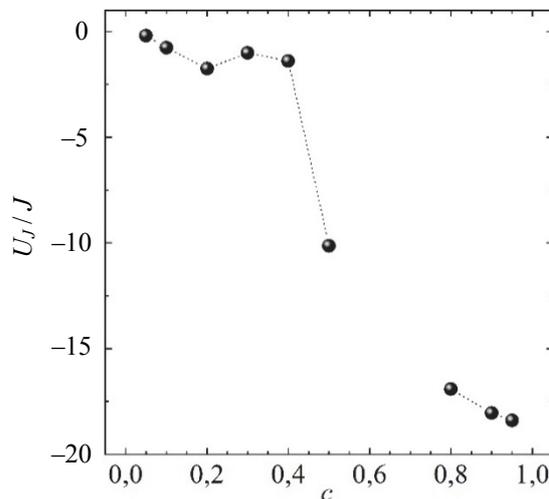


Рис. 4. Зависимость энергии активации кинетической диффузии от концентрации

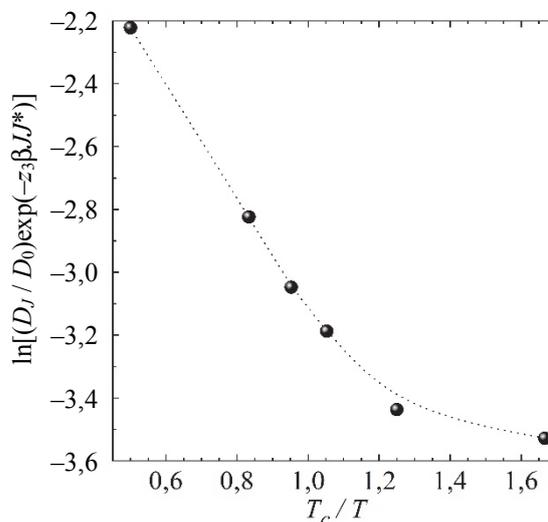


Рис. 5. Зависимость от обратной температуры кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида при  $c = 0,7$

Указанное поведение энергии активации обусловлено характером упорядоченной фазы, которая образуется в рассматриваемой решеточной системе. Как отмечалось выше, данная упорядоченная фаза представляет собой чередование заполненных и вакантных решеточных слоев.

Поскольку рассматриваемые концентрации превышают 0,5, то преимущественно заполненные

решеточные слои заняты практически полностью. В то же время между такими слоями находится заметное количество примесных частиц, которые не могут быть размещены на них. Каждая из этих частиц имеет около 8 соседей третьего порядка, находящихся выше и ниже ее. При этом взаимодействие между соседями третьего порядка имеет в рамках выбранной модели характер отталкивания, т. е. приводит к снижению энергетического барьера, который необходимо преодолеть частице для перехода в соседний узел в преимущественно вакантном слое. Это проявляется в снижении эффективной энергии активации и повышении кинетического коэффициента диффузии, которое можно видеть на рис. 1.

**Заключение.** Монте-Карло моделирование диффузионных процессов в трехмерных решеточных системах с конкурирующими взаимодей-

ствиями показывает, что транспортные свойства решеточного флюида с SALR-потенциалом межчастичного взаимодействия в целом соответствуют свойствам решеточного флюида с отталкиванием ближайших соседей. Наиболее характерной их особенностью является резкое падение как коэффициента самодиффузии, так и кинетического коэффициента диффузии при температурах ниже критической в области средних концентраций, т. е. в той области термодинамических параметров, где система находится в макроскопически упорядоченной фазе.

Описанные исследования проведены при грантовой поддержке научной программы Евросоюза HORIZON-2020 (проект AMD-734276-CONIN) и Национального агентства академических обменов Польши в рамках программы «Solidarity with scientists Initiative».

### Список литературы

1. 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.).
2. Enhanced density fluctuations in fluid systems with competing interactions / D. Pini [et al.] // *Chem. Phys. Lett.* 2000. Vol. 327. P. 209–215.
3. Ishii T. Relaxation mode theory of hopping conduction // *Prog. Theor. Phys.* 1987. Vol. 77, no. 6. P. 1364–1375.
4. Superionic liquids in conducting nanoslits: insights from theory and simulation / Ya. Groda [et al.] // *J. Phys. Chem. C*. 2021. Vol. 125. P. 4968–4976.
5. Грода Я. Г., Вихренко В. С., ди Каприо Д. Решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке // *Журнал БГУ. Физика*. 2019. № 2. С. 84–95.
6. Грода Я. Г., Ласовский Р. Н. Транспортные свойства решеточного флюида с SALR-потенциалом на плоской квадратной решетке // *Журнал БГУ. Физика*. 2021. № 1. С. 90–101.
7. Zhdanov V. P. General equation for description of surface diffusion in the framework of the lattice gas model // *Surf. sci.* 1985. Vol. 149, no. 1. P. L13–L17.
8. Groda Ya. G., Vikhrenko V. S., di Caprio D. Equilibrium properties of the lattice system with SALR interaction potential on a square lattice: quasi-chemical approximation versus Monte Carlo simulation // *Cond. Matt. Phys.* 2018. Vol. 21, no. 4, art. no. 43002 (10 p.).

### References

1. 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.)
2. Pini 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.
3. Ishii T. Relaxation mode theory of hopping conduction. *Prog. Theor. Phys.*, 1987, vol. 77, no. 6, pp. 1364–1375.
4. Groda Ya., Dudka M., Kornyshev A. A., Oshanin G., Kondrat S. Superionic liquids in conducting nanoslits: insights from theory and simulation. *J. Phys. Chem. C*, 2021, vol. 125, pp. 4968–4976.
5. Groda Ya. G., Vikhrenko V. S., di Caprio D. Lattice fluid with attractive interaction between nearest neighbors and repulsive interaction between next-next-nearest neighbors on simple cubic lattice. *Zhurnal BGU. Fizika* [Journal of the Belarusian State University. Physics], 2019, no. 2, pp. 84–95 (In Russian).
6. Groda Ya. G., Lasovsky R. N. Transport properties of lattice fluid with SALR potential on a simple square lattice. *Zhurnal BGU. Fizika* [Journal of the Belarusian State University. Physics], 2021, no. 1, pp. 90–101 (In Russian).
7. Zhdanov V. P. General equation for description of surface diffusion in the framework of the lattice gas model. *Surf. sci.*, 1985, vol. 149, no. 1, pp. L13–L17.
8. Groda Ya. G., Vikhrenko V. S., di Caprio D. Equilibrium properties of the lattice system with SALR interaction potential on a square lattice: quasi-chemical approximation versus Monte Carlo simulation. *Cond. Matt. Phys.*, 2018, vol. 21, no. 4, art. no. 43002 (10 p.).

### Информация об авторах

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

**Грода Надежда Георгиевна** – заведующая лабораторией кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gng@tut.by

**Ласовский Руслан Николаевич** – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры механики и конструирования. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: lasovsky@tut.by

**Бильданов Эльдар Эмирович** – магистр технических наук, аспирант кафедры механики и конструирования. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: eldar.bildanov@gmail.com

**Гапанюк Дмитрий Владимирович** – кандидат физико-математических наук, заместитель декана факультета химической технологии и техники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gapdm@mail.ru

### Information about the authors

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

**Groda Nadezhda Georgiyevna** – head of laboratory, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gng@tut.by

**Lasovsky Ruslan Nikolayevich** – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Mechanics and Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lasovsky@tut.by

**Bildanau Eldar Emiravich** – Master of Engineering, PhD student, the Department of Mechanics and Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: eldar.bildanov@gmail.com

**Gapanjuk Dmitry Vladimirovich** – PhD (Physics and Mathematics), Vice-dean of the Chemical Technology and Engineering Faculty. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gapdm@mail.ru

*Поступила после доработки 10.05.2021*

УДК 531.19

**Р. Н. Ласовский, Я. Г. Грода, Д. В. Гапанюк, Н. Г. Грода**  
Белорусский государственный технологический университет

### **ПРОВОДИМОСТЬ В ТРЕХМЕРНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ МОДЕЛЯХ С КОНКУРИРУЮЩИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

Рассмотрена трехмерная решеточная модель керамического ионного проводника, содержащая зерно и межзеренную прослойку, описываемую слоем с сегрегированными неподвижными ионами. Выполнено моделирование описанной системы по кинетическому методу Монте-Карло. При этом кулоновская энергия определялась суммированием Эвальда для систем со сляб геометрией. Определены зависимости числа прошедших через границу частиц, которое пропорционально величине электрического тока, от обратной температуры, имеющие типичный для твердотельных электролитов характер. Отмечено, что повышение концентрации подвижных ионов, равно как и увеличение сопротивления межзеренной границы, приводит к увеличению энергии активации, т. е. к снижению лабильности ионов.

**Ключевые слова:** ионный проводник, межзеренная граница, метод Монте-Карло, суммирование Эвальда, проводимость, распределение заряда, энергия активации.

**Для цитирования:** Ласовский Р. Н., Грода Я. Г., Гапанюк Д. В., Грода Н. Г. Проводимость в трехмерных решеточных моделях с конкурирующим взаимодействием // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 28–32.

**R. N. Lasovsky, Ya. G. Groda, D. V. Gapanjuk, N. G. Groda**  
Belarusian State Technological University

### **CONDUCTIVITY IN THREE-DIMENSIONAL LATTICE MODELS WITH COMPETITIVE INTERACTION**

A three-dimensional lattice model of a ceramic ionic conductor containing a grain and an intergranular boundary is considered. The boundary is described by a layer with segregated immobile ions. The simulation of the described system using the Monte-Carlo kinetic method was performed. The Coulomb energy was determined by the Ewald summation for systems with a slab geometry. The dependences of the particles number passing through the boundary, which is proportional to the electric current, on the reciprocal temperature are determined. These dependences are typical for solid electrolytes. It was noted that an increase in the concentration of mobile ions, as well as an increase in the resistance of the grain boundary, leads to an increase in the activation energy, i.e. to reduce the lability of ions.

**Key words:** ionic conductor, grain boundary, Monte Carlo method, Ewald's summation, conductivity, charge distribution, activation energy.

**For citation:** Lasovsky R. N., Groda Ya. G., Gapanjuk D. V., Groda N. G. Conductivity in three-dimensional lattice models with competitive interaction. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 28–32 (In Russian).

**Введение.** Одной из задач, стоящих перед человечеством, является производство энергии экономически выгодным и экологически безопасным способом. Традиционные методы производства энергии на тепловых, атомных и гидроэлектростанциях сопряжены с серьезными экологическими проблемами. К электрохимическим устройствам для накопления и преобразования энергии относятся химические батареи, аккумуляторы, топливные элементы, суперконденсаторы и т. д. В настоящее время в электрохимических системах активно используются жидкие растворы ионных солей или полимерные ионообменные мембраны, что сопряжено с опасностью появления утечек и воспламенения. Переход к электрохимическим элементам с твердотельными электролитами позволит

повысить прочность, долговечность, безопасность и экологичность источников энергии, расширить диапазон рабочих температур [1].

Среди различных электрохимических устройств литиевые системы характеризуются наиболее высокой плотностью энергии и представляют особый интерес. Базовыми компонентами литиевых твердотельных устройств служат твердые электролиты с проводимостью по ионам лития.

Одним из наиболее простых способов изучения твердотельных электролитов является их описание в рамках решеточной модели. Эта модель используется в тех случаях, когда рассматриваемая система может быть представлена двумя подсистемами: относительно жесткой несущей подсистемой, создающей потенциальный рельеф, и

подсистемой лабильных частиц. Изучению равновесных свойств и кинетики таких систем посвящено много публикаций [2–6].

В данной работе исследуется проводимость в решеточной системе с короткодействующим притяжением и дальнедействующим электростатическим отталкиванием между подвижными частицами.

**Алгоритм моделирования.** Рассматривается трехмерная решеточная модель керамического ионного проводника из  $n$  частиц, которые могут перемещаться по  $N = L_x \times L_y \times L_z$  решеточным узлам (при моделировании принималось  $30 \times 10 \times 10$ , узлы образуют простую кубическую решетку, параметр решетки  $a = 0,4$  нм). Средняя решеточная концентрация ионов  $\rho_c = n / N$ .

Проводимость поликристаллической керамики обычно намного ниже ионной проводимости монокристалла из-за наличия межзеренных границ. Для воспроизводства эффекта повышенного сопротивления межзеренной границы будем моделировать ее слоем с  $n_b$  сегрегированными неподвижными ионами концентрацией  $c_b = n_b / (L_y \times L_z)$ , которые, однако, не блокируют решеточные узлы (рис. 1).

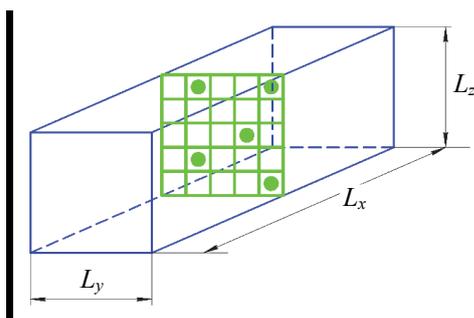


Рис. 1. Модель межзеренной границы

Для моделирования случайным образом выбирается узел  $j$ , занятый частицей. После этого также случайно определяется направление возможного прыжка частицы в один из ближайших узлов  $i$ . Если второй выбранный узел оккупирован частицей, то переход частицы в него считается невозможным, однако попытка такого перехода учитывается.

Поскольку ионы выполняют термоактивированные прыжки, то их вероятность определяется выражением

$$w_{ji} = \exp\left(-\frac{U + J(z_j - z_i) + \Delta U_{\text{Coul}}}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где  $U = 0,2 \text{ эВ}$  – член, учитывающий внешнее поле;  $J$  – энергия ван-дер-ваальсового притяжения ближайших соседей;  $z_j, z_i$  – число ближайших соседей  $j$ -го и  $i$ -го узла соответственно;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура.

Изменение кулоновской энергии в результате прыжка иона определяется выражением

$$\Delta U_{\text{Coul}} = U_{\text{Coul}}^{\text{end}} - U_{\text{Coul}}^{\text{start}}. \quad (2)$$

Величину энергии кулоновских взаимодействий для системы со сляб геометрией с использованием суммирования Эвальда можно записать в виде [7, 8]

$$U_{\text{Coul}} = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \left[ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( q_i q_j \frac{\text{erfc}(\alpha |\mathbf{r}_{ij}|)}{|\mathbf{r}_{ij}|} + \frac{1}{\pi V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} q_i q_j \frac{4\pi^2}{\alpha^2} \exp\left(-\frac{k^2}{\alpha^2}\right) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}) \right) + \frac{2\pi}{V} \left| \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{r}_i \right|^2 \right], \quad (3)$$

где  $q_i$  – заряд  $i$ -го иона;  $\alpha = 5 / L$  – параметр Эвальда;  $\mathbf{r}_{ij}$  – радиус-вектор частицы  $j$  относительно частицы  $i$ ;  $V = L_x L_y L_z$  – объем системы;  $\mathbf{k} = 2\pi(\gamma'_x / L_x, \gamma'_y / L_y, \gamma'_z / L_z)$  – вектор обратной решетки;  $\gamma'_x, \gamma'_y, \gamma'_z$  – целые числа.

При моделировании обрезание при суммировании в прямом пространстве производилось по половине длины вдоль каждого направления, а также принималось  $\gamma'_{\max y} = \gamma'_{\max z} = 4$ ,  $\gamma'_{\max x} = 12$ , что соответствует размеру «вакуумных областей», необходимых при моделировании системы со сляб геометрией [9, 10], равному двум размерам основной ячейки моделирования в направлении оси  $x$ , и учету 334  $k$ -векторов в обратном пространстве.

Вычисленная в соответствии с соотношением (1) вероятность  $w_{ji}$  сопоставлялась со случайным числом  $w_r$  из диапазона  $[0; 1]$ . При этом если  $w_r \leq w_{ji}$ , то переход считается произошедшим. В противном случае изменение состояния моделируемой системы не происходит. Повторение данной процедуры  $n$  раз определяет один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

Моделировалась одна траектория. Первые 500 Монте-Карло шагов (МКШ) отводились на установление стационарного состояния, последующее усреднение производилось по  $10^4$  (для системы с  $\rho = 0,1$ ) и  $10^5$  (для системы с  $\rho = 0,03$ ) МКШ.

**Результаты моделирования.** На рис. 2 и 3 показано распределение концентрации заряженных частиц в окрестности межзеренной границы.

Из рисунков видно, что с ростом числа сегрегированных на межзеренной границе частиц (увеличением сопротивления границы) глубина и ширина обедненной приграничной зоны увеличиваются.

На рис. 4 и 5 показаны зависимости числа прошедших через границу частиц  $I$ , которое пропорционально величине электрического тока, от обратной температуры. Как и следовало ожидать, температурная зависимость носит аррениусовский характер. Это позволяет определить энергию активации  $E_a$ , график которой показан на рис. 6.

Из рисунка видно, что повышение концентрации подвижных ионов и увеличение сопротивления межзеренной границы приводит к увеличению энергии активации (снижению лабильности ионов).

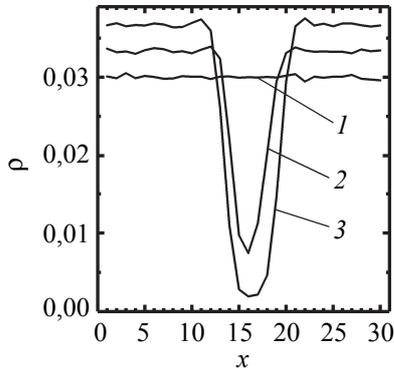


Рис. 2. Распределение концентрации заряженных частиц в окрестности межзеренной границы при  $\rho_c = 0,03$ ,  $T = 1000$  К,  $\varepsilon = 20$ ,  $c_b = 0$  (кривая 1); 0,1 (2); 0,2 (3)

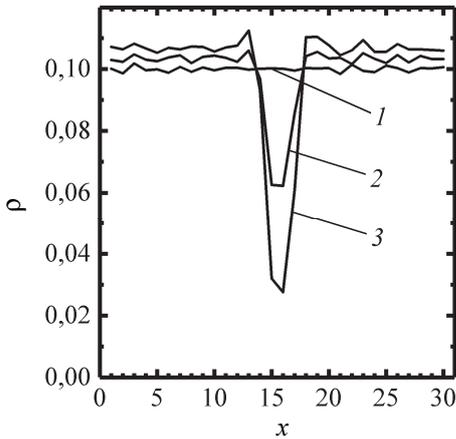


Рис. 3. Распределение концентрации заряженных частиц в окрестности межзеренной границы при  $\rho_c = 0,1$ ,  $T = 1000$  К,  $\varepsilon = 20$ ,  $c_b = 0$  (кривая 1); 0,1 (2); 0,2 (3)

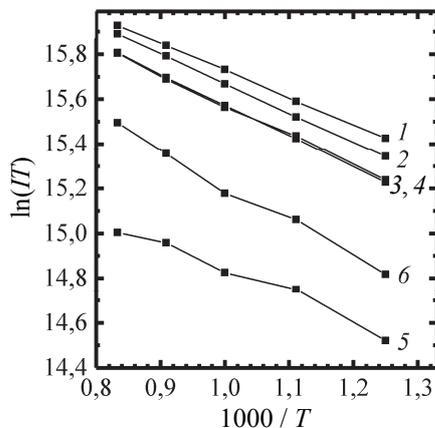


Рис. 4. Температурная зависимость электрического тока при  $\rho_c = 0,03$ ,  $c_b = 0$ ,  $\varepsilon = 20$  (кривая 1);  $c_b = 0$ ,  $\varepsilon = 40$  (2);  $c_b = 0,1$ ,  $\varepsilon = 20$  (3);  $c_b = 0,1$ ,  $\varepsilon = 40$  (4);  $c_b = 0,2$ ,  $\varepsilon = 20$  (5);  $c_b = 0,2$ ,  $\varepsilon = 40$  (6)

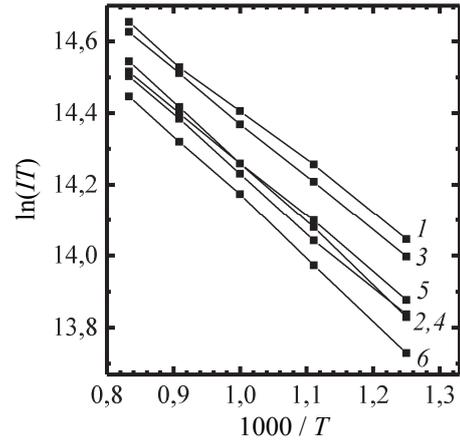


Рис. 5. Температурная зависимость электрического тока при  $\rho_c = 0,1$ ,  $c_b = 0$ ,  $\varepsilon = 20$  (кривая 1);  $c_b = 0$ ,  $\varepsilon = 40$  (2);  $c_b = 0,1$ ,  $\varepsilon = 20$  (3);  $c_b = 0,1$ ,  $\varepsilon = 40$  (4);  $c_b = 0,2$ ,  $\varepsilon = 20$  (5);  $c_b = 0,2$ ,  $\varepsilon = 40$  (6)

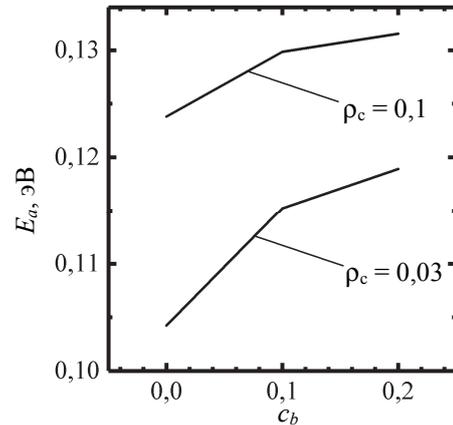


Рис. 6. Зависимость энергии активации от величины межфазной границы

**Заключение.** Рассмотрена трехмерная решеточная модель керамического ионного проводника, содержащая зерно и межзеренную прослойку, описываемую слоем с сегрегированными неподвижными ионами. Выполнено моделирование описанной системы по кинетическому методу Монте-Карло. При этом кулоновская энергия определялась суммированием Эвальда для систем со сляб геометрий.

Показано, что зависимости числа прошедших через границу частиц, которое пропорционально величине электрического тока частиц, от обратной температуры носят аррениусовский характер. Это позволило определить энергию активации.

Работа выполнена при грантовой поддержке научной программы Евросоюза HORIZON-2020 (проект AMD-734276-CONIN) и Национального агентства академических обменов Польши в рамках программы «Solidarity with scientists Initiative».

### Список литературы

1. Rechargeable Batteries: Grasping for the Limits of Chemistry / E. J. Berg [et al.] // *Journ. Electrochem. Soc.* 2015. Vol. 162, no. 14. P. A2468–A2475.
2. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Concentration kinetics of intercalation systems // *Russian Journal of Electrochemistry*. 2010. Vol. 46, no. 4. P. 389–400.
3. Ласовский Р. Н., Бокун Г. С., Вихренко В. С. Диаграммное приближение для неравновесных и неоднородных состояний решеточных систем // *Труды БГТУ*. 2010. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 59–62.
4. Грода Я. Г., Ласовский Р. Н. Транспортные свойства решеточного флюида с SALR-потенциалом на плоской квадратной решетке // *Журнал БГУ. Физика*. 2021. № 1. С. 90–101.
5. Nanostructurization caused by first order phase transitions in systems with hopping dynamics / G. S. Bokun [et al.] // *Solid State Ionics*. 2013. Vol. 251. P. 51–54.
6. Unusual properties of a model of an intergrain boundary in solid oxide ceramic electrolytes / G. S. Bokun [et al.] // *Solid State Ionics*. 2017. Vol. 302. P. 25–29.
7. Allen M. P., Tildesley D. J. *Computer simulation of liquids*. New York: Clarendon Press, 1989. 385 p.
8. Frenkel D., Smit B. *Understanding Molecular Simulation*. San Diego: Academic Press, 2002. 638 p.
9. Yeh C., Berkowitz M. L. Ewald summation for systems with slab geometry // *J. Chem. Phys.* 1999. Vol. 111. P. 3155–3162.
10. Santos A., Girotto M., Levin Y. Simulations of Coulomb systems with slab geometry using an efficient 3D Ewald summation method // *J. Chem. Phys.* 2016. Vol. 144. Art. 144103.

### References

1. Berg E. J., Villevieille C., Streich D., Trabesinger S., Novák P. Rechargeable Batteries: Grasping for the Limits of Chemistry. *Journ. Electrochem. Soc.*, 2015, vol. 162, no. 14, pp. A2468–A2475.
2. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Concentration kinetics of intercalation systems. *Russian Journal of Electrochemistry*, 2010, vol. 46, no. 4, pp. 389–400.
3. Lasovsky R. N. Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Diagram approximation for nonequilibrium and inhomogeneous states of lattice systems. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2010, no. 6: Physics and Mathematics. Informatics, pp. 59–62 (In Russian).
4. Groda Ya. G., Lasovsky R. N. Transport properties of lattice fluid with SALR potential on a simple square lattice. *Zhyrнал BGU. Fizika* [Journal of the Belarusian State University. Physics], 2021, no. 1, pp. 90–101 (In Russian).
5. Bokun G. S. Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Nanostructurization caused by first order phase transitions in systems with hopping dynamics. *Solid State Ionics*, 2013, vol. 251, pp. 51–54.
6. Bokun G. S., Groda Y. G., Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Unusual properties of a model of an intergrain boundary in solid oxide ceramic electrolytes. *Solid State Ionics*, 2017, vol. 302, pp. 25–29.
7. Allen M. P., Tildesley D. J. *Computer simulation of liquids*. New York, Clarendon Press Publ., 1989. 385 p.
8. Frenkel D., Smit B. *Understanding Molecular Simulation*. San Diego, Academic Press Publ., 2002. 638 p.
9. Yeh C., Berkowitz M. L. Ewald summation for systems with slab geometry. *J. Chem. Phys.*, 1999, vol. 111, pp. 3155–3162.
10. Santos A., Girotto M., Levin Y. Simulations of Coulomb systems with slab geometry using an efficient 3D Ewald summation method. *J. Chem. Phys.*, 2016, vol. 144, art. 144103.

### Информация об авторах

**Ласовский Руслан Николаевич** – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры механики и конструирования. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: lasovsky@tut.by

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

**Гапанюк Дмитрий Владимирович** – кандидат физико-математических наук, заместитель декана факультета химической технологии и техники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gapdm@mail.ru

**Грода Надежда Георгиевна** – заведующая лабораторией кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gng@tut.by

#### Information about the authors

**Lasovsky Ruslan Nikolaevich** – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Mechanics and Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lasovsky@tut.by

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

**Gapanjuk Dmitry Vladimirovich** – PhD (Physics and Mathematics), Vice-dean of the Chemical Technology and Engineering Faculty. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gapdm@mail.ru

**Groda Nadezhda Georgievna** – head of laboratory, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gng@tut.by

*Поступила после доработки 08.09.2021*

# ФИЗИКА PHYSICS

---

УДК 531.19; 538.911

**И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтова, А. А. Кулеш, А. А. Рогач**  
Белорусский государственный технологический университет

## **КОМПЛЕКСНЫЙ СТАТИСТИКО-ВАРИАЦИОННЫЙ РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГЕТЕРОГЕННОЙ СИСТЕМЫ «КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ НАНОЧАСТИЦА – ОДНОРОДНАЯ ГАЗОВАЯ СРЕДА»**

В работе используется ранее разработанная методика решения системы статистических интегральных уравнений и соотношений, которые определяют структурные и термодинамические характеристики неоднородных молекулярных систем. Эти уравнения получены в рамках двухуровневого статистического метода, который базируется на методе коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), методе условных коррелятивных функций Ротта и методе термодинамических функционалов плотности.

Используемая замкнутая система интегральных уравнений устанавливает связь между микроскопическими параметрами системы взаимодействующих частиц (атомов или молекул) и макроскопическими характеристиками кристаллических наночастиц, находящихся в равновесии с газообразной окружающей средой, т. е. в гетерогенной системе кристалл – газ при температуре ниже температуры тройной точки. При решении этой системы радиальный профиль плотности в межфазной области аппроксимируется с помощью функции, содержащей три параметра и гиперболический тангенс. Один из параметров находится из условия равновесия жидкой либо газообразной среды с исследуемой кристаллической сферической наночастицей, а два других являются вариационными параметрами при решении вариационной задачи по отысканию минимума большого термодинамического потенциала гетерогенной системы.

В статье реализована методика вариационного расчета профиля плотности в окрестности сферической кристаллической наночастицы, находящейся в равновесии с газообразной средой при температуре ниже тройной точки, а также установлена корреляция между структурой и термодинамическими характеристиками кристаллических наночастиц с учетом пространственной релаксации решетки на их границе с окружающей газовой средой.

**Ключевые слова:** двухуровневый статистический метод, вариационный метод, потенциал средних сил, гетерогенная система, наночастица, поле плотности.

**Для цитирования:** Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Кулеш А. А., Рогач А. А. Комплексный статистико-вариационный расчет термодинамических и структурных характеристик гетерогенной системы «кристаллическая наночастица – однородная газовая среда» // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 33–40.

**I. I. Narkevich, E. V. Farafontova, A. A. Kulesh, A. A. Rogach**  
Belarusian State Technological University

## **COMPREHENSIVE STATISTICAL-VARIATIONAL CALCULATION OF THERMODYNAMIC AND STRUCTURAL CHARACTERISTICS OF HETEROGENEOUS SYSTEM «CRYSTALLINE NANOPARTICLE – HOMOGENEOUS GASEOUS ENVIRONMENT»**

In this paper we used the procedure developed before for solution of system of statistical equations, and formula, determining structural and thermodynamic characteristics of inhomogeneous molecular systems. These equations were derived within two-level statistical approach, based on Bogolubov – Born – Green – Kirkwood – Ivon correlation function method (BBGKI), Rott condition correlative function method and thermodynamic density functionals method.

The used closed system of integral establishes connection between microscopic system parameters of interacting particles (atoms or molecules) and macroscopic characteristics of crystalline nanoparticles in equilibrium with a gaseous environment, i.e., in a heterogeneous crystal – gas system at a temperature

below the triple temperature point. When solving this system, the radial density profile in the interphase region is approximated using a function containing three parameters and a hyperbolic tangent. One of the parameters is found from the condition of equilibrium of a liquid or gaseous medium with the investigated crystalline spherical nanoparticle, and the other two are variation parameters while solving the variational problem of finding the minimum of the large thermodynamic potential of a heterogeneous system.

The article implements a method for the variational calculation of the density profile in the vicinity of a spherical crystalline nanoparticle in equilibrium with a gaseous medium at a temperature below the triple point, and also establishes a correlation between the structure and thermodynamic characteristics of crystalline nanoparticles, taking into account the spatial relaxation of the lattice at their boundary with the surrounding gas environment.

**Key words:** two-level statistical method, variation method, potential of average forces, heterogeneous system, nanoparticle, density field.

**For citation:** Narkevich I. I., Farafontova E. V., Kulesh A. A., Rogach A. A. Comprehensive statistical-variational calculation of thermodynamic and structural characteristics of heterogeneous system «crystalline nanoparticle – homogeneous gaseous environment». *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 33–40 (In Russian).

**Введение.** В данной работе анализируются разные методы теоретического описания структуры и термодинамических характеристик неоднородных молекулярных систем, в частности малых капель [1, 2], что необходимо для развития теории нуклеации и кристаллических наночастиц, актуальность изучения которых обусловлена тем обстоятельством, что в настоящее время интенсивно разрабатываются экспериментальные способы получения композиционных наноматериалов, обладающих уникальными свойствами [3]. Для их описания используется метод термодинамических функционалов плотности совместно с методами коррелятивных функций в различных приближениях. Например, в работе [1] при расчете профиля плотности в системе жидкость – пар с плоской и сферической поверхностями раздела фаз использовалось приближение случайной фазы. Оно предполагает локальное описание в приближении жестких сфер для учета вклада, связанного с силами отталкивания, и нелокальное описание вклада дальнедействующих сил притяжения (без учета бинарных корреляций). В этом случае интегральное уравнение для профиля плотности сферически симметричной системы имеет следующий вид [2, 4]:

$$\mu_h[\rho(r)] - \mu + \int_V \rho(r') w(|r - r'|) = 0. \quad (1)$$

Здесь используются следующие обозначения:  $\mu_h[\rho]$  – химический потенциал системы жестких сфер, для которого используется формула Карнахана – Старлинга [4];  $\rho(r)$  – профиль плотности числа частиц сферически симметричной системы жидкость – пар;  $\mu$  – химический потенциал изучаемой системы;  $w(r)$  – дальнедействующая часть межмолекулярного потенциала взаимодействия; интегрирование проводится по объему системы  $V$ .

С помощью уравнения (1) в работах [1, 2] решена задача по отысканию равновесного профиля плотности для малых капель с сильно искривленной поверхностью раздела, что представляет особый интерес в теории гомогенной нуклеации.

Показано, что в случае малых капель даже в ее центральной части свойства объемной жидкой фазы не достигаются в полной мере, причем степень отклонения зависит от температуры и размера сферических капель [1]. Этот результат является следствием самоперекрывания поверхностного слоя между двумя флюидными (текучими) фазами (жидкость – газ).

Что касается теоретического описания кристаллических наночастиц, то возникает дополнительное препятствие, так как фазовый переход происходит между двумя фазами разной структуры. В кристаллической наночастице имеет место ближний и дальний порядок, а в окружающей среде (жидкой либо газовой) только ближний порядок. Следовательно, коррелятивные функции, описывающие микроструктуру сосуществующих фаз, радикально отличаются по разные стороны от поверхностного слоя. В кристаллической наночастице одночастичная (унарная) функция распределения атомов или молекул имеет центры локализации в окрестности узлов соответствующей кристаллической решетки, а в окружающей наночастицу жидкой или газообразной объемной фазе она одинакова по всему объему. Для описания таких систем можно использовать двухуровневый статистический метод [5, 6], в котором весь объем  $V$  гетерогенной двухфазной системы разделяется на элементарные микроячейки объемами  $\omega$ , центры которых образуют кристаллическую решетку, совпадающую с решеткой соответствующего монокристалла с тепловыми вакансиями. Параметры этой решетки в объеме наночастицы могут отличаться от параметров решетки монокристалла, особенно вблизи границы раздела между кристаллической наночастицей и окружающей ее флюидной средой. Поэтому при переходе от подхода, который в результате варьирования большого термодинамического потенциала  $\Omega$  привел к интегральному уравнению (1) для искомого радиального поля плотности  $\rho(r)$  малых капель, оказалось необходимым интегрирование

по всему объему  $V$  изучаемой гетерогенной системы заменять на интегрирование по объемам  $\omega_i$  элементарных ячеек с последующим суммированием по индексу  $i$ , который изменяется от  $i = 0$  в центре наночастицы до значения  $M$ , равного числу элементарных микроячеек для всей изучаемой системы ( $V = \sum_{i=1}^M \omega_i$ ). При этом интегральное урав-

нение, соответствующее уравнению (1), записывается не для искомого радиального профиля плотности  $\rho(r)$ , т. е. одночастичной функции распределения в методе Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), а для потенциалов средних сил модифицированного метода условных распределений Ротта. Эти потенциалы определяют одночастичные (унарные) и двухчастичные (бинарные) функции, описывающие распределение реальных атомов или молекул (частицы сорта  $a$ ) и гипотетическое распределение фиктивных частиц (частицы сорта  $v$ ), которые как бы находятся в вакантных ячейках (тепловые вакансии в кристаллах) и не взаимодействуют между собой и с реальными атомами или молекулами изучаемой системы.

Полученное в диссертации [5] интегральное уравнение для потенциалов средних сил однокомпонентной системы запишем в следующем виде:

$$e^{-\frac{\Phi_{ij}(\bar{q}_i, \{n_i\})}{kT}} = \frac{n_{ij}^{aa}}{n_i} \int_{\omega_j} e^{-\frac{\Phi(\bar{q}_i - \bar{q}_j)}{kT}} \hat{F}_{11}^*(\bar{q}_j, \{n_i\}) d\bar{q}_j + \frac{n_{ij}^{av}}{n_i} \int_{\omega_j} e^{-\frac{\Phi_{ij}(\bar{q}_i, \{n_i\})}{kT}} \hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i, \{n_i\}) d\bar{q}_i. \quad (2)$$

Здесь  $\Phi_{ij}(\bar{q}_i, \{n_i\})$  означает, что потенциал  $\Phi_{ij}$  является функцией координат реальной частицы с радиус-вектором  $q_i$  в микроячейке объемом  $\omega_i$  и функционалом от дискретного поля одноячеечных чисел заполнения  $n_i$  этого объема реальной частицей;  $n_{ij}^{aa}$  и  $n_{ij}^{av}$  – двухъячеечные числа заполнения пар ячеек  $\omega_i$  и  $\omega_j$ , учитывающие бинарные корреляции между частицами системы;  $\Phi(|\bar{q}_i - \bar{q}_j|)$  – парный потенциал взаимодействия двух реальных частиц (в расчетах данной работы это потенциал Леннарда-Джонса);  $\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_j, \{n_i\})$  либо  $\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i, \{n_i\})$  – вспомогательные одночастичные функции распределения реальных частиц в объемах соответствующих микроячеек, которые нормированы на единицу (на это указывает значок « $\wedge$ » над буквой  $F_{11}$ ; нижние индексы возле буквы  $F$  указывают на описание в первом приближении метода условных распределений, при котором учитываются только те состояния системы  $N$  частиц, когда в любой микроячейке малого размера находится не более одной реальной частицы).

С помощью интегрального уравнения (2) ранее были получены приближенные статистические

выражения для внутренней энергии  $U$ , энтропии  $S$ , свободной энергии  $F = U - TS$  и большого термодинамического потенциала  $\Omega = F - \mu \sum n_i$ , которые являются функционалами дискретного поля чисел заполнения  $n_i$ , определяющего соответствующее поле искомой плотности  $\rho(\bar{r}_i) = n_i / \omega_i$ . Конкретные выражения всех функционалов приведены в основной части статьи.

Для определения равновесного поля плотности нужно интегральное уравнение (2) решать совместно с условием экстремальности потенциала  $\Omega$ , выполнив варьирование  $\Omega\{n_i\} = F\{n_i\} - \mu \sum_{i=1}^M n_i$  по полю чисел заполнения  $n_i$ :

$$\delta\Omega = 0 \Rightarrow \frac{\delta F\{n_i\}}{\delta n_i} - \mu = 0. \quad (3)$$

Варьирование большого термодинамического потенциала  $\Omega$  и решение системы (2) в данной работе выполнялось численно с помощью компьютерной программы, разработанной с использованием пакета MathCad.

**Исходная замкнутая система уравнений для потенциалов средних сил.** Ранее в работах [7, 8] была изложена методика расчета структурных и термодинамических характеристик кристаллических наночастиц с использованием двухуровневого статистического метода [5, 6]. Он представляет собой симбиоз метода коррелятивных функций ББГКИ, метода условных распределений Ротта [9] и метода термодинамических потенциалов, которые в случае неоднородных систем являются функционалами поля плотности среды. В двухуровневом статистическом методе учитывается неоднородное распределение чисел заполнения  $n_i$  молекул по микроячейкам объемами  $\omega_i$  ( $i = 1, 2, \dots, M$ ), на которые, согласно методу условных распределений Ротта, мысленно разделен весь объем  $V$  системы. Эти ячейки образуют гипотетическую кристаллическую решетку в случае флюидных (газообразных либо жидких) сред и реальную – в случае кристаллических. Форма и размеры микроячеек претерпевают изменения вблизи границы кристаллической наночастицы с окружающей газообразной средой, т. е. наблюдается пространственная релаксация реальной кристаллической решетки в объеме наночастицы. В первом приближении, в соответствии с идеей метода условных распределений, микроячейки могут содержать не более одной частицы либо быть с определенной вероятностью вакантными, так что числа заполнения  $n_i$  удовлетворяют условию:  $0 \leq n_i \leq 1$ .

В двухуровневом статистическом методе поле плотности в системе с наночастицей задается соответствующим радиальным полем чисел заполнения  $n_i$  ячеек, принадлежащих координационным сферам с номерами  $p$  ( $p = 1, 2, \dots, P$ ), центры

которых совпадают с центром сферической кристаллической наночастицы в окружающей ее газовой среде.

В процессе реализации основной идеи двухуровневого статистического метода была ранее получена замкнутая система интегральных уравнений для двухъячеечных потенциалов  $\varphi_{ij}$  средних сил, которые описывают взаимодействие выделенной молекулы конденсированной неоднородной среды в ячейке  $\omega_i$  с другими молекулами, статистически распределенными в ячейках  $\omega_j$ . Следовательно, потенциалы  $\varphi_{ij}$  неоднородной системы являются функциями координат в ячейке  $\omega_i$  и функционалами от поля всех чисел заполнения  $n_l$ , т. е.  $\varphi_{ij}(\bar{q}_i, \{n_l\})$ .

В общем случае для однокомпонентной системы с вакантными ячейками исходное интегральное уравнение (2) для потенциалов средних сил  $\varphi_{ij}(\bar{q}_i, \{n_l\})$  перепишем в следующем виде [7]:

$$f_{ij}(\bar{q}_i, \{n_l\}) = \frac{n_{ij}^{aa}}{n_i} f_{ij}^{(a)}(\bar{q}_i, \{n_l\}) + \frac{n_{ij}^{av}}{n_i} f_{ij} \{n_l\}. \quad (4)$$

Здесь используется функционал  $f_{ij}(\bar{q}_i, \{n_l\}) = \exp\{-\beta\varphi_{ij}(\bar{q}_i, \{n_l\})\}$ , а дополнительные функционалы  $f_{ij}^{(a)}(\bar{q}_i, \{n_l\})$  и  $f_{ij} \{n_l\}$  находятся в результате усреднения, выполняемого с помощью вспомогательных нормированных на единицу унарных функций  $\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_j)$  и  $\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i)$  соответственно,  $\beta = 1/kT$  – обратная температура:

$$f_{ij}^{(a)}(\bar{q}_i, \{n_l\}) = \int_{\omega_j} \exp\{-\beta\Phi(|\bar{q}_i - \bar{q}_j|)\} \hat{F}_{11}^*(\bar{q}_j) d\bar{q}_j; \quad (5)$$

$$f_{ij} \{n_l\} = \int_{\omega_i} \exp\{-\beta\varphi_{ij}(\bar{q}_i, \{n_l\})\} \hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i) d\bar{q}_i; \quad (6)$$

$$\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i) = \frac{\exp\left\{-\beta \sum_{k \neq i, j} \varphi_{ik}(\bar{q}_i, \{n_l\})\right\} d\bar{q}_i}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\beta \sum_{k \neq i, j} \varphi_{ik}(\bar{q}_i, \{n_l\})\right\} d\bar{q}_i}. \quad (7)$$

В интегральных уравнениях (4) двухъячеечные числа заполнения всевозможных пар ячеек определяются следующими соотношениями [5, 6]:

$$n_{ij}^{aa} \{n_l\} = n_i - n_{ij}^{av} \{n_l\}; \quad (8)$$

$$n_{ij}^{av} \{n_l\} = \frac{1}{2A_{ij}} \left\{ [(n_i - n_j)A_{ij} - 1] + \sqrt{[(n_i - n_j)A_{ij} - 1]^2 + 4n_i(1 - n_j)A_{ij}} \right\}; \quad (9)$$

$$A_{ij} = f_{ij}^{(a)} \{n_l\} - 1; \quad (10)$$

$$f_{ij}^{(a)} \{n_l\} = \int_{\omega_i} f_{ij}^{(a)}(\bar{q}_i, \{n_l\}) \hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i) d\bar{q}_i. \quad (11)$$

Функционалы энтропии  $S$ , внутренней энергии  $U$ , свободной энергии  $F$  и большого термодинамического потенциала  $\Omega$  сферической наночастицы и окружающей ее флюидной среды рассчитываются по следующим формулам:

$$S\{n_p\} = -\sum_{p=1}^P Z_p (n_p \ln n_p + (1 - n_p) \ln(1 - n_p) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J n_p n_j g_{pj} \ln g_{pj}); \quad (12)$$

$$U\{n_p\} = \sum_{p=1}^P Z_p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J n_p n_j g_{pj} \Psi_{pj}; \quad (13)$$

$$F\{n_p\} = U\{n_p\} - \theta S\{n_p\}; \quad (14)$$

$$\Omega\{n_p\} = F\{n_p\} - \mu \sum_{p=1}^P Z_p n_p; \quad (15)$$

$$\Psi_{pj} = \int_{\omega_p} \int_{\omega_j} \Phi(|\bar{q}_p - \bar{q}_j|) \hat{F}_{11}^*(\bar{q}_p) e^{-\Phi(|\bar{q}_p - \bar{q}_j|)/kT} \times \hat{F}_{11}^*(\bar{q}_j) d\bar{q}_p d\bar{q}_j.$$

Здесь  $Z_p$  – число узлов, принадлежащих координационной сфере с номером  $p$ ;  $J = 42$  – число узлов, принадлежащих трем координационным сферам с центрами, совпадающими с центром ячейки  $\omega_p$ , по узлам которых выполняется суммирование в уравнениях (12), (13);  $g_{ij} = n_{ij}/(n_i n_j)$  – аналог радиальной функции для изучаемой гетерогенной системы, представляющей собой совокупность микроячеек, центры которых образуют для молекулярной системы ГЦК решетку.

#### Методика численного решения замкнутой системы уравнений и ее реализация с помощью модернизированной компьютерной программы.

При использовании замкнутой системы уравнений (4)–(11) для описания гетерогенной системы «кристаллическая наночастица в газобразной макроскопической среде» в работе [7] она была модифицирована таким образом, чтобы можно было ее решать численно с наименьшими затратами компьютерного времени (уравнения (10)–(19) в работе [7]). При выполнении численных расчетов методом итераций все формулы и уравнения были предварительно записаны в безразмерном виде, геометрические размеры в котором определены в единицах линейного параметра  $\sigma$  потенциала Леннард-Джонса, а все величины, имеющие размерность энергии, переписаны в единицах энергетического параметра  $\epsilon$  этого же потенциала.

В случае сферической наночастицы поле плотности в межфазной области зависит только от радиуса  $r_p$  координационной сферы с номером  $p$

относительно центра наночастицы. Следовательно, нужно определить радиальный профиль чисел заполнения  $n(r_p)$ , который для молекулярной системы аппроксимируем с помощью трехпараметрической функции, содержащей гиперболический тангенс [9], т. е.

$$n(r_p) = a - (a - n_\infty) \operatorname{th}(\kappa \Delta x_p). \quad (16)$$

Здесь  $a$  и  $\kappa$  – вариационные параметры; третий параметр  $n_\infty$  определяет значения чисел заполнения для однородной жидкой либо газовой среды, находящейся в равновесии с исследуемой кристаллической наночастицей; в выполненных расчетах  $\Delta x_p = r_p - r_{15}$ ; номер  $p = 15$  соответствует границе кристаллической наночастицы, а радиус наночастицы  $r_{15} = 4,38$ .

Значение радиуса  $r_{15}$  приведено в единицах линейного параметра  $\sigma$  потенциала Леннард-Джонса. Например, для аргона  $\sigma = 3,405 \text{ \AA}$ , так что радиус наночастицы  $r_{15} = 1,49 \text{ нм}$ .

Формула (16) в виде гиперболического тангенса была ранее получена при статистическом описании профиля плотности на плоской границе раздела жидкость – газ [9]. Поэтому в случае сферической поверхности раздела фаз параметры  $a$  и  $\kappa$  здесь рассматриваются в качестве вариационных параметров при решении вариационной задачи по отысканию минимума большого термодинамического потенциала  $\Omega\{n_p\}$  наночастицы как функционала от искомого радиального профиля чисел заполнения  $n_p$  и двух вспомогательных профилей.

Первый из них характеризует радиальное смещение узлов  $\Delta r_p$  ГЦК решетки кристаллической наночастицы (пространственная релаксация решетки), а второй – изменение формы унарных функций в ячейках разных координационных сфер с номерами  $p$ , описываемое радиусами  $b_p$  сфер, определяющих области локализации унарных функций в окрестности узлов решетки.

В пакете MathCad проведена модернизация ранее разработанной компьютерной программы с целью реализации итерационно-вариационного расчета параметров радиального профиля (16), соответствующего минимуму большого термодинамического потенциала  $\Omega\{n_p\}$  для гетерогенной системы «кристаллическая наночастица – однородная газовая среда».

Варьирование функционала  $\Omega\{n_p\}$  выполнено численно для разных наборов значений параметров  $a$  и  $\kappa$ . На рис. 1 приведены зависимости большого термодинамического потенциала  $\Omega$  от вариационного параметра  $a$  при заданных разных значениях параметра  $\kappa$  и температуре  $\theta = kT/\varepsilon = 0,6$ , которая соответствует фазовому переходу кристалл – газ со значением  $n_\infty = 2 \cdot 10^{-5}$  [5].

Из рис. 1 видно, что абсолютный минимум функционала  $\Omega\{n_p\}$  реализуется при значениях параметра  $\kappa$  в интервале от 4 до 5 и, соответственно, при значениях параметра  $a$  в интервале от 0,07 до 0,08.

Макроструктура сферической кристаллической наночастицы с неоднородным радиальным профилем плотности (16) описывается дискретными наборами чисел заполнения  $n_p$ , среднеквадратичных отклонений  $\sigma_p$  молекул от центров ячеек и радиусов  $b_p$  сфер, внутри которых вспомогательные унарные функции  $F_{11}^*$  распределения считаются постоянными.

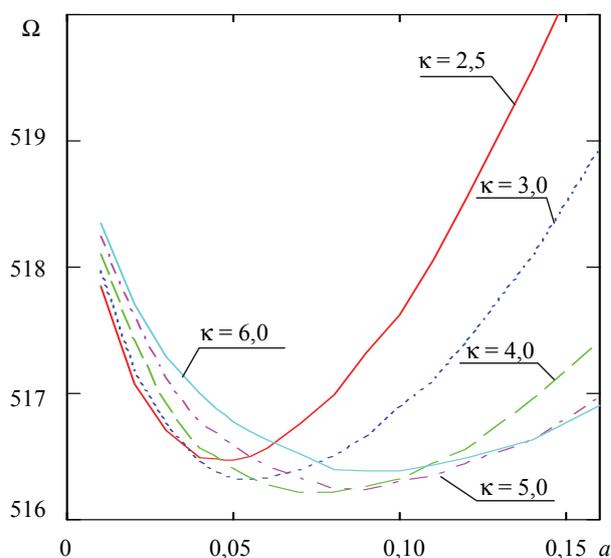


Рис. 1. Зависимости большого термодинамического потенциала  $\Omega$  от вариационного параметра  $a$  при разных значениях параметров  $\kappa$  и  $\theta = 0,6$

На рис. 2, а, б представлены результаты расчетов характеристик структуры сферической кристаллической молекулярной наночастицы, находящейся в равновесии с окружающей ее газовой средой при температуре  $\theta = 0,6$ . Полученные зависимости соответствуют минимуму функционала  $\Omega\{n_p\}$ , который имеет место при значениях  $\kappa \approx 4,5$  и  $a \approx 0,075$ .

Из рис. 2, а видно, что в случае кристаллической наночастицы с числами заполнения  $n \approx 0,999$  на ее границе образуется адсорбционный газообразный слой с повышенными значениями плотности (например,  $n_{16} = 0,095$ ). При этом в объеме кристаллической наночастицы наблюдается постепенное увеличение среднеквадратичных отклонений  $\sigma$  от значения  $\sigma_0 = 0,15$  в центре наночастицы до значения  $\sigma_{15} = 0,36$  на ее границе. Одновременно с этим происходит сдвиг узлов ГЦК решетки в радиальном направлении, который описывается зависимостью  $\Delta r_p$  (при  $p = 15$  значение  $\Delta r_{15} = 0,20$ ).

В области адсорбционного слоя ( $p > 15$ ) смещения уменьшаются, а при  $p > 22$  они становятся отрицательными и постепенно приближаются к нулевым значениям, поскольку в расчетах использовалось граничное условие  $\Delta r_{30} = 0$ . На рис. 2 величина  $q_p = \ln Q_p$ , где  $Q_p$  – нормирующие множители унарных функций в ячейках координационных сфер с номерами  $p$ .

На рис. 3 представлены радиальные относительно центров ячеек профили унарных функций  $F_{11}$ , описывающих распределение молекулы в окрестности смещенных узлов ГЦК решетки, которым соответствует значение  $l = 50$  для разных значений номеров  $p$  координационных сфер.

Первые четыре графика ( $p = 0, 5, 10, 15$ ) описывают распределение молекул, образующих кристаллическую наночастицу ( $p = 15$  – ее граница),

а три остальных графика ( $p = 20, 26, 30$ ) описывают распределение молекул в ячейках, относящихся к координационным сферам в газовой среде, окружающей наночастицу.

Видно, что вблизи границы наночастицы, т. е. в адсорбционном слое, при  $p = 20$  наблюдается размытое квазикристаллическое распределение молекулы с максимумом функции  $F_{11}$ , несколько сдвинутым к центру наночастицы. При  $p = 26$  асимметрия увеличилась так сильно, что произошла делокализация функции распределения, т. к. «хвосты» унарной функции вышли за пределы своей элементарной ячейки. Для больших значений номеров  $p$  делокализация возрастает и при  $p = 30$  унарная функция становится практически постоянной внутри ячейки, что соответствует однородной гомогенной газовой фазе.

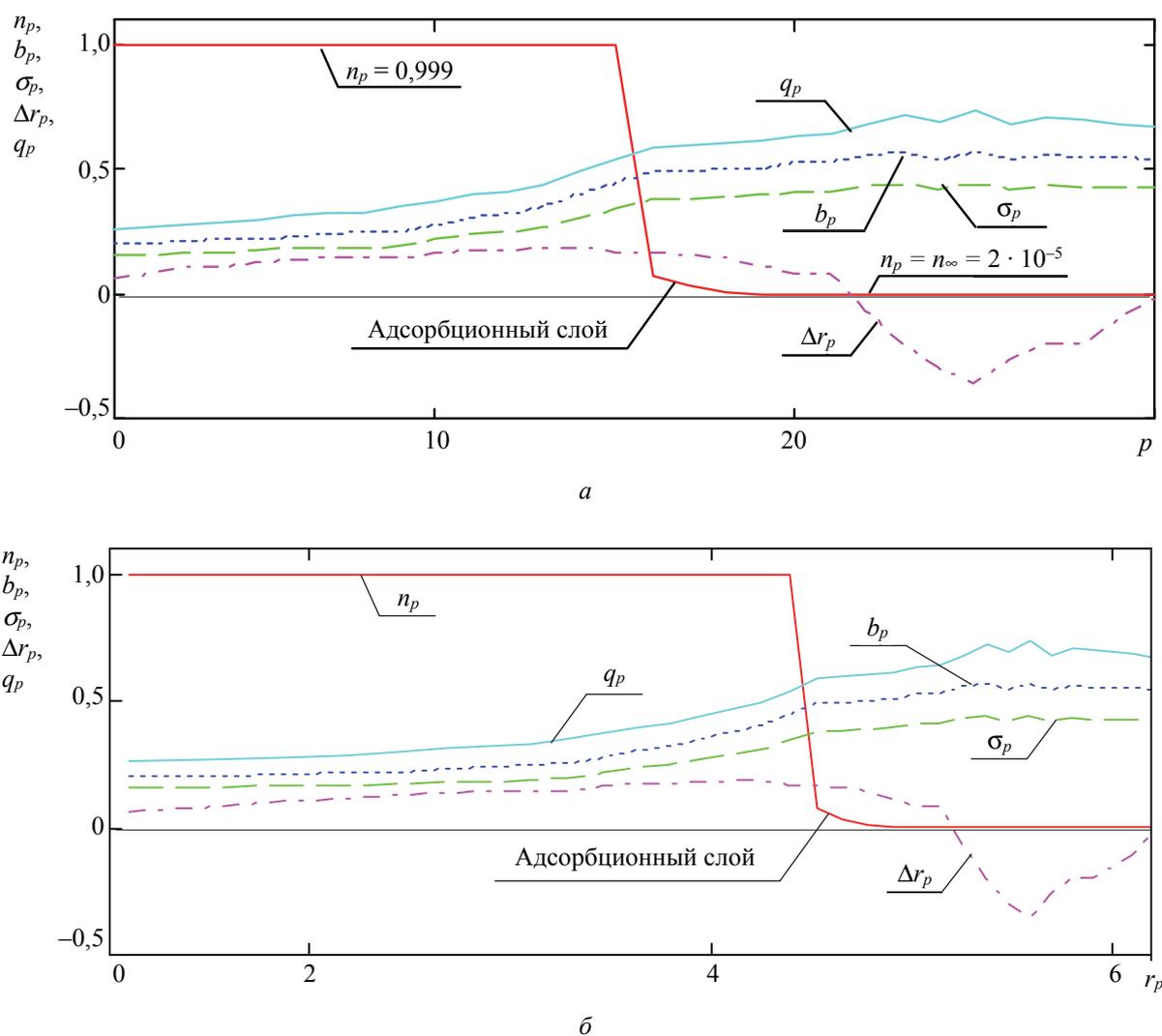


Рис. 2. Радиальный профиль чисел заполнения  $n_p$  гетерогенной системы и зависимости радиусов  $b_p$  сфер, среднеквадратичных отклонений  $\sigma_p$ , радиальных смещений  $\Delta r_p$  узлов и величин  $q_p = \ln Q_p$ :  
 $a$  – от номеров  $p$  координационных сфер наночастицы;  
 $b$  – от радиусов  $r_p$  координационных сфер наночастицы

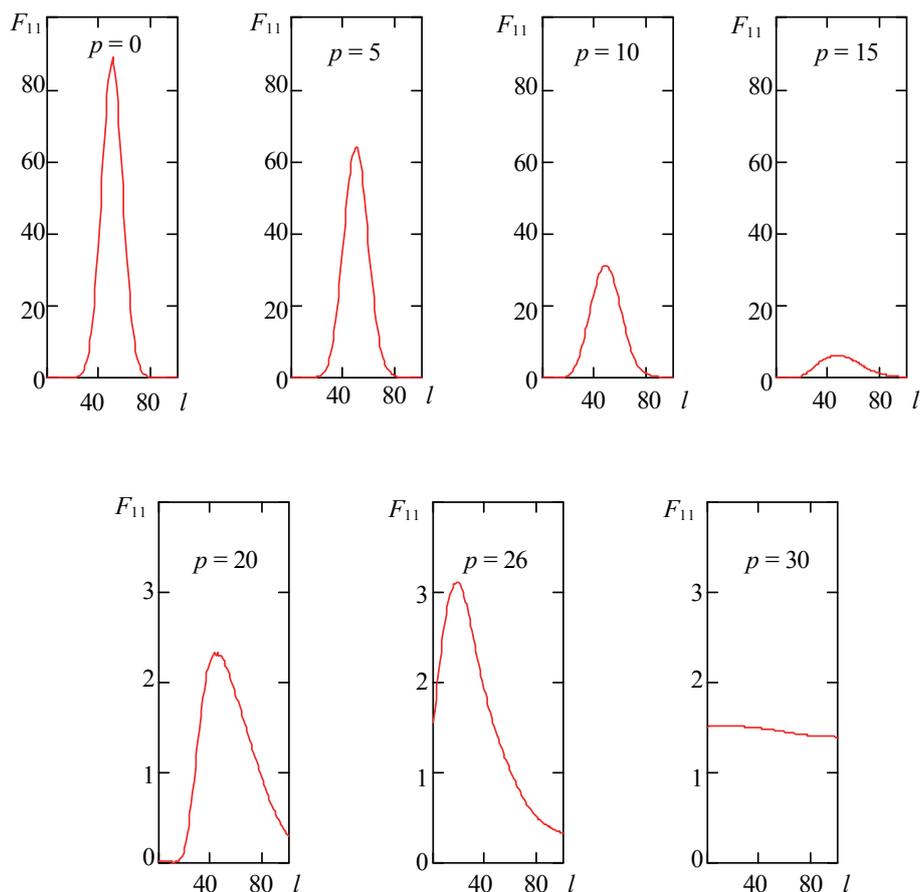


Рис. 3. Радиальные профили унарных функций для разных номеров  $p$  координационных сфер

**Заключение.** Проведена модернизация компьютерной программы с целью определения профиля плотности кристаллических сферических наночастиц в газовой среде с учетом пространственной релаксации параметров ГЦК решетки на их границе.

С помощью программы итерационно-вариационным методом решена система преобразованных

интегральных и алгебраических уравнений для гетерогенной системы, содержащей кристаллическую наночастицу внутри газообразной среды.

В результате рассчитано равновесное поле плотности в межфазной области гетерогенной системы «кристаллическая наночастица – однородная газовая среда» при температуре ниже тройной точки ( $\theta = 0,6$ ).

### Список литературы

1. Быков Т. В., Щекин А. К. Термодинамические характеристики малой капли в рамках метода функционала плотности // Коллоидный журнал. 1999. Т. 61. № 2. С. 164–171.
2. Быков Т. В., Щекин А. К. Поверхностное натяжение, длина Толмена и эффективная константа жесткости поверхностного слоя капли с большим радиусом кривизны // Неорганические материалы. 1999. Т. 35, № 6. С. 759–763.
3. Берри Р. С., Смирнов В. М. Моделирование конфигурационных переходов в атомных системах // УФН. 2013. Т. 183, № 10. С. 1029–1057.
4. Zeng X. C., Oxtoby D. W. Gas-Liquid Nucleation in Lennard-Jones Fluids // J. Chem. Phys. 1991. Vol. 94, no. 6. P. 4472–4478.
5. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. СПб., 1993. 223 с.
6. Наркевич И. И. Двухуровневый статистический метод описания неоднородных систем. Ч. 1. Симбиоз методов коррелятивных функций и термодинамических функционалов плотности: монография. Нордерштедт: LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2019. 114 с.
7. Решение модифицированного интегрального уравнения для потенциалов средних сил и расчет параметров фазовых переходов в гетерогенных системах, содержащих кристаллические наночастицы / И. И. Наркевич [и др.] // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2020. № 2 (236). С. 48–56.

8. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Two-level statistical description of structure of homogeneous macroscopic system and spherical crystalline nanoparticles // *Nanoscience and Technology: An International Journal*. 2019. No. 10 (4). P. 365–376.

9. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.

### References

1. Bykov T. V., Shchekin A. K. Thermodynamic Characteristics of a Small Droplet Within the Framework of the Density Functional Method. *Kolloidnyy zhurnal* [Colloidal journal], 1999, vol. 61, no. 2, pp. 164–171 (In Russian).

2. Bykov T. V., Shchekin A. K. Surface Tension, Tolman Length and Effective Constant of Rigidity of the Surface Layer of a Droplet With a Large Radius of Curvature. *Neorganicheskiye materialy* [Inorganic materials], 1999, vol. 35, no. 6, pp. 759–763 (In Russian).

3. Berry R. S., Smirnov V. M. Modeling of Configuration Transitions in Atomic Systems. *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Advances in Physical Sciences], 2013, vol. 183, no 10, pp. 1029–1057 (In Russian).

4. Zeng X. C., Oxtoby D. W. Gas – Liquid Nucleation in Lennard-Jones Fluids. *J. Chem. Phys.*, 1991, vol. 94, no. 6, pp. 4472–4478.

5. 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. 223 p.

6. Narkevich I. I. *Dvukhurovnevyy statisticheskiy metod opisaniya neodnorodnykh sistem. Simbioz metodov korrelyativnykh funktsiy i termodinamicheskikh funktsionalov plotnosti* [Two-level statistical method for describing heterogeneous systems. Symbiosis of methods of correlative functions and thermodynamic functionals of density]. Norderstedt, LAP LAMBERT Academic Publishing RU Publ., 2019. 114 p.

7. Narkevich I. I., Farafontova E. V., Kulesh A. A., Rogach A. A. Solution of the Modified Integral Equation for Medium Force Potentials and Calculation of the Parameters of Phase Transitions in Heterogeneous Systems Containing Crystalline Nanoparticles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2020, no. 2 (236), pp. 48–56 (In Russian).

8. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Two-level statistical description of structure of homogeneous macroscopic system and spherical crystalline nanoparticles. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2019, no. 10 (4), pp. 365–376.

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

### Информация об авторах

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

**Фарафонтова Елена Валерьевна** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: farafontova@belstu.by

**Кулеш Алексей Александрович** – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь).

**Рогач Алеся Александровна** – студентка. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь).

### Information about the authors

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

**Farafontova Elena Valer'yevna** – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: farafontova@belstu.by

**Kulesh Aleksey Aleksandrovich** – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus).

**Rogach Alesya Aleksandrovna** – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus).

Поступила после доработки 14.04.2021

УДК 531.19; 538.911

**И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтова, А. А. Рогач, А. А. Кулеш**  
Белорусский государственный технологический университет

**ПРОВЕРКА СХОДИМОСТИ ИТЕРАЦИОННОЙ ПРОЦЕДУРЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ГЕТЕРОГЕННОЙ СИСТЕМЫ «КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ НАНОЧАСТИЦА – ГАЗООБРАЗНАЯ СРЕДА»**

В работе используется ранее полученная замкнутая система интегральных уравнений и соответствующих алгебраических соотношений, которая описывает структурные и термодинамические характеристики неоднородных (гетерогенных) молекулярных систем. Она получена в рамках двухуровневого статистического метода, который основывается на симбиозе метода коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), метода условных коррелятивных функций Ротта и метода термодинамических функционалов плотности.

Поле плотности в гетерогенной системе с наночастицами задается полем чисел заполнения ячеек, принадлежащих координационным сферам ГЦК решетки, используемой для описания структуры кристаллической наночастицы и окружающей ее газовой среды. Для численного определения профиля поля плотности наночастицы с учетом релаксации параметров ГЦК решетки на ее границе проведена модернизация компьютерной программы, которая ранее была разработана с использованием системы компьютерного проектирования MathCad. Вариационно-статистическим методом с помощью разработанной программы рассчитан профиль поля плотности наночастицы при температуре  $\theta = 0,6$ , которая соответствует равновесию с газообразной средой при температуре ниже тройной точки. Изучена сходимость численного процесса решения полной замкнутой системы интегральных уравнений итерационным методом.

**Ключевые слова:** двухуровневый статистический метод, вариационный метод, потенциал средних сил, гетерогенная система, наночастица, поле плотности.

**Для цитирования:** Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Рогач А. А., Кулеш А. А. Проверка сходимости итерационной процедуры решения системы интегральных уравнений для гетерогенной системы «кристаллическая наночастица – газообразная среда» // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 41–46.

**I. I. Narkevich, E. V. Farafontova, A. A. Rogach, A. A. Kulesh**  
Belarusian State Technological University

**VERIFICATION OF THE CONVERGENCE OF THE ITERATIVE SOLUTION PROCEDURE OF SYSTEM OF INTEGRAL EQUATIONS FOR HETEROGENEOUS SYSTEM «CRYSTALLINE NANOPARTICLE – GASEOUS ENVIRONMENT»**

The paper uses a closed system of statistical equations and formulas that determines the structural and thermodynamic characteristics of ununiform (heterogeneous) molecular systems. It has been obtained using the two-level statistical method, which is a symbiosis of the Bogolyubov – Born – Green – Kirkwood – Ivon (BBGKI) method of correlation, the Rott conditional distribution method, and the density thermodynamic functionals method.

The density field in heterogeneous system with nanoparticles is defined with field of filling numbers, belonging to coordination spheres of FCC-lattice being used for characterization the structure of nanoparticle and its surrounding gaseous environment. For numerical derivation of nanoparticle density field profile taking into account the relaxation of FCC-lattice parameters of its boundary, the computer program, developed before on base of MathCad computer-aided design system, has been modified. Using variation-statistical method, with this program was calculated the density field profile at temperature  $\theta = 0,6$ , which is the equilibrium point with gaseous environment below triple point. The convergence of the numerical process of solving a complete closed-loop system of integral equations by the iterative method was investigated.

**Key words:** two-level statistical method, variation method, potential of average forces, heterogeneous system, nanoparticle, density field.

**For citation:** Narkevich I. I., Farafontova E. V., Rogach A. A., Kulesh A. A. Verification of the convergence of the iterative solution procedure of system of integral equations for heterogeneous system «crystalline nanoparticle – gaseous environment». *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 41–46 (In Russian).

**Введение.** Ранее в работах [1–5] была изложена методика решения полной системы интегральных и алгебраических уравнений для гетерогенной системы, содержащей кристаллическую наночастицу внутри флюидной среды (газа или жидкости), которая разработана в рамках двухуровневого статистического метода [6, 7]. Он базируется на совместном использовании метода коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), метода условных распределений Ротта [8] и метода термодинамических потенциалов, которые в случае неоднородных систем являются функционалами поля плотности среды.

Двухуровневый статистический метод позволяет реализовать учет неоднородного распределения средних чисел заполнения  $n_i$  для молекул системы, которые статистически распределены в микроячейках объемами  $\omega_i$  метода условных распределений Ротта [8], форма и размеры которых претерпевают существенные изменения вблизи границ кристаллических наночастиц. Для этого используется  $F_{11}$ -приближение, которое учитывает множество наиболее вероятных состояний конденсированной системы из  $N$  молекул в объеме  $V$ , который разделен на микроячейки объемами  $\omega_i$  ( $i = 1, 2, \dots, M$ ).

Количество микроячеек  $M$  в этом приближении превышает число  $N$  молекул в наночастице и окружающей ее флюидной среде. Поэтому некоторые микроячейки с определенной вероятностью могут быть вакантными. В результате числа заполнения  $n_i$  ячеек меньше единицы, а поле их распределения по объему отражает неоднородность поля плотности в объеме наночастицы и окружающей среде.

В двухуровневом статистическом методе используются потенциалы  $\phi_{ij}$  средних сил [6, 7], которые в силу неоднородности гетерогенной системы являются функционалами от искомого поля чисел заполнения  $n_p$  ячеек, центры которых принадлежат координационным сферам с номерами  $p$  ( $p = 1, 2, \dots, P$ ) относительно центра сферической наночастицы.

Функционал свободной энергии неоднородной системы зависит от искомого профиля плотности через потенциалы  $\phi_{ij}$  средних сил, которые численно определяются в результате решения достаточно сложной системы статистических интегральных и алгебраических уравнений.

В модифицированной численной методике решения этой системы усреднения потенциала Леннарда-Джонса и других функций проводятся по областям локализации функций распределения в виде сфер с радиусами  $b_p$ , внутри которых унарные функции  $F_{11}^*$  считаются постоянными. Эти радиусы связаны со среднеквадратичными отклонениями  $\sigma_p$

молекул от узлов, принадлежащих координационным сферам с номерами  $p$  относительно центра наночастицы.

В результате макроструктура сферической наночастицы с неоднородным радиальным профилем плотности описывается дискретными наборами чисел заполнения  $n_p$  и радиусов  $b_p$  сфер. Поэтому искомые потенциалы  $\phi_{ij}$  средних сил оказываются наиболее сильно зависящими от значений чисел  $n_p$  и радиусов  $b_p$  сфер в ячейках, которые относятся к ближайшему окружению микроячеек  $\omega_i$  и  $\omega_j$  и принадлежат соответствующим координационным сферам с номерами  $p$ .

**Основная часть.** Решаемое в работе модифицированное интегральное уравнение для потенциалов средних сил неоднородной однокомпонентной системы с вакансиями имеет вид [1, 2, 5]

$$f_{ij}(\rho_i, b_j) = n_j g_{ij}(b_i, \rho_{ij}, b_j) f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) + (1 - n_j g_{ij}(b_i, \rho_{ij}, b_j)) f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j). \quad (1)$$

Здесь  $f_{ij}(\rho_i, b_j) = e^{-\beta \phi_{ij}(\rho_i, b_j)}$  ( $\beta = 1/\theta$  – обратная температура,  $\theta = kT$ ), а  $\phi_{ij}(\rho_i, b_j)$  – потенциал средней силы, действующий на молекулу в ячейке  $\omega_i$  со стороны молекулы, равномерно распределенной внутри сферы объемом  $v_j = (4/3)\pi b_j^3$  в ячейке  $\omega_j$ ;  $\rho_i$  – безразмерное расстояние от молекулы в объеме  $v_i$  до центра объема  $v_j$ , а  $g_{ij}$  – аналог радиальной функции для изучаемой гетерогенной системы, представляющей собой совокупность микроячеек, центры которых для молекулярных кристаллов образуют ГЦК решетку:

$$g_{ij} = \frac{n_{ij}}{n_i n_j}; \quad n_{ij} = n_i - n_{ij}^{av}; \quad (2)$$

$$n_{ij}^{av} = 0,5 B_{ij} + 0,5 \sqrt{B_{ij}^2 + 4n_i(1 - n_j) A_{ij}^{-1}}; \quad (3)$$

$$A_{ij} = f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j) - 1; \quad B_{ij} = (n_i - n_j) - \frac{1}{A_{ij}}, \quad (4)$$

где  $\rho_{ij}$  – безразмерное расстояние между центрами объемов  $v_i$  и  $v_j$ .

Функционалы  $f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j)$  и  $f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j)$  определяются следующими выражениями:

$$f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) = \frac{1}{v_j} \int_{v_j} e^{-\beta \Phi(\bar{q}_i - \bar{q}_j)} d v_j; \quad (5)$$

$$f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j) = \frac{1}{v_i} \int_{v_i} f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) d v_i. \quad (6)$$

Функционалы энтропии  $S$ , внутренней энергии  $U$  и свободной энергии  $F$  сферической наночастицы и окружающей ее флюидной среды рассчитываются по следующим формулам:

$$S\{n_p\} = -\sum_{p=1}^P Z_p (n_p \ln n_p + (1-n_p) \ln(1-n_p) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J n_p n_j g_{pj} \ln g_{pj}); \quad (7)$$

$$U\{n_p\} = \sum_{p=1}^P Z_p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J (n_p n_j g_{pj} \psi(b_p, r_{pj}, b_j)); \quad (8)$$

$$F\{n_p\} = U\{n_p\} - \theta S\{n_p\}. \quad (9)$$

Здесь  $Z_p$  – число узлов, принадлежащих координационной сфере с номером  $p$ ;  $J = 42$  – число узлов, принадлежащих трем координационным сферам с центрами, совпадающими с центром ячейки  $\omega_p$ , по узлам которых выполняется суммирование в уравнениях (7), (8).

$$\psi(b_i, \rho_{ij}, b_j) = \frac{\int_{v_i}^{\rho_{ij}^{(a)}} \int_{v_j}^{b_j} e^{-\beta\Phi(\bar{q}_i - \bar{q}_j)} d\nu_j d\nu_i}{\int_{v_i, v_j} e^{-\beta\Phi(\bar{q}_i - \bar{q}_j)} d\nu_j d\nu_i}. \quad (10)$$

Здесь

$$\varphi_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) = \frac{\int_{v_j} \Phi(\rho) e^{-\beta\Phi(\bar{q}_i - \bar{q}_j)} d\nu_j}{\int_{v_j} e^{-\beta\Phi(\bar{q}_i - \bar{q}_j)} d\nu_j}. \quad (11)$$

В численных расчетах все формулы и уравнения записаны в безразмерном виде, когда геометрические размеры определены в единицах линейного параметра  $\sigma$  потенциала Леннард-Джонса, а все величины, имеющие размерность энергии, определены в единицах энергетического параметра  $\varepsilon$  этого же потенциала.

Для сферической наночастицы поле плотности гетерогенной системы зависит только от расстояния  $r_p$  до центра наночастицы. Поэтому искомый радиальный профиль чисел заполнения  $n(r_p)$  аппроксимируется трехпараметрической функцией, содержащей гиперболический тангенс и два вариационных параметра  $a$  и  $\kappa$ , т. е.

$$n(r_p) = a - (a - n_\infty) \text{th}(\kappa \Delta r_p), \quad (12)$$

где  $n_\infty$  – значение чисел заполнения в объемной однородной окружающей среде.

Для сферической поверхности раздела фаз значения вариационных параметров  $a$  и  $\kappa$  находятся при решении вариационной задачи по отысканию минимума большого термодинамического потенциала  $\Omega\{n_p\} = F\{n_p\} - \mu \sum Z_p n_p$  наночастицы как функционала от искомого радиального профиля чисел заполнения  $n_p$ .

Полная замкнутая система интегральных и алгебраических уравнений (1)–(11) для гетерогенной

системы решалась численно методом итераций с помощью модернизированной ранее разработанной компьютерной программы в пакете MathCad. Вариационный расчет параметров  $a$  и  $\kappa$  для профиля плотности (12) в окрестности сферической кристаллической наночастицы, находящейся в равновесии с газообразной окружающей средой, проводился при температуре  $\theta = 0,6$ , что ниже тройной точки.

Проверка правильности и единственности полученных решений при заданном радиальном профиле плотности была выполнена в результате исследования сходимости разработанной итерационной процедуры.

Сходимость итерационной процедуры к искомому решению системы интегральных уравнений исследована при параметрах  $\kappa = 6$  и  $a = 0,045$ , которые задают радиальный профиль чисел заполнения  $n_p$  в газовой среде с кристаллической наночастицей, содержащей 15 координационных сфер. Граница наночастицы соответствует значению номера координационной сферы  $p = 15$ , для которого значение радиуса наночастицы  $r_{15} = 4,38$  в единицах линейного параметра  $\sigma$  потенциала Леннард-Джонса. Например, для аргона  $\sigma = 3,405 \text{ \AA}$ , следовательно, радиус наночастицы  $r_{15} = 4,38 \times 3,405 = 14,9 \text{ \AA} = 1,49 \text{ нм}$ .

Для исследования сходимости итерационной процедуры решения замкнутой системы уравнений задавался пробный профиль среднеквадратичных отклонений  $\sigma_p^{\text{mp}}$ , соответствующий макроскопическому кристаллу со значением  $\sigma_p^{\text{mp}} = \text{const}$ , которое отличалось от предполагаемого либо ранее найденного решения для ячейки в центре сферической наночастицы. Проведены две серии итерационных расчетов. В первом случае  $\sigma_p^{\text{mp}} = 0,132$  ( $b_p^{\text{mp}} = 0,170$  – параметр, определяющий область локализации унарной функции распределения в ячейке с номером  $p$ ), что меньше, чем найденное ранее решение для центральной ячейки ( $\sigma_0 = 0,149$ ,  $b_0 = 0,192$ ). Во втором случае  $\sigma_p^{\text{mp}} = 0,183$  ( $b_p^{\text{mp}} = 0,220$ ), что больше, чем найденное ранее решение для центральной ячейки ( $\sigma_0 = 0,149$ ,  $b_0 = 0,192$ ). Результаты проведенных итерационных решений системы интегральных уравнений приведены на рис. 1, а, б.

Из сравнения профилей на рис. 1, а, б видно, что как в первом, так и во втором случае профили среднеквадратичных отклонений  $\sigma_p$  в процессе выполнения итерационной процедуры постепенно деформируются и приближаются к одному и тому же решению, которое практически реализуется уже после 10-й итерации. Это наглядно видно из анализа соответствующих профилей, изображенных на рис. 2, где итерационные кривые для первого случая пронумерованы числами  $i^*$ , а для второго случая – числами  $i$ .

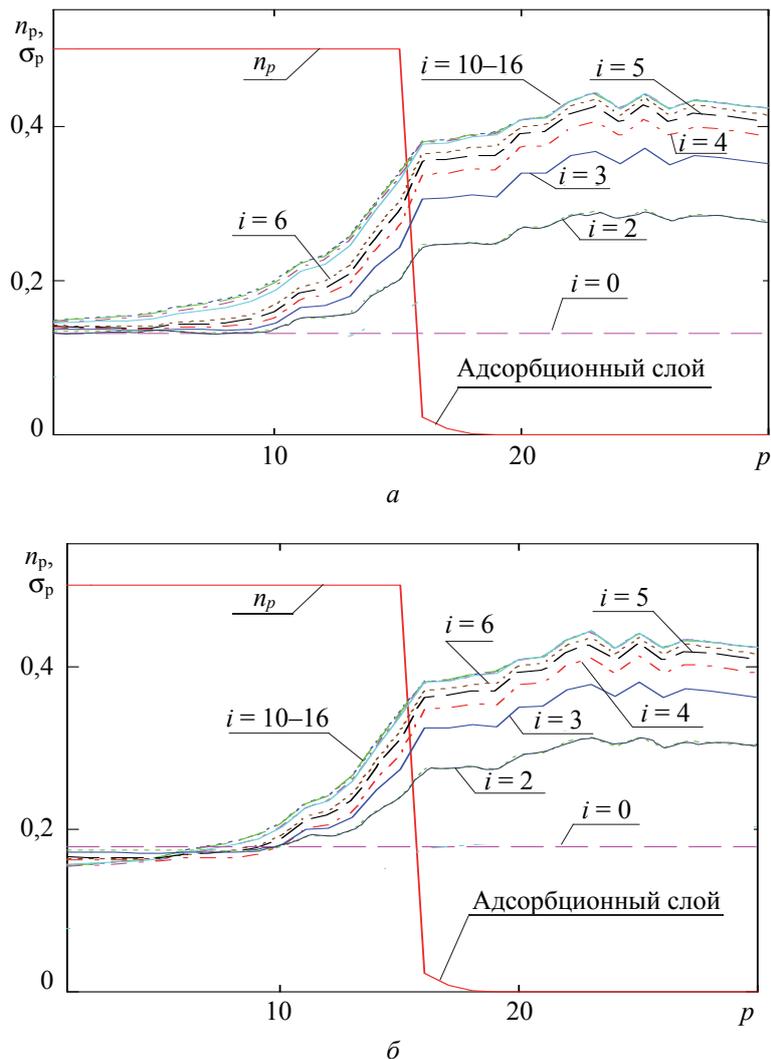


Рис. 1. Заданный радиальный профиль чисел заполнения  $n_p$  для наночастицы и адсорбционного слоя ( $\theta = 0,6$ ;  $a = 0,045$ ;  $\kappa = 6$ ;  $n_\infty = 2 \cdot 10^{-5}$ ), а также рассчитанные зависимости среднеквадратичных отклонений  $\sigma_p$  молекул от номеров  $p$  координационных сфер для итераций с номерами:  $a - i = 0, 2-6, 10-16$  при  $\sigma_p^{np} = 0,132$ ;  $b - i = 0, 2-6, 10-16$  при  $\sigma_p^{np} = 0,183$

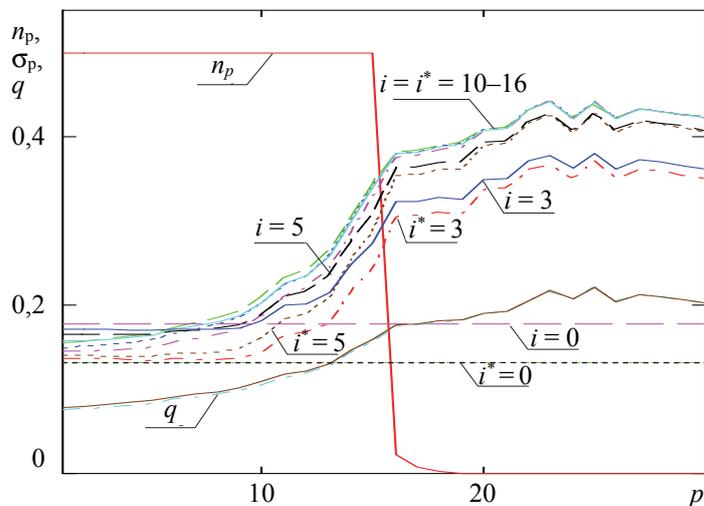


Рис. 2. Заданный радиальный профиль чисел заполнения  $n_p$  для наночастицы и адсорбционного слоя ( $\theta = 0,6$ ;  $a = 0,045$ ;  $\kappa = 6$ ;  $n_\infty = 2 \cdot 10^{-5}$ ), а также рассчитанные зависимости среднеквадратичных отклонений  $\sigma_p$  молекул от номеров  $p$  координационных сфер для итераций с номерами  $i = i^* = 0, 3, 5, 10-16$

**Заключение.** В работе численно реализована итерационная процедура решения системы интегральных и алгебраических уравнений для заданного равновесного радиального профиля плотности сферической наночастицы с использованием функционалов свободной энергии и большого

термодинамического функционала гетерогенной системы: кристаллическая наночастица в равновесии с окружающей объемной газообразной фазой. В результате изучена сходимость численного итерационного процесса решения полной системы уравнений.

### Список литературы

1. Решение модифицированного интегрального уравнения для потенциалов средних сил и расчет параметров фазовых переходов в гетерогенных системах, содержащих кристаллические наночастицы / И. И. Наркевич [и др.] // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2020. № 2 (236). С. 48–56.
2. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В. Разработка компьютерной программы для расчета структурных и термодинамических характеристик кристаллических наночастиц разных размеров // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2019. № 2 (224). С. 34–39.
3. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Two-level statistical description of structure of homogeneous macroscopic system and spherical crystalline nanoparticles // *Nanoscience and Technology: An International Journal*. 2019. № 10 (4). P. 365–376.
4. Статистический расчет термодинамических параметров фазовых переходов и структуры сферических кристаллических наночастиц в гетерогенных молекулярных системах / И. И. Наркевич [и др.] // Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах: сб. науч. ст. Минск, 2020. С. 134–139.
5. Разработка методики установления корреляции между структурой и термодинамическими характеристиками кристаллических наночастиц в рамках двухуровневого молекулярно-статистического метода описания неоднородных систем с учетом релаксации решетки на их границах: науч. исслед. работа / Белорус. гос. технол. ун-т; рук. темы И. И. Наркевич. Минск, 2020. 31 с. № ГР 20192224.
6. Наркевич И. И. Двухуровневый статистический метод описания неоднородных систем. Нордерштедт: LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2019. 114 с.
7. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. СПб., 1993. 223 с.
8. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.

### References

1. Narkevich I. I., Farafontova E. V., Kulesh A. A., Rogach A. A. Solution of the Modified Integral Equation for Medium Force Potentials and Calculation of the Parameters of Phase Transitions in Heterogeneous Systems Containing Crystalline Nanoparticles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2020, no. 2 (236), pp. 48–56 (In Russian).
2. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Development of a Computer Program for the Calculating of the Structural and Thermodynamic Characteristics of Crystalline Nanoparticles of Different Sizes. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2019, no. 2 (224), pp. 34–39 (In Russian).
3. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Two-level Statistical Description of Structure of Homogeneous Macroscopic System and Spherical Crystalline Nanoparticles. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2019, no. 10 (4), pp. 365–376.
4. Narkevich I. I., Farafontova E. V., Kulesh A. A., Rogach A. A. Statistical calculation of Thermodynamic Parameters of Phase Transitions and the Structure of Spherical Crystalline Nanoparticles in Heterogeneous Molecular Systems. *Fullereny i nanostruktury v kondensirovannykh sredakh* [Fullerenes and nanostructures in condensed matter]. Minsk, 2020, pp. 134–139 (In Russian).
5. *Razrabotka metodiki ustanovleniya korrelyatsii mezhdru strukturoy i termodinamicheskimi kharakteristikami kristallicheskikh nanochastiits v ramkakh dvukhurovneвого molekulyarno-statisticheskogo metoda opisaniya neodnorodnykh sistem s uchetom relaksatsii reshetki na ikh granitsakh* [Development of a method for establishing a correlation between the structure and thermodynamic characteristics of crystalline nanoparticles within the framework of a two-level molecular-statistical method for describing inhomogeneous systems taking into account the relaxation of the lattice at their boundaries]. Topic leader I. I. Narkevich. Minsk, 2020. 31 p. No. SR 20192224.
6. Narkevich I. I. *Dvukhurovnevyy statisticheskiy metod opisaniya neodnorodnykh sistem. Simbioz metodov korrelyativnykh funktsiy i termodinamicheskikh funktsionalov plotnosti* [Two-level statistical method for describing heterogeneous systems. Symbiosis of methods of correlative functions and thermodynamic functionals of density]. Norderstedt, LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2019. 114 p.

7. Narkevich I. I. *Molekulyarno-statisticheskaya teoriya neodnorodnykh kondensirovannykh sred. Dis. d-ra fiz.-mat. nauk* [Molecular-statistical theory of the non-homogeneous condensed matter. Doct. Diss.]. St. Petersburg, 1993. 223 p.

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

#### Информация об авторах

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

**Фарафонтова Елена Валерьевна** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: farafontova@belstu.by

**Рогач Алеся Александровна** – студентка. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь).

**Кулеш Алексей Александрович** – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь).

#### Information about the authors

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

**Farafontova Elena Valer'yevna** – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: farafontova@belstu.by

**Rogach Alesya Aleksandrovna** – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus).

**Kulesh Aleksey Aleksandrovich** – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus).

*Поступила после доработки 14.04.2021*

УДК 537.534:539.23

**О. Г. Бобрович**

Белорусский государственный технологический университет

**ФОРМИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ МЕТОДОМ ВАКУУМНОГО  
ОСАЖДЕНИЯ КОБАЛЬТА И МОЛИБДЕНА НА ГРАФИТ**

В статье рассматривается элементный состав покрытия, распределение элементов в покрытии и их химические связи при формировании структуры покрытие – подложка в системах Мо – графит и Со – графит, создаваемых нанесением многокомпонентного, металлического (Мо, Со) покрытия в условиях ассистирования ионами  $\text{Mo}^+$  и  $\text{Co}^+$  соответственно. Анализ выполнен с применением методов Резерфордского обратного рассеяния ионов гелия и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. В покрытии, кроме осаждаемого металла, содержатся высокие концентрации кислорода и углерода, а также кремний в результате встречной диффузии из подложки в покрытие. Результаты анализа спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показали, что в системе Мо – графит молибден находится как в виде металлического Мо, так и в виде оксида  $\text{MoO}_2$ . Толщина покрытия увеличивается с уменьшением ускоряющего напряжения для ассистирующих ионов  $\text{Co}^+$ ,  $\text{Mo}^+$  от 20 до 7 кВ и зависит как от отношения плотности потока ионов  $J_i$  к плотности потока нанесенных атомов  $J_a$  ( $J_i / J_a$ ), так и типа осаждаемого на графит металла. Установлено, что оптимальное отношение  $J_i / J_a$ , при котором достигается наибольшая толщина Со-покрытий, составляет 0,01, а для Мо-покрытия – 0,18. Рассчитанные скорости осаждения покрытий составили от 0,3 до 0,9 нм/мин для системы Со – графит и от 0,2 до 0,4 нм /мин для систем Мо – графит.

**Ключевые слова:** графит, Со-покрытие, Мо-покрытие, ионно-ассистируемое нанесение покрытия.

**Для цитирования:** Бобрович О. Г. Формирование поверхностного слоя методом вакуумного осаждения кобальта и молибдена на графит // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 47–52.

**O. G. Bobrovich**

Belarusian State Technological University

**FORMATION OF THE SURFACE LAYER BY VACUUM DEPOSITION  
OF COBALT AND MOLYBDENUM ON GRAPHITE**

Analysis of chemical bonds, element composition and depth distribution of component in coating formed by self ion-assisted deposition of metal (Mo, Co) onto graphite using a method in which the metal deposition was accompanied by bombardment  $\text{Mo}^+$  or  $\text{Co}^+$  ions is reported. Analysis was carried out using Rutherford back scattering and X-ray photoelectric spectroscopy methods. Elemental analysis of the coatings on graphite shows a high content of carbon, oxygen and of the silicon as a result of counter-diffusion from the substrate into the coating. The findings have allowed to determine the presence of metal Mo and Mo oxide fractions. Thickness of the coatings are increases with the decrease of the accelerating voltage for assisting  $\text{Co}^+$ ,  $\text{Mo}^+$  ions from 20 to 7 kV and depends on the relationship of the flux density of ions  $J_i$  to the flux density of deposited atoms  $J_a$  ( $J_i / J_a$ ) and type deposited on graphite metal. It is established that the optimal ratio of  $J_i / J_a$  at which is reached the maximum thickness Co-coating is 0,01 and for Mo-coating – 0,18. The calculated average deposition rate of the coating was 0,3–0,9 nm/min for the Co – graphite system and 0,2–0,4 nm/min for the Mo – graphite system.

**Key words:** graphite, Co-coating, Mo-coating, self-ion-assisted deposition of coating.

**For citation:** Bobrovich O. G. Formation of the surface layer by vacuum deposition of cobalt and molybdenum on graphite. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 47–52 (In Russian).

**Введение.** Среди известных методов модифицирования свойств поверхности материалов и изделий ионная имплантация имеет физические ограничения по введению требуемых концентраций легирующих примесей, как правило, оцениваемых в 10–15 ат. % [1, 2]. Новым этапом является технология нанесения покрытий, сопровождающаяся облучением ионами инертных газов [3]. Перемешивание атомов подложки и

осаждаемого покрытия ускоренными ионами на границе раздела покрытие – подложка, как правило, инертных газов, нередко технически затруднено, так как требуются высокие (100 кэВ и выше) энергии ионов газов. Метод ионно-лучевого ассистируемого осаждения покрытий рассматривается как наиболее перспективный для модифицирования свойств поверхности материалов. Его применение обеспечивает сцепление наносимой на

поверхность тонкой пленки с матрицей на атомном уровне, при этом размеры и состав наносимых слоев по толщине не ограничиваются, и слои могут обладать требуемой структурой и свойствами [4]. Принципиальным недостатком методов ионно-лучевого асистируемого осаждения и ионно-лучевого перемешивания является неизбежное введение ионным пучком значительных (до 5–15 ат. %) количеств нежелательных примесей, локализующихся в области границы раздела. Газовые примеси при этом, как известно, преципитируют в форме пузырьков, ухудшая характеристики слоев, способствуя деградации свойств и параметров поверхностей материалов, особенно полупроводниковых.

При выполнении настоящей работы в качестве ионов, перемешивающих атомы материала подложки и наносимого покрытия, использовались ионы материала покрытия. Этим, во-первых, исключается введение нежелательных примесей в модифицируемую поверхность, следовательно, создаются предпосылки получения качественно новых свойств поверхности с нанесенным покрытием. Во-вторых, из-за увеличения массы иона каскад столкновения, который образуется при торможении ионов, имеет меньшие продольный и поперечные размеры, чем каскад столкновений, создаваемый в том же материале ионами, например, аргона с равной энергией. При таком изменении энерговыделения в области границы раздела фаз можно ожидать проявления неизученных механизмов структурно-фазовых превращений, атомного перемешивания и, как результат, достижения лучших характеристик и параметров модифицированных поверхностей.

Настоящее исследование направлено на получение новых знаний о процессах и механизмах атомного перемешивания на границе покрытие – подложка, которая формируется при ионно-асистируемом осаждении Co и Mo покрытий на графит. Модифицирование поверхностного слоя графита нанесением тонких покрытий Co и Mo сопровождается облучением ионами  $Co^+$  и  $Mo^+$  и происходит в условиях управляемой плотности выделяемой энергии (ПВЭ) в объеме каскада атомных столкновений.

**Основная часть.** Ионно-асистируемое нанесение металлических (Co, Mo) покрытий на графит и на предварительно подготовленные структуры металл – графит (металл: Co, Mo) в условиях асистируемого осаждения ускоренными ионами  $Co^+$ ,  $Mo^+$  осуществлялось при ускоряющем напряжении  $U = 7, 15$  и  $20$  кВ. Для этого использовали импульсный ионный источник вакуумной электродуговой плазмы, который генерирует как нейтральный поток  $J_a$ , так и ионный поток  $J_i$  частиц наносимого металла [5]. Как видно из табл. 1, отношение  $J_i / J_a$  в наших экспериментах

менялось от 0,01 до 0,04 при осаждении Co и от 0,18 до 0,61 при осаждении Mo, что соответствовало условиям роста покрытия на подложке [6]. Структуры Co – графит и Mo – графит формировали осаждением соответствующего металла в течение одного часа в режиме работы ионного источника при нулевом значении ускоряющего напряжения. В рабочей камере в процессе модифицирования образцов графита поддерживался вакуум  $\sim 10^{-2}$  Па.

Таблица 1

**Параметры ионно-асистируемого нанесения покрытий**

Подложка + осаждаемый металл	$U$ , кВ	$J_i$ , $10^{13}$ ион/ $(\text{см}^2 \cdot \text{с})$	$J_a$ , $10^{15}$ атом/ $(\text{см}^2 \cdot \text{с})$	$J_i / J_a$
Графит + Co, Co – графит + + Co	7	2,9	2,1	0,01
	15	4,4	2,0	0,02
	20	7,3	1,8	0,04
Графит + Mo, Mo – графит + + Mo	7	1,7	9,4	0,18
	15	2,5	4,8	0,52
	20	2,5	4,1	0,61

Элементный состав поверхности образцов графита, модифицированных ионно-асистируемым осаждением покрытия, распределение элементов в покрытии и подложке, а также их химические связи изучены с применением методов резерфордского обратного рассеяния (РОР) ионов гелия и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Спектры РОР ионов гелия с энергией  $E_0 = 1,5$  МэВ снимали в условиях геометрии рассеяния  $\theta_1 = 50^\circ$ ,  $\theta_2 = 70^\circ$ ,  $\theta = 160^\circ$ . Спектры РФЭС снимали на электронном спектрометре LHS-10 («Leybold» WG) с использованием  $MgK_{\alpha}$ -излучения. В качестве маркера для определения точного значения энергетической линии на спектре РФЭС использовался сигнал  $Au_{4f}$ , а послойный анализ образцов проводился с помощью травления ионами  $Ag^+$  с энергией 3 кэВ со скоростью 0,5–1,0 нм/мин. Композиционный состав исходного образца графита, полученный компьютерным моделированием РОР по программе RUMP [7] спектра РОР, соответствует формуле  $C_{97,4}O_{2,0}Si_{0,6}$ .

На рис. 1 представлены спектры обратного рассеяния ионов гелия от поверхностного слоя структур Co – графит, модифицированных осаждением кобальта при разных значениях ускоряющего напряжения для асистирующих ионов  $Co^+$ .

Стрелками на рис. 1 отмечены номера каналов, которые связаны с энергиями рассеяния ионов гелия на атомах соответствующих элементов, локализованных на поверхности образцов. В числе элементов, находящихся в поверхностном слое исследуемых образцов, кроме наносимого металла также наблюдаются сигналы от C, O, Si. Наличие

в покрытии углерода и кислорода обусловлено конструктивными особенностями используемого импульсного ионного источника вакуумной электродуговой плазмы. Углерод и кислород являются технологическими примесями вакуума, созданного паромасляным диффузионным насосом, и вводятся в покрытие в процессе осаждения.

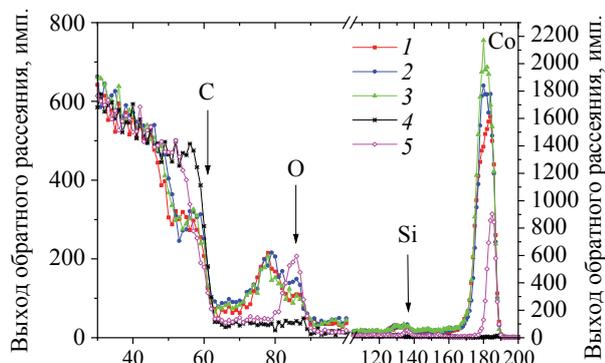


Рис. 1. Спектры РОР ионов гелия от структур Со – графит, модифицированных осаждением Со в условиях ассистирования ионами Со<sup>+</sup> при ускоряющем напряжении: 1 – 7 кВ; 2 – 15 кВ; 3 – 20 кВ и 4 – исходного образца графита; 5 – от структуры Со – графит

Анализ спектров ОР ионов гелия показывает наличие характерной ступеньки в области 45–60 каналов, говорящей о росте тонкой пленки и одновременном нарастании углеродного слоя на поверхности образцов структур Со – графит. В то же время поверхностный слой обогащен кислородом и в меньшей степени кремнием, что следует из динамики изменения выхода ионов гелия, рассеянных на атомах примесей кислорода и кремния. Появление этих компонентов в образце обусловлено процессами ионно-ассистируемого осаждения покрытий, обсужденными выше.

Различие в спектрах 1, 2 и 3 на рис. 1 отражает факт осаждения на образцы графита более толстого покрытия тогда, когда используется наименьшее ускоряющее напряжение ( $U = 7$  кВ) для ионов Со<sup>+</sup>, несмотря на то, что в этих условиях проецированный пробег ионов в графите также самый малый и составляет  $R_p = 11,5$  нм (табл. 2). Качественно сравнимое изменение в спектрах РОР наблюдается при осаждении на графитовую мишень Мо покрытия, ассистируемого ионами Мо<sup>+</sup>. Осаждение покрытий на предварительно подготовленные структуры металл – графит ведет к более интенсивному росту тонкого покрытия. Рассчитанные скорости осаждения покрытий составляли от 0,3 до 0,9 нм/мин для системы Со – графит и от 0,2 до 0,4 нм /мин для систем Мо – графит.

Результаты обработки спектров РФЭС свидетельствуют о том, что по основным компонентам

элементного состава, идентифицируемого этим методом, качественно согласуются с данными, полученными в независимых опытах с применением резерфордского обратного рассеяния ионов гелия.

Таблица 2

**Пробег и страгглинг пробега ионов металлов в графите**

Показатель	Ионы					
	Со			Мо		
$U$ , кВ	7	15	20	7	15	20
$R_p$ , нм	11,5	20,4	25,2	13,2	21,8	26,7
$\Delta R_p$ , нм	2,8	4,6	5,5	2,7	4,0	4,9

На рис. 2 показаны профили глубинного распределения элементов в покрытии и подложке при нанесении Мо при ассистировании ионами Мо<sup>+</sup> на графит и структуру Мо – графит, полученные моделированием спектров. Профиль Мо характеризуется концентрацией, снижающейся от 3 ат. % на поверхности модифицированного образца до 2 ат. % в области границы раздела покрытие – подложка, которая определяется согласно ранее разработанной методике [8]. Кислород распределен в покрытии неравномерно: его концентрация уменьшается с 30 ат. % на поверхности покрытия до 10 ат. % вблизи границы покрытие – подложка, а в графите его концентрация остается выше, чем концентрация Мо. В случае ионно-ассистируемого нанесения Мо при  $U = 20$  кВ на структуры Мо – графит концентрация Мо увеличивается до 10 ат. % в поверхностном слое, а распределение кислорода и кремния в покрытии и подложке аналогично, что и в случае осаждения Мо на графит. Распределение кремния по всей толщине покрытия практически не изменяется и составляет около 1 ат. %.

Уменьшение ускоряющего напряжения для ассистирующих ионов Мо<sup>+</sup> до значений 7 и 15 кВ приводит к росту концентрации молибдена в поверхностном модифицированном слое до 12–20 ат. %, причем концентрация в 1,5–2,0 раза выше, если осаждение осуществляется на структуры Мо – графит. Анализ профилей распределения элементов в покрытии и подложке при нанесении Со и ассистировании ионами Со<sup>+</sup> на графит и структуру Со – графит показывает, что содержание кобальта плавно уменьшается с ~22 до ~10 ат. % от поверхности пленки к границе раздела покрытие – подложка. При этом распределение атомов примеси кислорода, входящего в покрытие, имеет пик у границы раздела, а атомная концентрация меняется от 8 до 10–20 ат. %. Содержание кислорода в покрытии больше в системе Мо – графит, в сравнении с системой Со – графит, что связано с повышенной способностью

молибдена взаимодействовать с кислородом. Распределение кобальта и молибдена в подложке соответствует пробегаем с учетом страгглинга пробега ионов металлов в графите (табл. 2). Распределение кремния и в этом случае по всей толщине покрытия практически не изменяется и составляет около 1 ат. %. Появление в изучаемых покрытиях Si объясняется радиационным усилением диффузии в процессе облучения системы покрытие – подложка ассистирующими ионами, что приводит к миграции атомов Si из подложки в покрытие.

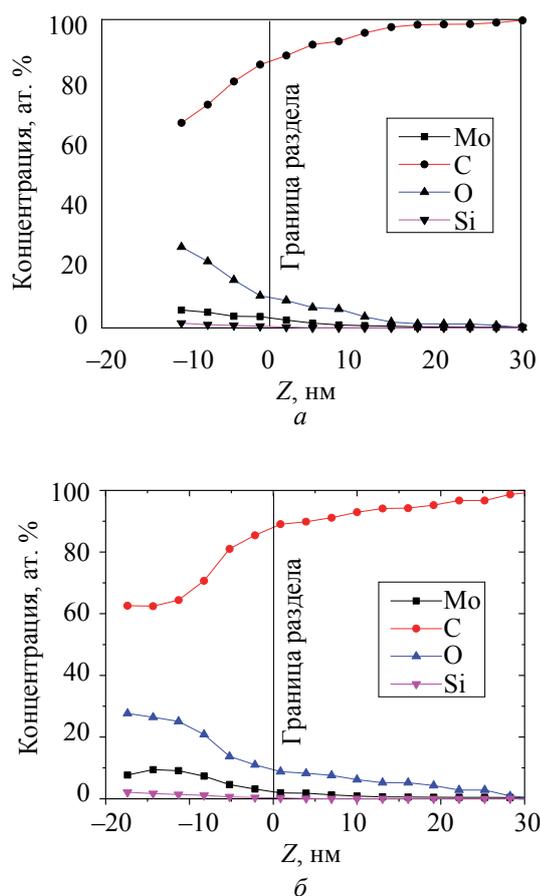


Рис. 2. Профили элементов в графите (а) и структуре Мо – графит (б) после нанесения Мо в условиях ассистирования ионами  $\text{Mo}^+$  при ускоряющем напряжении  $U = 20$  кВ

В данном исследовании одним из параметров, в зависимости от которого анализировалось глубинное распределение элементов, входящих и в покрытие, и в подложку, рассматривается плотность выделяемой энергии в упругих процессах каскада атомных столкновений. С этим параметром ассоциируется вероятность фазообразования, в том числе и образование химических соединений в формируемом покрытии, и процессы радиационно-стимулированной диффузии. Интервал выбранных энергий ионов  $\text{Co}^+$  и  $\text{Mo}^+$  достаточен для того, чтобы получить различные

значений ПВЭ [9] в одинаковых системах. Десятикратное различие в ПВЭ было получено в изучаемых системах  $\text{Co}$  – графит и  $\text{Mo}$  – графит, в которых ускоряющее напряжение менялось от 7 до 20 кВ. Абсолютные значения ПВЭ изменялись от 0,18 эВ/ат ( $U = 7$  кВ) до 0,02 эВ/ат ( $U = 20$  кВ) для системы  $\text{Co}$  – графит и от 0,27 эВ/ат ( $U = 7$  кВ) до 0,03 эВ/ат ( $U = 20$  кВ) для системы  $\text{Mo}$  – графит.

Значения атомной концентрации на межфазной границе покрытие – подложка (рис. 3) показывают, что при росте ПВЭ концентрация металла увеличивается. Это свидетельствует о повышенном проникновении наносимого металла в подложку графита с увеличением ПВЭ.

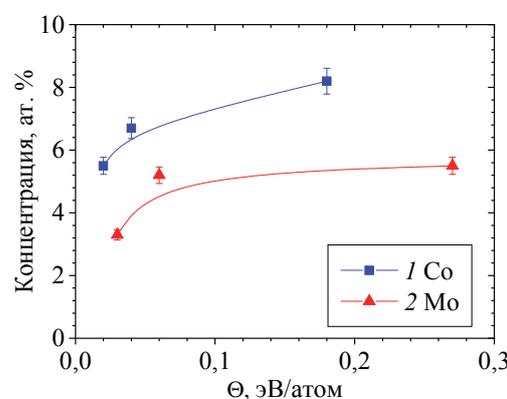


Рис. 3. Зависимость концентрации  $\text{Co}$ ,  $\text{Mo}$  на границе раздела покрытие – графит от ПВЭ: 1 – в системе  $\text{Co}$  – графит; 2 – в системе  $\text{Mo}$  – графит

Глубинные профили углерода на рис. 2 показывают, что в изученных системах металл – графит в целом наблюдается очевидная зависимость эффективности процессов атомного переноса от ПВЭ. С другой стороны, влияние ПВЭ на модифицирование свойств облучаемых структур не одинаково и зависит от вида выбранной системы, а также, возможно, от концентрации примеси и ее химического состояния.

РФЭС-спектр поверхности нетравленного образца содержал линии трех элементов: молибдена, кислорода и углерода. Для точного спектрального анализа были выбраны наиболее характерные и интенсивные линии:  $\text{Mo}3d$ -молибдена и  $\text{C}1s$ -углерода. Структура спектра  $\text{Mo}3d$  свидетельствует о том, что в поверхностном слое молибден находится как в виде  $\text{Mo}$  ( $E_{\text{св}} \sim 228,6$  эВ), так и в виде  $\text{MoO}_2$  ( $E_{\text{св}} \sim 229,5$  эВ). Послойное ионное травление модифицированных образцов графита нанесением  $\text{Mo}$  в условиях ассистирования ионами  $\text{Mo}^+$  позволило на разных глубинах ( $\sim 12,5$  нм,  $\sim 22,5$  нм,  $\sim 42,5$  нм) оценить количественное соотношение между  $\text{Mo}$  и  $\text{MoO}_2$ , которое по всей исследуемой глубине практически

не изменяется и составляет 60% и 40%. Тонкая структура спектра C1s свидетельствует о том, что на тех же глубинах находится графитоподобный углерод ( $E_{св} \sim 284,7$  эВ). Наличие оксида Мо приводит к существенному затруднению при идентификации карбида из-за наложения спектральных линий.

**Заключение.** Независимыми взаимодополняющими методами РОР и РФЭС установлено, что в поверхностном слое исследуемых структур металл – графит, наряду с осаждаемым металлом в условиях асситирования ионами того же металла, содержатся углерод, кислород и кремний. Наличие этих элементов в покрытии обусловлено спецификой осаждения металл(Сo, Мо)-покрытия из импульсного источника вакуумной электродуговой плазмы, внедрением элементов остаточных газов в мишенной камере, а также диффузией сопутствующей примеси кремния из графита в покрытие в результате ионного асситирования нанесению тонких пленок на графит.

Установлен характер распределения элементов в поверхностных слоях подложки графита и

покрытиях. В соответствии с известными моделями ионно-лучевого перемешивания атомный перенос в системе металл – графит зависит от плотности энергии, выделяемой в упругих процессах каскада атомных столкновений. Выполненные эксперименты проведены в условиях перекрывающихся подкаскадов, и они удовлетворяют модели «глобального» пика. Однако в данном случае химические силы, такие как теплота перемешивания, энергия когезии и другие, могут играть важную роль, что было отмечено в работе [3] при изучении систем Cu – Al, Fe – Pd, сформированных методами ионно-лучевого перемешивания (IBM), и в других работах по ионно-ассистированному осаждению покрытий (IBAD) [10–12].

Информация, полученная в данной работе об элементном составе, характере распределения металла и сопутствующих примесей в покрытии и подложке, является важной для понимания особенностей физико-химических процессов при нанесении Сo, Мо покрытий на графит в условиях асситирования ионами осаждаемого металла.

#### Список литературы

1. Hirvonen J. K. Ion beam assisted thin film deposition: Fundamentals and Applications of IBAD Processing // *Materials and Processes for Surface and Interface Engineering* / Y. Pauleau (ed.). Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1995. P. 307–346.
2. Pearton S. J. Ion implantation in III-V semiconductor technology // *International Journal of Modern Physics B*. 1993. Vol. 7, no. 28. P. 4687–4761.
3. On the efficiency of deposited energy density for ion beam mixing processes with ions implanted during and after thin metal film deposition / I. S. Tashlykov [et al.] // *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* 1993. Vol. B80/81. P. 98–101.
4. Baglin J. E. Interface structure, adhesion, and ion beam processing // *Materials and Processes for Surface and Interface Engineering* / Y. Pauleau (ed.). Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1995. P. 111–149.
5. Бобрович О. Г., Ташлыков И. С. Формирование на графите металлсодержащих покрытий в условиях ионного асситирования // *Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы 5-й Международ. конф., Минск, 6–9 окт. 2003 г. Минск, 2003. С. 326–328.*
6. Carter G., Colligon J., Tashlykov I. S. A simple theory and experimental investigation of ion assisted deposition of cobalt on silicon // *J. of Advanced Materials*. 1999. Vol. 5, no. 1. P. 1–6.
7. Doolittle L. R. A semiautomatic algorithm for Rutherford backscattering analysis // *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* 1986. Vol. B15. P. 227–238.
8. Бобрович О. Г., Ташлыков И. С., Глухатаренко Т. И. Изучение границы раздела фаз в структуре Ti – Si с применением Хе маркера // *Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика*. 2005. Вып. XIII. С. 90–92.
9. Sigmund P. Energy density and time constant of heavy-ion-induced elastic-collision spikes in solids // *Appl. Phys. Lett.* 1974. Vol. 25, no. 3. P. 169–171.
10. Deposition of metal layers on carbon assisted with the same metal's ion radiation / I. S. Tashlykov [et al.] // *Surf. Coat. Technol.* 1995. Vol. 74–75. P. 945–948.
11. Bobrovich O. G., Mikhalkovich O. M., Tashlykov I. S. Composition and morphology of Ti and W coatings deposited on silicon during ion-beam assistance // *Inorganic Materials: Applied Research*. 2015. Vol. 6, no. 3. P. 229–233.
12. Ion beam assisted deposition of tantalum nitride thin films for vacuum microelectronic devices / Y. Gotoh [et al.] // *Surf. Coat. Technol.* 2002. Vol. 158–159. P. 729–731.

#### References

1. Hirvonen J. K. Ion beam assisted thin film deposition: Fundamentals and Applications of IBAD Processing. *Materials and Processes for Surface and Interface Engineering*. Y. Pauleau (ed.). Netherlands, Kluwer Academic Publishers, 1995, pp. 307–346.

2. Pearton S. J. Ion implantation in III-V semiconductor technology. *International Journal of Modern Physics B*, 1993, vol. 7, no. 28. pp. 4687–4761.
3. Tashlykov I. S., Belyi I. M., Bobrovich O. G., Kalbitzer S., Meyer O., Wolf G. K., Enders B. On the efficiency of deposited energy density for ion beam mixing processes with ions implanted during and after thin metal film deposition. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, 1993, vol. B80/81, pp. 98–101.
4. Baglin J.E. Interface structure, adhesion, and ion beam processing. *Materials and Processes for Surface and Interface Engineering*. Y.Pauleau (ed.). Netherlands, Kluwer Academic Publishers, 1995, pp. 111–149.
5. Bobrovich O. G., Tashlykov I. S. Formation of metalliferous coats on graphite by means of ion assisted deposition. *Vzaimodeystviye izlucheniya s tverdyim telom: materialy 5-y Mezhdunarodnoy konferentsii* [Interaction of Radiation with Solid: Materials of the 5-th International Conference]. Minsk, 2003, pp. 326–328 (In Russian).
6. Carter G., Colligon J., Tashlykov I. S. A simple theory and experimental investigation of ion assisted deposition of cobalt on silicon. *J. of Advanced Materials*, 1999, vol. 5, no. 1, pp. 1–6.
7. Doolittle L. R. A semiautomatic algorithm for Rutherford backscattering analysis. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, 1986, vol. B15, pp. 227–238.
8. Bobrovich O. G., Tashlykov I. S., Gluhatarenko T. I. The study of the phase boundary in the structure Ti – Si using marker Xe. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physics and Mathematics Informatics, 2005, issue XIII, pp. 90–92 (In Russian).
9. Sigmund P. Energy density and time constant of heavy-ion-induced elastic-collision spikes in solids. *Appl. Phys. Lett.*, 1974, vol. 25, no. 3, pp. 169–171.
10. Tashlykov I. S., Bobrovich O. G., Palchek V. Ch., Tuljev V. V., Alow N. V., Kulikauskas V. S., Wolf G. K. Deposition of metal layers on carbon assisted with the same metal's ion radiation. *Surf. Coat. Technol.*, 1995, vol. 74–75, pp. 945–948.
11. Bobrovich O. G., Mikhalkovich O. M., Tashlykov I. S. Composition and morphology of Ti and W coatings deposited on silicon during ion-beam assistance. *Inorganic Materials: Applied Research.*, 2015, vol. 6, no. 3, pp. 229–233.
12. Gotoh Y., Kagamimori K., Tsuji H., Ishikawa J. Ion beam assisted deposition of tantalum nitride thin films for vacuum microelectronic devices. *Surf. Coat. Technol.*, 2002, vol. 158–159, pp. 729–731.

#### Информация об авторе

**Бобрович Олег Георгиевич** – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: olegbobrovich@belstu.by

#### Information about the author

**Bobrovich Oleg Georgievich** – 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: olegbobrovich@belstu.by

Поступила после доработки 01.04.2021

УДК 537.633.2

**В. Р. Мадьяров**

Белорусский государственный технологический университет

**ВЛИЯНИЕ МАГНИТОПЛАЗМЕННЫХ ЭФФЕКТОВ НА ПРОХОЖДЕНИЕ СУБМИЛЛИМЕТРОВЫХ ВОЛН ЧЕРЕЗ ПОЛУПРОВОДНИКИ**

Одним из способов эффективного управления пропусканием полупроводника в области частот 50–300 ГГц является создание достаточно большой концентрации носителей в объеме полупроводника, помещенного в магнитное поле, внешним источником ионизирующего излучения. В этом диапазоне существуют резонансные частоты, при которых диэлектрическая проницаемость образца и коэффициент пропускания имеют экстремальные значения. Магнитоплазменный резонанс может достигаться изменением магнитного поля или интенсивности внешнего ионизирующего излучения. В данной работе исследовано влияние магнитного поля и интенсивности фотовозбуждения полупроводника (n-Si) на коэффициент пропускания субмиллиметровых волн. Получены и проанализированы зависимости коэффициента пропускания субмиллиметрового излучения от плотности потока фотовозбуждения и индукции магнитного поля. Наблюдаемое ослабление субмиллиметрового излучения объясняется увеличением плотности плазмы полупроводника. Установлено, что коэффициент пропускания тонкого слоя имеет минимум, обусловленный совпадением частоты зондирующего излучения с частотой магнитоплазменного резонанса в диапазоне 75–200 ГГц. Эффективное ослабление излучения обеспечивалось регулированием индукции поперечного магнитного поля в диапазоне 0,4–0,6 Тл и интенсивности подсветки. Полученные результаты могут применяться для создания полупроводниковых приборов, управляющих субмиллиметровым излучением магнитным полем в сочетании с фотовозбуждением.

**Ключевые слова:** волны миллиметрового диапазона, магнитоплазменное отражение, концентрация носителей, коэффициент пропускания.

**Для цитирования:** Мадьяров В. Р. Влияние магнитоплазменных эффектов на прохождение субмиллиметровых волн через полупроводники // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 53–57.

**V. R. Mad'yarov**

Belarusian State Technological University

**THE EFFECT OF MAGNETOPLASMA PHENOMENA ON THE SUBMILLIMETER WAVES PASSAGE THROUGH SEMICONDUCTORS**

One of the ways to effectively control the transmission of a semiconductor in the frequency range of 50–300 GHz is to create a sufficiently large concentration of carriers in the volume of a semiconductor placed in a magnetic field using ionizing radiation. In this range some resonant frequencies exist at which the dielectric permittivity of the sample and the transmittance have extreme values. Magnetic plasma resonance can be achieved by changing the magnetic field or the intensity of external ionizing radiation. In this paper, the influence of the magnetic field and the intensity of the photoexcitation of a semiconductor (n-Si) on the transmittance of submillimeter waves is investigated. The dependences of the transmittance of submillimeter radiation on the photoexcitation flux density and magnetic field induction are obtained and analyzed. The observed attenuation of submillimeter radiation is explained by an increase in the density of the semiconductor plasma. It was found that the transmission coefficient of the thin layer has a minimum due to the coincidence of the frequency of the probing radiation with the frequency of the magnetoplasma resonance in the 75–200 GHz range. The effective attenuation of radiation was provided by varying transverse magnetic induction in the range of 0.4–0.6 T and the intensity of illumination. The results obtained can be used for developing semiconductor devices that control submillimeter wave energy flux by a magnetic field in combination with photoexcitation.

**Keywords:** millimeter waves, magnetoplasma reflection, carrier concentration, transmission coefficient.

**For citation:** Mad'yarov V. R. The effect of magnetoplasma phenomena on the submillimeter waves passage through semiconductors. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no 2 (248), pp. 53–57 (In Russian).

**Введение.** Возможность управления потоками СВЧ-излучения через полупроводниковые пластины с помощью поверхностно-рекомбинационных и

плазменно-резонансных эффектов исследовалась в работах [1, 2]. Показано [3], что при толщине полупроводникового образца, меньшей характерной

диффузионной длины носителей, отражение от полупроводника существенно зависит от свойств поверхности полупроводникового элемента и в частности от скорости поверхностной рекомбинации носителей. Применение эффекта Фарадея для регулирования потока СВЧ-излучения является малорезультативным из-за низкой постоянной Верде.

Одним из способов эффективного управления пропусканием полупроводника в области частот 50–300 ГГц является создание достаточной концентрации носителей в объеме в сочетании с наложением магнитного поля. В указанной области частот для широкого круга полупроводниковых материалов существуют резонансные частоты. Резонансы соответствуют определенным сочетаниям плазменной и циклотронной частот, при которых диэлектрическая проницаемость образца и коэффициент пропускания имеют экстремальные значения. Применение вспомогательного магнитного поля, в которое помещается образец, приводит к магнитоплазменному резонансу, который может достигаться при изменении магнитного поля.

Избыточная концентрация, определяющая плазменную частоту, может создаваться излучением от внешнего источника. Циклотронную частоту определяют эффективная масса носителей, магнитное поле и его ориентация. Подбирая мощность фотовозбуждения полупроводникового элемента и магнитное поле, можно добиться эффективного ослабления потока СВЧ-излучения. Наиболее предпочтительным является использование таких частот, избыточных концентраций и магнитных полей, при которых имеет место плазменное отражение. При таких параметрах диэлектрическая проницаемость близка к нулю и коэффициент пропускания минимален. В данной работе исследовалось влияние внешнего магнитного поля и интенсивности облучения поверхности полупроводника на коэффициент пропускания миллиметровых волн.

**Основная часть.** Схема экспериментальной установки показана на рис. 1. В эксперименте применялись образцы n-Si толщиной 60 (напыление на кварцевое стекло) и 450 мкм. В области образцов создавалось постоянное магнитное поле, направление которого совпадало с направлением СВЧ-излучения (продольная геометрия) или было перпендикулярно ему. В продольной геометрии магнитное поле создавалось соленоидом и достигало 0,2 Тл. Поперечное магнитное поле создавалось электромагнитом, максимально достижимая индукция в области образца в такой геометрии составляла 0,9 Тл.

Для фотовозбуждения образца применялось излучение лазерных диодов с длиной волны 0,835 и 0,96 мкм, длительность которого составляла 5 с.

Измерения коэффициента пропускания зондирующего СВЧ-излучения проводились на частотах 75, 160 и 200 ГГц. Измерения коэффициента пропускания зондирующего излучения для образцов в продольной геометрии проводились в диапазоне частот 75–200 ГГц при выключенном магнитном поле и в поле с индукцией  $B = 0,2$  Тл.

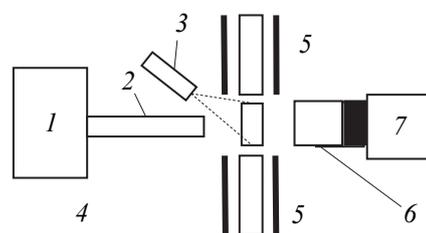


Рис. 1. Экспериментальная установка: 1 – СВЧ генератор (Г4-178); 2 – волновод; 3 – лазерный диод; 4 – образец; 5 – обмотки и сердечник электромагнита; 6 – полупроводниковая термопара; 7 – микровольтметр

На рис. 2 представлены зависимости коэффициента пропускания образцов n-Si от интенсивности фотовозбуждения в продольном (кривые 1–4) и поперечном поле.

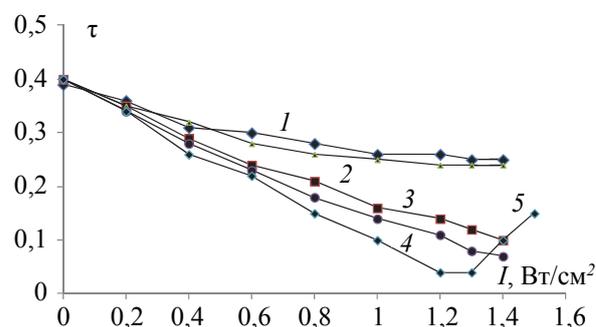


Рис. 2. Зависимости коэффициента пропускания образцов  $\tau$  от интенсивности облучения: 1 –  $d = 450$  мкм, 75 ГГц,  $B = 0$ ; 2 –  $d = 60$  мкм, 75 ГГц,  $B = 0$ ; 3 –  $d = 60$  мкм, 75 ГГц,  $B = 0,2$  Тл; 4 –  $d = 60$  мкм, 160 ГГц,  $B = 0,2$  Тл; 5 –  $B = 0,2$  Тл,  $d = 60$  мкм, 160 ГГц

На частоте 75 ГГц в отсутствие магнитного поля наблюдается примерно одинаковое уменьшение для обоих образцов. В продольной геометрии включение магнитного поля 0,2 Тл приводит к заметному уменьшению пропускания образца с меньшей толщиной. Для данного образца на частоте зондирующего излучения 160 ГГц наблюдается некоторое снижение пропускания по сравнению с пропусканием на частоте 75 ГГц. Влияние магнитного поля на коэффициент пропускания образца с толщиной 450 мкм не наблюдалось на обеих частотах при интенсивностях фотовозбуждения до 1,5 Вт/см<sup>2</sup>. Включение одинакового

по величине поперечного магнитного поля 0,2 Тл приводит к незначительному снижению пропускания.

Наблюдаемое снижение пропускания образцов можно объяснить увеличением их проводимости с ростом интенсивности фотовозбуждения. В тонком образце избыточная концентрация носителей вблизи фронтальной и тыльной поверхностей будут сравнимы, так как пробег фотоионизирующего излучения в *n*-кремнии сопоставим с толщиной образца (60 мкм). Из-за уменьшения внутреннего градиента концентрации интенсивность переноса носителей в объеме вследствие диффузии меньше, чем в образце с большей толщиной. Вблизи поверхностей увеличивается избыточная концентрация электронов и, соответственно, уменьшается скорость поверхностной рекомбинации, а средняя по объему образца концентрация в тонком образце значительно выше. В результате сильнее сказывается плазменное поглощение на свободных носителях. Заметное уменьшение пропускания на более высокой частоте зондирующего излучения при одинаковом магнитном поле объясняется уменьшением вещественной части диэлектрической проницаемости кремния и увеличением отражения от фронтальной поверхности образца. Включение магнитного поля также приводит к изменению диэлектрической проницаемости и к уменьшению коэффициента диффузии носителей [4]. В поперечной геометрии диэлектрическая проницаемость плазмы полупроводника сложным образом зависит от соотношения плазменной и циклотронной частот [5]. Очевидно, при определенной интенсивности фотовозбуждения в поперечном поле в образце создается концентрация носителей, при которой пропускание минимально из-за совпадения частот зондирующего излучения (160 ГГц) и одной из частот магнитоплазменного резонанса.

Влияние магнитоплазменных эффектов на прохождение субмиллиметровых волн через полупроводниковый слой исследовалось в магнитных полях с индукцией до 0,9 Тл и при интенсивностях облучения до 1,5 Вт/см<sup>2</sup>. Изменение магнитного поля при фиксированной интенсивности фотовозбуждения определяет влияние циклотронной составляющей на резонансную частоту. Влияние плазменного отражения на пропускание проявляется при изменении интенсивности облучения в неизменном магнитном поле. На рис. 3 сопоставлены зависимости коэффициента пропускания образцов от магнитной индукции на разных частотах зондирования в продольной и поперечной геометрии при одинаковой интенсивности возбуждающего излучения.

В продольной геометрии наблюдается монотонное снижение пропускания при наложении максимально достижимой в данной геометрии

магнитной индукции 0,2 Тл. Такое поле является слабым и недостаточным для наблюдения экстремума в этой зависимости. В продольной геометрии резонанс диэлектрической проницаемости определяется сдвигом края плазменного отражения, примерно равным циклотронной частоте,  $\omega_c = eB/m$  [6]. Оценки показывают, что на зондирующей частоте 75 ГГц резонанс достигается в поле около 2 Тл.

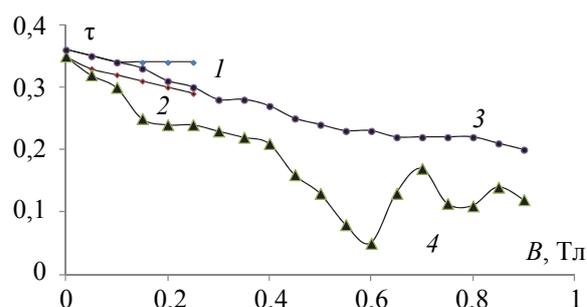


Рис. 3. Зависимости коэффициента пропускания образцов от индукции магнитного поля ( $I = 0,5$  Вт/см<sup>2</sup>):

- 1 – продольная геометрия,  $d = 450$  мкм, 75 ГГц;
- 2 – продольное поле,  $d = 60$  мкм, 160 ГГц;
- 3 – поперечное поле,  $d = 450$  мкм, 160 ГГц;
- 4 – поперечное поле,  $d = 60$  мкм, 160 ГГц

В поперечном поле для тонкого образца на частоте 160 ГГц наблюдается сложная зависимость пропускания от магнитной индукции, содержащая два минимума (кривая 4, рис. 3). Для образца с толщиной 450 мкм в этих же условиях наблюдалось почти двукратное монотонное снижение пропускания с ростом магнитного поля. С ростом магнитной индукции, наряду с уменьшением коэффициента диффузии, увеличивается циклотронная частота. При  $B = 0,6$  Тл достигается минимальное пропускание, соответствующее резонансной частоте, при которой диэлектрическая проницаемость имеет экстремальные значения. В поперечном поле наблюдаемые минимумы и максимум пропускания соответствуют частотам полного и минимального отражения. Частота полного отражения  $\omega^*$  определяется плазменной  $\omega_p$  и циклотронной частотами [5]:  $\omega^* = \omega_p + \omega_c / 2$ . Расчет при  $B^* = 0,6$  Тл и  $\omega^* = 160$  ГГц дает значение концентрации электронов  $5 \cdot 10^{21}$  м<sup>-3</sup>.

Причиной монотонной зависимости от магнитной индукции (кривая 3 на рис. 3) для образца с большей толщиной в поперечном поле является пониженная концентрация носителей по сравнению с концентрацией, создаваемой в тонком слое полупроводника при одинаковых интенсивностях фотовозбуждения.

На рис. 4 представлены зависимости пропускания от магнитной индукции для образца с

толщиной 60 мкм при различных интенсивностях возбуждения на одной и той же частоте зондирующего излучения.

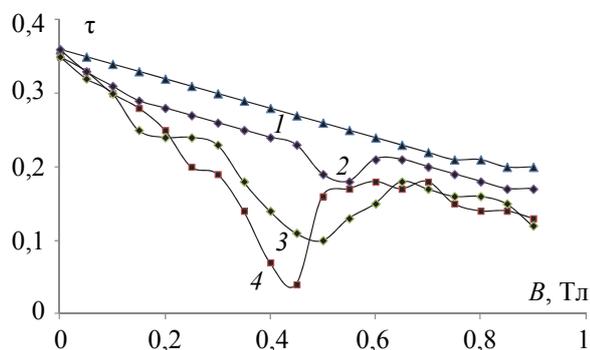


Рис. 4. Зависимости коэффициента пропускания СВЧ-излучения тонкого слоя *n*-Si от магнитной индукции при различной мощности фотовозбуждения (поперечная геометрия), 200 ГГц, *d* = 60 мкм: 1 – 0,4 Вт/см<sup>2</sup>; 2 – 0,6 Вт/см<sup>2</sup>; 3 – 0,8 Вт/см<sup>2</sup>; 4 – 1,1 Вт/см<sup>2</sup>

С ростом интенсивности подсветки минимум пропускания смещается в сторону меньших значений индукции. Резонансная частота  $\omega_0$ , соответствующая полному отражению в поперечной геометрии, определяется соотношением [6]:

$$\omega_0 = \sqrt{\omega_p^2 + \omega_c^2},$$

где  $\omega_p = (n_s e^2 / \epsilon_0 \epsilon_c m^*)^{1/2}$  – плазменная частота  $\omega_c = eB / m^*$  – циклотронная частота;  $m^*$  – эффективная масса носителей заряда,  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость. Из вышеприведенной формулы

#### Список литературы

1. Кац Л. И., Альтшуллер Е. Ю., Чупис В. Н. Отражение электромагнитной волны от тонкой полупроводниковой пластины с управляемой ударной ионизацией концентрационной неоднородностью свободных носителей // Радиотехника и электроника. 1992. Т 37, № 3. С. 560–566.
2. Сверхбыстродействующие фотоприемники на основе эффектов взаимодействия микроволнового электромагнитного излучения с фотовозбужденной плазмой в полупроводниках / [В. П. Царев и др.] // ЖТФ. 1998. Т. 68, № 11. С. 94–98.
3. All optical multiwavelength technique for the simultaneous measurement of bulk recombination lifetimes and front/rear surface recombination velocity in single crystal silicon samples / L Sirleto [et al.] / J. Appl. Phys. 2003. Vol. 93, no. 6. P. 3407–3413.
4. Separation of the bulk lifetime and surface recombination velocities in semiconductor wafer by a single microwave photoconductance / F. X. Chen [et al.] // Semicond. Sci. and Technology. 2004. Vol. 19, no. 9. P. 959–963.
5. Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г. Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Наука, 1975. 400 с.
6. Зеегер К. Физика полупроводников. М.: Мир, 1977. 615 с.

#### References

1. Kats L. I., Altshuller E. Yu, Chupis V. N. Reflection of an electromagnetic wave from thin semiconductor wafer with free carrier concentration nonuniformity controlled by impact ionization. *Radiotekhnika i elektronika* [Radio engineering and electronics], 1992, vol. 37, no. 4, pp. 560–566 (In Russian).

следует, что с усилением магнитного поля при данной частоте зондирующего излучения плазменная частота, соответствующая минимальному пропусканию, должна уменьшаться. Соответственно уменьшается концентрация носителей и мощность подсветки, при которой наблюдается минимум на кривых пропускания. Следует также отметить, что с ростом интенсивности подсветки наблюдается более быстрый спад пропускания образца с усилением магнитного поля (кривые 1–4 на рис. 4) из-за возрастания плотности электронно-дырочной плазмы.

**Заключение.** Исследовано влияние внешнего магнитного поля и интенсивности облучения поверхности полупроводника (*n*-Si) на коэффициент пропускания субмиллиметровых волн. Получены и проанализированы зависимости коэффициента пропускания субмиллиметрового излучения от мощности фотовозбуждения и индукции магнитного поля. Наблюдаемое ослабление субмиллиметрового излучения в тонком слое полупроводника объясняется диффузией и рекомбинацией в объеме и на поверхности. Показано, что пропускание тонкого слоя носит резонансный характер вследствие влияния плазменно-магнитных эффектов на проницаемость полупроводника в диапазоне 75–200 ГГц. Эффективное ослабление излучения обеспечивалось регулированием индукции поперечного магнитного поля в диапазоне 0,4–0,6 Тл и интенсивности излучения с длинами волн 0,835 и 0,960 мкм.

Полученные результаты могут применяться для создания полупроводниковых приборов, обеспечивающих управление потоком излучения субмиллиметрового диапазона с помощью магнитных полей.

2. Tsarev V. P., Antonov V. V., Ivanov S. V., Chupis V. N. Ultrahigh-speed photodetectors on the basis of interaction effects of microwave electromagnetic radiation with photoexcited plasma in semiconductors. *Zhournal tekhnicheskoy fiziki* [Journal of technical physics], 1998, vol. 68, no. 11, pp. 94–99 (In Russian).

3. Sirleto L., Irace A., Vitale G., Zeni L., Cutolo A. All optical multwavelength technique for the simultaneous measurement of bulk recombination lifetimes and front/rear surface recombination velocity in single crystal silicon samples. *J. Appl. Phys.*, 2003, vol. 93, no. 6, pp. 3407–3413.

4. Chen F. X., Cui R. Q., L Xu L., Meng F. Y., Zhao Z. X. and Zhou Z. B. Separation of the bulk lifetime and surface recombination velocities in semiconductor wafer by a single microwave photoconductance. *Semicond. Sci. and Technol.*, 2004, vol. 19, no. 9, pp. 959–963.

5. Bass F. G., Gurevich Yu. G. *Goryachiye elektrony i sil'nyye elektromagnitnyye volny v plasme poluprovodnikov i gazovogo razryada* [Hot electrons and strong electromagnetic waves in plasma of semiconductors and gas discharge]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 400 p.

6. Zeeger K. *Fizika poluprovodnikov* [Physics of semiconductors]. Moscow, Mir Publ., 1977. 615 p.

#### **Информация об авторах**

**Мадьяров Владимир Рафкатович** – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: Madyarov@belstu.by

#### **Information about the author**

**Mad'yarov Vladimir Rafkatovich** – 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: Madyarov@belstu.by

*Поступила после доработки 17.03.2021*

УДК 536.24:66.045

**Т. Б. Карлович, А. Б. Сухоцкий, Е. С. Данильчик**  
Белорусский государственный технологический университет  
**КОНВЕКЦИЯ РЭЛЕЯ – БЕНАРА В ВЫТЯЖНОЙ ШАХТЕ  
НАД ОДНОРЯДНЫМ ГОРИЗОНТАЛЬНЫМ ПУЧКОМ  
ИЗ ОРЕБРЕННЫХ ТРУБ**

Рассмотрено явление конвективной неустойчивости потока воздуха в вытяжной шахте над однорядным горизонтальным пучком из оребренных труб. Это явление интерпретируется на основе решения тепловой и гидродинамической задачи для турбулентного течения жидкости в приближении Обербека – Буссинеска. Данное решение представимо в аналитическом виде в случае линеаризации уравнений Навье – Стокса и теплопереноса для нижнего подогрева воздуха в шахте пучком труб. Продемонстрировано, что оно представляет собой трехмерные конвективные периодические структуры, называемые ячейками Рэля – Бенара. Трехмерные структуры экспериментально исследованы при помощи рамки с легкими нитями, установленной в шахте. Показано, что число квазипериодических структур может быть оценено с использованием критического числа Рэля. Экспериментально продемонстрировано, что наиболее интенсивная конвекция происходит над оребренным пучком на высоте, равной половине высоты шахты.

**Ключевые слова:** свободная конвекция, вытяжная шахта, оребренная труба, теплопередача, приближение Обербека – Буссинеска, уравнение Навье – Стокса, ячейка Рэля – Бенара.

**Для цитирования:** Карлович Т. Б., Сухоцкий А. Б., Данильчик Е. С. Конвекция Рэля – Бенара в вытяжной шахте над однорядным горизонтальным пучком из оребренных труб // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 1 (248). С. 58–64.

**T. B. Karlovich, A. B. Sukhotskii, E. S. Danilchik**  
Belarusian State Technological University

**RAYLEIGH – BENARD CONVECTION IN EXHAUST SHAFT  
OVER ONE ROW HORIZONTAL BUNDLE OF FINNED PIPES**

The unsteady phenomenon of the appearance of convection flows with a certain periodicity in an exhaust shaft above a one-row horizontal bundle of finned tubes is considered. This phenomenon is interpreted on the basis of solving the thermal and hydrodynamic problems for turbulent fluid flows in the Oberbek – Boussinesq approximation. In the case of lower heating of the air in the shaft by a tube bundle, it is possible to obtain an analytical solution of the Navier – Stokes equation in the form of periodic structures called Rayleigh – Benard cells. Three-dimensional quasiperiodic structures are experimentally investigated using a frame with thin filaments installed in the shaft. It is shown that the number of these structures can be estimated using the Rayleigh number. It has been experimentally demonstrated that convective cells arise above the beam at a height equal to half the height of the shaft.

**Key words:** free convection, exhaust shaft, finned tube, heat transfer, Oberbek – Boussinesq approximation, Navier – Stokes equation, Rayleigh – Benard cell.

**For citation:** Karlovich T. B., Sukhotskii A. B., Danilchik E. S. Rayleigh – Benard convection in exhaust shaft over one row horizontal bundle of finned pipes. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 1 (248), pp. 58–64 (In Russian).

**Введение.** Возникновение свободной конвекции потока воздуха в результате его неоднородного подогрева является примером неустойчивого течения вязкой среды [1]. Теоретическое описание неустойчивых течений основано на решении нелинейной гидродинамической задачи и нахождении температурного поля при соответствующих граничных условиях. В общей постановке такая задача может быть решена только с применением численных методов [2]. Однако при определенных условиях возможны аналитические решения [3], демонстрирующие появление устойчивых периодических структур в жидких и

газообразных средах. Одним из примеров является задача Рэля – Бенара о возникновении так называемых ячеек Рэля – Бенара в горизонтальном слое жидкости, находящейся в поле силы тяжести в случае ее нижнего подогрева [4]. Конвективные ячейки появляются в жидкости тогда, когда неоднородности плотности и температуры не успевают выровняться за счет диффузии и теплопроводности. В результате в жидкости организуется дополнительное движение в конвективных ячейках – подъем по центру более теплой жидкости и опускание по периферии холодной жидкости.

В настоящей работе на основе конвекции Рэлея – Бенара объясняется возникновение разнонаправленных течений воздуха в вытяжной шахте над горизонтальным пучком оребренных труб, к которому подводится тепловая мощность. Пучки оребренных труб используются в различных теплообменных устройствах и служат для отведения большого количества теплоты от охлаждаемого объекта [5]. Вытяжная шахта может устанавливаться над оребренными трубами для интенсификации процесса естественной конвекции воздуха и процесса теплообмена.

**Основная часть.** Экспериментальная установка представлена на рис. 1. Пучок оребренных труб 2 расположен внутри вытяжной прямоугольной шахты 3 с размерами основания  $b \times c = 38 \times 31$  см и высотой  $H = 52$  см. Шахта помещена внутри просторной камеры 1, ограждающей воздух, проходящий через пучок оребренных труб 3, от случайных инфильтрационных потоков и не мешающей свободному проходу воздуха через пучок труб внутри шахты. Внутри каждой из шести оребренных труб однорядного пучка находится ТЭН, за счет которого происходит разогрев воздуха внутри шахты. Оребренная труба имеет следующие геометрические размеры: наружный диаметр  $d = 56$  мм; диаметр трубы по основанию  $d_0 = 26,8$  мм; толщина стенки  $\delta = 2$  мм; высота ребра  $h = 14,6$  мм; шаг ребра  $s = 2,5$  мм; средняя толщина ребра  $\Delta = 0,5$  мм; длина трубы  $l_n = 330$  мм. Поперечный шаг  $S_1$  равен 58 мм. Материал ребристой оболочки – алюминиевый сплав АД1М, материал несущей трубы – углеродистая сталь.

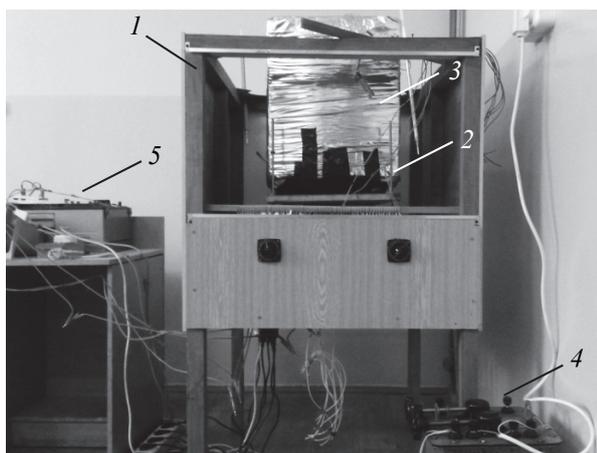


Рис. 1. Экспериментальная установка:  
1 – камера; 2 – пучок оребренных труб;  
3 – вытяжная шахта; 4 – трансформатор;  
5 – измерительная аппаратура

При определенной мощности, подводимой к трубам пучка, в шахте появляются неустойчивые восходящие воздушные потоки [6]. Для фиксации разнонаправленных потоков воздуха используется сетка из легких синтетических нитей на

алюминиевой рамке, которую можно перемещать по высоте шахты (рис. 2).

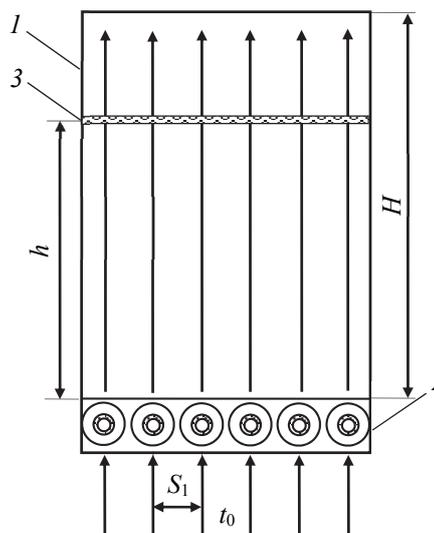


Рис. 2. Схема экспериментальной установки:  
1 – вытяжная шахта; 2 – пучок оребренных труб;  
3 – сетка из легких нитей

**Модель Обербека – Буссинеска.** Неоднородный нагрев воздуха, сопровождающийся возникновением неустойчивых пространственных состояний, может быть описан на основе гидродинамической и тепловой модели воздуха с использованием уравнения Навье – Стокса, уравнения теплопроводности и уравнения неразрывности (1).

В общем случае система уравнений для термогравитационной конвекции является нелинейной и решается только численными методами. Однако для определенных граничных условий в случае ее линеаризации решение задачи о неустойчивых конвективных течениях может быть получено в аналитическом виде. Характерным примером является устойчивое периодическое движение воздуха в виде конвективных валов – ячеек Рэлея – Бенара. Гидродинамическая и тепловая модель для потоков воздуха в вытяжной шахте над оребренным пучком труб, дополненная уравнением неразрывности для несжимаемой жидкости, в приближении Обербека – Буссинеска, имеет вид [2]

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \tau} + \mathbf{w} \nabla \mathbf{w} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{w} - \beta \theta \mathbf{g}, \\ \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \mathbf{w} \nabla \theta = a \Delta \theta, \\ \nabla \mathbf{w} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где  $\mathbf{w} = w_x \mathbf{i} + w_y \mathbf{j} + w_z \mathbf{k}$  – поле скоростей, м/с;  $\tau$  – время;  $\rho_0$  – средняя плотность окружающего воздуха, кг/м<sup>3</sup>;  $p$  – давление, отсчитываемое от среднего значения атмосферного давления, Па;

$\nu$  – кинематическая вязкость,  $\text{м}^2/\text{с}$ ;  $\theta$  – температура, отсчитываемая от средней температуры  $t_0$  окружающей среды,  $^\circ\text{C}$ ;  $g$  – ускорение свободного падения,  $\text{м}/\text{с}^2$ ;  $a$  – коэффициент температуропроводности,  $\text{м}^2/\text{с}$ . В модели (1) предполагается, что неоднородности плотности воздуха, вызывающие конвекцию, обусловлены в основном изменением температуры воздуха, а не изменением давления:

$$\rho(\theta) = \rho_0(1 - \beta\theta), \quad (2)$$

где  $\beta$  – коэффициент теплового расширения среды,  $^\circ\text{C}^{-1}$ .

Для моделирования движения воздуха в шахте нами предлагается разложение скорости, температуры и давления воздуха на равновесные значения и малые возмущения:

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}_0 + \mathbf{w}_1; \theta = \theta_0 + \theta_1; p = p_0 + p_1. \quad (3)$$

Пренебрегая слагаемыми, квадратичными по возмущениям, получим две системы уравнений: для равновесных значений

$$\begin{cases} 0 = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p_0 + g\beta\theta_0 \mathbf{k}, \\ \frac{\partial \theta_0}{\partial \tau} + \mathbf{w}_0 \nabla \theta_0 = a\Delta\theta_0 \end{cases} \quad (4)$$

и для малых возмущений

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{w}_1}{\partial \tau} + \mathbf{w}_0 \nabla \mathbf{w}_1 = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p_1 + \nu \Delta \mathbf{w}_1 + g\beta\theta_1 \mathbf{k}, \\ \frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} + \mathbf{w}_1 \nabla (\theta_0 + \theta_1) = a\Delta\theta_1, \\ \nabla \mathbf{w}_1 = 0. \end{cases} \quad (5)$$

В качестве нулевого приближения решения задачи (4), (5) рассмотрим механическое равновесие в вытяжной шахте, тогда скорость  $\mathbf{w}_0 = 0$ . В этом случае решение уравнений (4), (5) для ряда граничных условий известно и описано в работах, например, в [3, 4, 7, 8]. Оно является нетривиальным и требует более подробного рассмотрения.

Градиент стационарного температурного поля воздуха для  $\mathbf{w}_0 = 0$  будет удовлетворять уравнению

$$\nabla \theta_0 = -A\mathbf{k}, \quad (6)$$

где значение равновесного температурного градиента равно  $A = (t_1 - t_2)/H$ ;  $\mathbf{k}$  – единичный вектор, направленный вдоль оси  $z$ ;  $t_1$  и  $t_2$  – температуры воздуха на входе и выходе из шахты.

В случае статического равновесия перепишем систему уравнений (5) с учетом (6) в безразмерном виде, введя замену переменных:

$$p' = \frac{\rho_0 \nu a}{H^2} p; \mathbf{w}' = \frac{a}{H} \mathbf{w}; \tau' = \frac{H^2}{\nu} \tau; \theta' = AH\theta, \quad (7)$$

с использованием чисел Прандтля (Pr) и Рэлея (Ra):

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{a}; \text{Ra} = Ag \frac{\beta H^4}{a\nu}, \quad (8)$$

где  $\rho_0 \nu a / H^2$ ,  $a/H$ ,  $H^2/\nu$  – характерные значения давления, скорости и времени соответственно:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{w}'_1}{\partial \tau} = -\nabla p'_1 + \Delta \mathbf{w}'_1 + \text{Ra} \theta'_1 \mathbf{k}, \\ \text{Pr} \frac{\partial \theta'_1}{\partial \tau} - \mathbf{w}'_1 \mathbf{k} = \Delta \theta'_1, \\ \nabla \mathbf{w}'_1 = 0. \end{cases} \quad (9)$$

После применения операции двойного ротора  $\nabla \times \nabla \times \mathbf{k}$  к уравнению Навье – Стокса в системе (9) для исключения давления  $p'_1$ , для проекций скорости воздуха внутри шахты и температуры получим следующую систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial \Delta \mathbf{w}'_{1z}}{\partial \tau} = \Delta \Delta \mathbf{w}'_{1z} + \text{Ra} \left( \frac{\partial^2 \theta'_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta'_1}{\partial y^2} \right), \\ \frac{\partial \Delta \mathbf{w}'_{1x}}{\partial \tau} = \Delta \Delta \mathbf{w}'_{1x} - \text{Ra} \frac{\partial^2 \theta'_1}{\partial x \partial z}, \\ \frac{\partial \Delta \mathbf{w}'_{1y}}{\partial \tau} = \Delta \Delta \mathbf{w}'_{1y} - \text{Ra} \frac{\partial^2 \theta'_1}{\partial y \partial z}, \\ \text{Pr} \frac{\partial \theta'_1}{\partial \tau} - w'_{1z} = \Delta \theta'_1. \end{cases} \quad (10)$$

Для однозначного решения системы (10) дополним ее идеализированными граничными условиями для безразмерных возмущений температуры и скорости воздуха в шахте

$$\theta'_1(x; y; z = 0, 1) = 0, \quad (11.1)$$

$$w'_{1x}(x = 0, b/H; y; z) = 0, \quad (11.2)$$

$$w'_{1y}(x; y = 0, c/H; z) = 0, \quad (11.3)$$

$$w'_{1z}(x; y; z = 0, 1) = 0, \quad (11.4)$$

$$\frac{\partial^2 w'_{1z}}{\partial z^2}(x; y; z = 0, 1) = 0, \quad (11.5)$$

где равенство (11.1) соответствует исчезновению температурных возмущений  $\theta'_1$  на верхней и нижней границе; условия (11.2) и (11.3) означают исчезновение на боковых стенках возмущений горизонтальной составляющей скоростей  $w'_{1x}$ ,  $w'_{1y}$ , условие (11.4) соответствует отсутствию возмущений вертикальной составляющей скорости  $w'_{1z}$

на верхней и нижней границе, условие (11.5) означает отсутствие касательных напряжений на боковых стенках шахты.

Задача Рэлея (10) с граничными условиями (11) для распространения тепла в прямоугольном параллелепипеде единичной высоты при равномерном подогреве его основания имеет решение в виде конвективных валов (двухмерная конвекция) [3, 4] и в виде конвективных ячеек (трехмерная конвекция) [7, 8]. Как отмечается в работе [3], формирование устойчивых двумерных

или трехмерных конвективных структур во многом определяется температурной зависимостью вязкости среды, числом Прандтля, а также формой и теплопроводностью стенок, ограничивающих жидкость.

В данной работе имеет место формирование трехмерных конвективных ячеек в шахте (см. ниже). Для получения решения задачи нами предлагается разложение возмущений компонент скорости и температуры в бесконечные ряды Фурье с амплитудами, зависящими от времени:

$$\begin{aligned} w'_{1z}(x, y, z, \tau) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_{1nlm} \exp(-\lambda_{nlm} \tau) \sin(n\pi z) \cos(lk_x x) \cos(mk_y y); \\ w'_{1x}(x, y, z, \tau) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_{3nlm} \exp(-\lambda_{nlm} \tau) \cos(n\pi z) \sin(lk_x x) \cos(mk_y y); \\ w'_{1y}(x, y, z, \tau) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_{4nlm} \exp(-\lambda_{nlm} \tau) \cos(n\pi z) \cos(lk_x x) \sin(mk_y y); \\ \theta'_1(x, y, z, \tau) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_{2nlm} \exp(-\lambda_{nlm} \tau) \sin(n\pi z) \cos(lk_x x) \cos(mk_y y), \end{aligned} \quad (12)$$

где  $k_x = 2\pi H / b = 8,6$  и  $k_y = 2\pi H / c = 10,5$  – минимальные волновые числа, означающие наличие дискретного набора собственных функций и собственных значений у системы, характеризующих упорядоченность движения;  $n, l, m$  – номера гармоник,  $c_{1nlm}, c_{2nlm}, c_{3nlm}$  и  $c_{4nlm}$  – постоянные коэффициенты разложения;  $\lambda_{nlm}$  – декремент, характеризующий временной ход возмущения. При  $\lambda_{nlm} > 0$  возмущения будут затухать, решение устойчиво, при  $\lambda_{nlm} < 0$ , возмущения будут нарастать, решение неустойчиво, при  $\lambda_{nlm} = 0$  зависимость возмущений от времени исчезает и решение (12) для компонент скорости демонстрирует наличие конвективных ячеек в шахте [7, 8].

Заметим, что первое и четвертое уравнения общей системы (10) образуют замкнутую систему из двух уравнений, которая может быть проанализирована отдельно. Подставив в нее разложение (12) для переменных  $w'_{1z}$  и  $\theta'_1$ , получим систему линейных уравнений для коэффициентов разложения:

$$\begin{aligned} \lambda_{nlm} c_{1nlm} d_{nlm}^2 &= c_{1nlm} d_{nlm}^4 - Ra c_{2nlm} \left( (lk_x)^2 + (mk_y)^2 \right); \\ \lambda_{nlm} Pr c_{2nlm} + c_{1nlm} &= c_{2nlm} d_{nlm}^2, \end{aligned} \quad (13)$$

где введено соответствующее обозначение  $d_{nlm}^2 = (n\pi)^2 + (lk_x)^2 + (mk_y)^2$ . Однородная система (13) будет иметь решение только в случае обращения в ноль ее определителя. Из этого условия находим собственные значения, или декременты  $\lambda_{nlm\pm}$ :

$$\begin{aligned} \lambda_{nlm\pm} &= \frac{d_{nlm}^2 (1 + Pr)}{2 Pr} \pm \\ &\pm \sqrt{\frac{d_{nlm}^4 (Pr - 1)^2}{4 Pr^2} + \frac{Ra \left( (lk_x)^2 + (mk_y)^2 \right)}{d_{nlm}^2 Pr}}. \end{aligned} \quad (14)$$

Переход из режима устойчивого молекулярного теплопереноса ( $Ra < Ra_{cr}$ ) к режиму неустойчивого вихревого течения ( $Ra > Ra_{cr}$ ) определяется критическим числом Рэлея, которое следует из равенства  $\lambda_{nlm-} = 0$  и в соответствии с (14) имеет вид

$$Ra_{cr} = \frac{(n^2 \pi^2 + l^2 k_x^2 + m^2 k_y^2)^3}{l^2 k_x^2 + m^2 k_y^2}. \quad (15)$$

Согласно (15), в случае  $Ra = Ra_{cr}$  задача Рэлея (10), (11) имеет периодическое решение в виде трехмерных ячеек. Оценим минимальное критическое число Рэлея, выбрав минимальные числа  $n = l = m = 1$  в формуле (15):  $Ra_{\min} = 39\,700$ . Для появления конвективных воздушных ячеек в шахте требуется, чтобы экспериментальное число Рэлея превышало минимальное критическое число Рэлея.

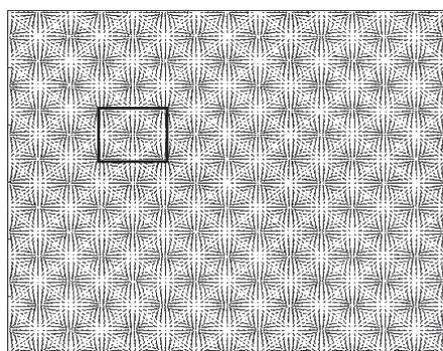
**Эксперимент.** В эксперименте к однорядному оребренному пучку труб подводилась мощность 108 Вт. В результате разогрева труб нагревался воздух внутри шахты, причем температура воздуха на входе в шахту составляла 44°C, а на выходе 36°C.

Рассчитанное на основе экспериментальных данных по формуле (8) число Рэлея составляет

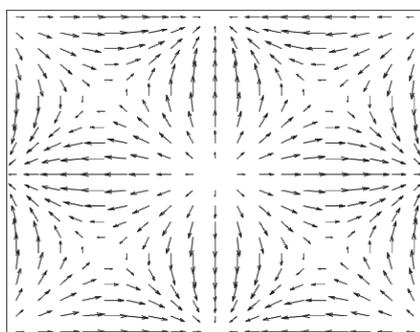
$Ra = 9,3 \cdot 10^7$ , что значительно превышает минимальное критическое число Рэлея  $Ra_{min}$ . Подберем номера гармоник, наиболее соответствующих экспериментальному числу Рэлея. Если  $n = l = m = 7$ , то теоретическое число Рэлея оказывается равным  $9,5 \cdot 10^7$ .

На рис. 3 представлена визуализация поля скоростей воздуха для каждой точки шахты, выполненная при учете только 7-й гармоники в разложении (12). В плоскости  $(x, y)$  наблюдается образование правильных периодических ячеек, причем движение воздуха в соседних ячейках осуществляется в противоположные стороны.

Разнонаправленное течение воздуха в шахте фиксировалось путем установки внутрь шахты сетки из легких нитей, закрепленной на жесткой рамке. Рамка перемещалась по высоте шахты для определения положения конвективных ячеек по размаху колебания нитей. На небольшой высоте в шахте до 10 см колебания нитей почти отсутствовали. Наибольший размах колебаний нитей достигался на высотах порядка 20–40 см. Для фиксации трехмерных конвективных структур воздуха рамка устанавливалась на высоте  $h = 40$  см от однорядного пучка (см. рис. 2). На рис. 4 продемонстрировано положение сетки из нитей в различные моменты времени для подведенной мощности 108 Вт.



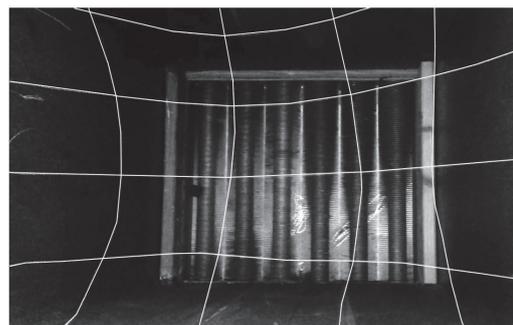
а



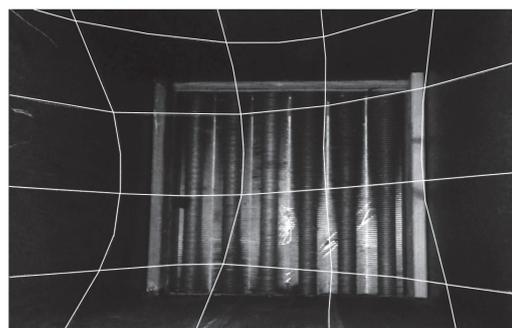
б

Рис. 3. Ячейки Рэлея – Бенара в вытяжной шахте для  $l = 7, m = 7$  (а). Выделенная область на рис. 3, а представлена в увеличенном масштабе на рис. 3, б.

Стрелками обозначено направление скорости воздуха в плоскости  $(x, y)$  (б)



а



б

Рис. 4. Конвективная неустойчивость воздушных потоков в шахте над однорядным оребренным пучком. Время съемок: 1-я (а) и 4-я (б) секунды от начала наблюдения (для лучшей видимости нити утолщены и выделены белым цветом)

По направлению деформации нитей можно судить о направлении воздушных потоков в шахте. Например, на рис. 4, а хорошо заметны деформации нитей в центре за счет задувания воздуха внутрь шахты. Это говорит о том, что в шахте формируются трехмерные квазипериодические структуры. На нижней нити видны волнообразные изгибы, свидетельствующие о наличии близко расположенных противоположных по направлению воздушных потоков в шахте. На рис. 4, б направление задувания воздуха меняется на противоположное. Воздушные потоки внутрь шахты наблюдаются со всех четырех боковых сторон, в центре заметен поток восходящего воздуха. С течением времени колебания нитей повторяются. Их период составляет несколько секунд. Точное количество квазипериодических структур определить не удается из-за малого количества нитей и большой амплитуды их колебаний.

Течение воздуха в шахте является более сложным по сравнению с решением (12) для трехмерной конвективной модели Рэлея – Бенара. Это обусловлено, в первую очередь, неравномерным подогревом воздуха оребренным пучком труб и ненулевой средней скоростью течения воздуха в шахте. Воздух засасывается в шахту снизу через узкие щели между оребренными трубами,

приобретая скорость просачивания  $w_0$ . Ее можно учесть в виде компоненты, направленной вдоль оси  $z$  (см. уравнения (4))  $w_0 = w_0(z)\mathbf{k}$ , тогда стационарное уравнение теплопроводности в системе (4) упрощается и переписывается в виде

$$w_0 \frac{d\theta_0}{dz} = a \frac{d^2\theta_0}{dz^2}; \theta_0(z=0) = t_1; \quad (16)$$

$$\theta_0(z=H) = t_2,$$

а соответствующее температурное распределение выражается формулой

$$\theta_0 = (t_1 - t_2) \frac{\exp(\text{Pe}) - \exp\left(\text{Pe} \frac{z}{H}\right)}{\exp(\text{Pe}) - 1}, \quad (17)$$

где  $\text{Pe} = w_0 H / a$  – число Пекле.

Задача Рэлея с учетом просачивания жидкости через границы плоского бесконечного слоя решалась с использованием метода Бубнова – Галеркина в работе [9]. В результате численных расчетов показано, что ненулевая средняя скорость жидкости повышает устойчивость ее течения и приводит к значительному росту критического числа

Рэлея. Конвективные валы при этом деформируются и «сдуваются» в направлении течения жидкости.

Таким образом, для более подробного описания пространственной квазипериодической структуры воздуха в шахте требуется проведение дополнительных исследований с учетом всех особенностей постановки задачи.

**Заключение.** В работе рассмотрены разнонаправленные течения воздуха в вытяжной шахте над горизонтальным однорядным оребренным пучком на основе задачи Рэлея. С использованием рамки с легкими нитями зафиксировано возникновение квазипериодических воздушных структур в шахте над оребренным пучком. Предложена интерпретация разнонаправленного течения воздуха в шахте на основе трехмерных конвективных ячеек Рэлея – Бенара. Дано математическое описание этого явления с использованием уравнений для термогравитационной конвекции и предложено решение в виде разложения в ряд по гармоникам возмущений скорости потока воздуха и температуры. Найдены критические числа Рэлея и на их основе рассчитано количество конвективных ячеек Рэлея – Бенара, возникающих в вытяжной шахте над однорядным пучком оребренных труб.

### Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.
2. Pandey, A. Turbulent superstructures in Rayleigh-Bénard convection / A. Pandey, J. D. Scheel, J. Schumacher // *Nature Communications*. 2018. Vol. 9. Article number, 2118.
3. Гетлинг А. В. Формирование пространственных структур конвекции Рэлея-Бенара // УФН. 1991. Т. 161, № 9. С. 1–80.
4. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
5. Мильман О. О. Экспериментальное исследование теплообмена при естественной циркуляции воздуха в модели воздушного конденсатора с вытяжной шахтой // *Теплоэнергетика*, 2005. № 5. С. 16–19.
6. Сухощкий А. Б., Маршалова Г. С. Особенности гравитационного течения нагретого воздуха в вытяжной шахте над многорядным оребренным пучком // *ИФЖ*. 2019. Т. 92, № 3. С. 1–7.
7. Chandrasekhar S. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Oxford at the Clarendon Press, 1961. 654 p.
8. Палынский И. Б. О моделировании сложных режимов конвекции Рэлея – Бенара // *Сиб. журн. вычисл. математики*. 2011. Т. 14, № 2. С. 179–204.
9. Шварцблат Д. Л. О спектре возмущений и конвективной неустойчивости плоского горизонтального слоя жидкости с проницаемыми границами // *ПММ*. 1968. Вып. 2. С. 276–281.

### References

1. Landau L. D., Livshic E. M. *Gidrodinamika* [Hydrodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1986. 736 p.
2. Pandey A., Scheel J. D., Schumacher J. Turbulent superstructures in Rayleigh-Bénard convection. *Nature Communications*, 2018, vol. 9, Article number, 2118.
3. Getling A. V. The formation of spatial structures of Rayleigh-Benard convection. *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Advances in physical sciences], 1991, vol. 161, no. 9, pp. 1–80 (In Russian).
4. Gershuni G. Z., Zhuhovickiy E. M. *Konvektivnaya ustoychivost' neshimayemoy zhidkosti* [Convective stability of an incompressible fluid], Moscow, Nauka Publ., 1972. 392 p.
5. Mil'man O. O. An experimental study of heat transfer during natural air circulation in an air condenser model with an exhaust shaft. *Teploenergetika* [Thermal Engineering], 2005, no. 5, pp. 16–19 (In Russian).
6. Sukhotskii A. B., Marshalova G. S. Features of the gravitational flow of heated air in an exhaust shaft above a multi-row finned beam. *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal* [Physics Engineering Journal], 2019, vol. 92, no. 3, pp. 1–7 (In Russian).
7. Chandrasekhar S. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Oxford at the Clarendon Press, 1961. 654 p.

8. Palymskii I. B. Modeling complex Rayleigh-Benard convection regimes. *Sibirskiy zhurnal vychislitel'noy matematiki* [Siberian Journal of Computational Mathematics], 2011, vol. 14, no 2, pp. 179–204 (In Russian).
9. Shvartsblat D. L. On the spectrum of perturbations and convective instability of a plane horizontal layer of a liquid with permeable boundaries. *Prikladnaya matematika i mekhanika* [Applied Mathematics and Mechanics], 1968, issue 2, pp. 276–281 (In Russian).

#### Информация об авторах

**Карлович Татьяна Борисовна** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры энергосбережения, гидравлики и теплотехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: tbkar@mail.ru

**Сухоцкий Альберт Борисович** – кандидат технических наук, доцент кафедры энергосбережения, гидравлики и теплотехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: alk2905@mail.ru

**Данильчик Екатерина Сергеевна** – аспирант кафедры энергосбережения, гидравлики и теплотехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: katya.156.156@gmail.com

#### Information about the authors

**Karlovich Tatyana Borisovna** – PhD (Physics and Mathematics), Assistant Professor, the Department of Energy-Saving, Hydraulics and Heat Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tbkar@mail.ru

**Sukhotskii Albert Borisovich** – PhD (Technical Sciences), Assistant Professor, the Department of Energy-Saving, Hydraulics and Heat Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alk2905@mail.ru

**Danilchik Ekaterina Sergeevna** – PhD student, the Department of Energy-Saving, Hydraulics and Heat Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: katya.156.156@gmail.com

*Поступила после доработки 14.09.2021*

# ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ COMPUTER SCIENCE AND ENGINEERING SCIENCES

---

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ MODELLING OF PROCESSES AND MANAGEMENT IN TECHNICAL SYSTEMS

---

УДК 681.53

Д. А. Гринюк, Н. М. Олиферович, И. Г. Сухорукова, И. О. Оробей  
Белорусский государственный технологический университет

### МОДЕЛИРОВАНИЕ И НАСТРОЙКА СИСТЕМ С НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКОЙ

В статье рассматривается проблематика анализа нелинейных объектов управления. Изучен класс объектов, которые в диапазоне возможного регулирования имеют известную зависимость динамики от выходного параметра. Приведены примеры таких объектов и предложена структура для их моделирования.

Проведенное имитационное моделирование объекта управления второго порядка с линейной зависимостью постоянной времени от выходного параметра продемонстрировало асимметрию получаемых передаточных функций по каналу регулирования и высокую зависимость от диапазона исследования. При этом при увеличении в одном направлении наблюдается наличие доминирующей постоянной времени, тогда как в противоположном – минимизация среднеквадратического отклонения приводит к передаточным функциям второго порядка с равными значениями постоянной времени. И даже при этом величина среднеквадратичного отклонения аппроксимации имеет худшее значение, чем в первом случае.

Для исследованного примера произведена настройка контура управления из ранее полученных передаточных функций объекта. Для настройки разных вариантов использован один и тот же интегральный критерий на предложенной нелинейной структуре. Анализ переходных процессов показал разное качество при изменении направления сигнала задания. Из этого делается вывод, что рационально иметь набор настроек регулирования и при изменении направления воздействия менять параметры. В расширенном варианте можно менять настройки не только при изменении знака, но и координаты, как это уже используется в табличном управлении промышленных систем.

Разработанный вариант анализа представляет собой промежуточный вариант между линеаризацией нелинейных объектов управления и использованием решения уравнений в частных производных.

**Ключевые слова:** нелинейная динамика, настройка регулятора, переходный процесс.

**Для цитирования:** Гринюк Д. А., Олиферович Н. М., Сухорукова И. Г., Оробей И. О. Моделирование и настройка систем с нелинейной динамикой // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 65–71.

D. A. Hryniuk, N. M. Oliferovich, I. G. Suhorukova, I. O. Orobei  
Belarusian State Technological University

## MODELING AND TUNING CONTROL OBJECTS WITH NONLINEAR DYNAMICS

The article deals with the problems of analysis of nonlinear control objects. A class of objects, which in the range of possible regulation have a known dependence of the dynamics on the output parameter, is studied. Examples of such objects are given and a structure for their modeling is proposed.

The carried out simulation modeling of a second-order control object with a linear dependence of the time constant on the output parameter demonstrated the asymmetry of the obtained transfer functions along the control channel and a high dependence on the range of the study. At the same time, with an increase in one direction, the presence of a dominant time constant is observed, while in the opposite direction, the minimization of the root-mean-square deviation leads to second-order transfer functions with equal values of the time constant. And even so, the value of the standard deviation of the approximation has a worse value than in the first case.

For the investigated example, the control loop was tuned from the previously obtained transfer functions of the object. To adjust different options, the same integral criterion was used on the proposed nonlinear structure. Transient analysis showed different quality when changing the direction of the task signal. From this, it is concluded that it is rational to have a set of control settings, and change the parameters when changing the direction of exposure. In the extended version, you can change the settings not only when changing the sign, but also the coordinates, as is already used in the table management of industrial systems.

The developed version of the analysis is an intermediate version between the linearization of nonlinear control objects and the use of solving partial differential equations.

**Key words:** nonlinear dynamics, regulator tuning, transient process.

**For citation:** Hryniuk D. A., Oliferovich N. M., Suhorukova I. G., Orobei I. O. Modeling and tuning control objects with nonlinear dynamics. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 65–71 (In Russian).

**Введение.** Проявление нелинейных свойств характерно для всех объектов управления технологическими процессами [1–3]. Для проведения процедуры настройки регуляторов обычно предварительно проводят линеаризацию. При этом выбор метода линеаризации зависит от задач и свойств объекта [4–5]. После получения линейной модели производится процедура настройки параметров регулятора. Возможность такого варианта обусловлена тем, что функционирование технологического процесса происходит в небольшом диапазоне изменения параметров.

Иногда из-за нелинейных особенностей объекта управления такой подход не срабатывает. Качество переходного процесса может оказаться неудовлетворительным, и система может стать неустойчивой. Тогда используют различные подходы перенастройки систем регулирования, применяют нелинейное управление [6–8]. Здесь выбирают как нечеткие, нейронные, гибридные подходы, так и различные варианты математического моделирования с формированием целевой функции и поиском ее экстремума [8].

Ряд технологических объектов имеет динамику, зависящую от параметра, который непосредственно регулируется [1–2]. К таким объектам можно отнести, например, стабилизацию уровня  $L$ . Постоянная времени обычно определяется как

$$T = \frac{LS}{F}, \quad (1)$$

где  $S$  – площадь сосуда, танка;  $F$  – расход.

Как следствие, при значительных колебаниях уровня будет наблюдаться и изменение постоянной времени. Это происходит, когда уровень, например, является вспомогательным контуром каскадной системы управления.

Такая же ситуация наблюдается и при тепловых процессах. Одним из вариантов определения постоянной времени является формула.

$$T = \frac{WC}{Q} (\theta - \theta_1), \quad (2)$$

где  $W$  – масса теплообменной стенки;  $C$  – теплоемкость;  $Q$  – количество тепла, которое участвует в теплообмене;  $\theta$  – температура теплоносителя;  $\theta_1$  – температура стенки.

Такие же особенности могут наблюдаться при стабилизации скорости при движении в вертикальном направлении во время управления летательными аппаратами и в прочих динамических системах [7].

Данную проблему можно наблюдать в классе задач управления объектов с распределенными параметрами. Однако разработанные подходы построения систем управления такими

объектами часто сложны и не оправданы в решении частных задач. В статье предлагается упрощенная процедура учета свойств реальных объектов.

**Оценка динамических свойств объектов с переменной динамикой.** При исследовании объектов с динамикой, которая зависит от выходного параметра, можно воспользоваться как различными методами анализа нелинейных систем, так и математическим моделированием.

Зависимость постоянных времени от параметра управления не всегда линейна, как следует из формул (1)–(2), но в нашем математическом эксперименте примем такое допущение.

Смоделируем работу процесса экспериментальной оценки динамики канала управления для нескольких вариантов. Примем, что объект управления имеет второй порядок. Каждую из постоянных времени  $TV_1$  и  $TV_2$  будем моделировать с помощью структуры, представленной на рис. 1.

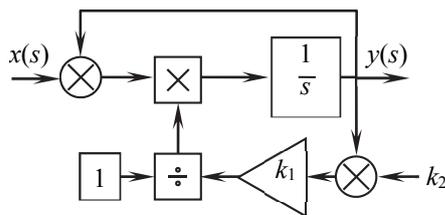


Рис. 1. Структура для моделирования динамики объекта, которая зависит от выходного параметра:  $x(s)$  – вход;  $y(s)$  – выход;  $k_1, k_2$  – коэффициенты настройки диапазона изменения постоянной времени

Коэффициент  $k_2$ , в первую очередь, определяет начальное значение постоянной времени;  $k_1$  – диапазон изменения. В случае, если подобную структуру сформировать в обратную связь, то будет происходить и изменение коэффициента усиления. Предложенная структура позволяет иметь линейную зависимость постоянной времени от выходного параметра.

Для оценки влияния нелинейной динамики на процесс идентификации было проведено моделирование объектов и выполнена идентификация эквивалентной передаточной функции с постоянными коэффициентами. В процессе моделирования формировались переходные процессы, как показано на рис. 2, а, б.

Идентификация производилась путем аппроксимации тренда переходным процессом звена второго порядка с постоянными значениями  $TC_1$  и  $TC_2$  и минимизацией среднеквадратичного отклонения. Коэффициенты получались отдельно, для каждого из тактов I–IV (рис. 2, а). Для выбранных вариантов оценивалось

интегральное значение среднеквадратичного отклонения (ISD). Чтобы облегчить анализ, для каждого из вариантов определялось относительное отклонение RISD по отношению к минимальному значению ISD. Результаты представлены в табл. 1–6. В табл. 1–3 дана оценка влияния большей постоянной времени. В табл. 4–6 показано изменение чувствительности по малой постоянной времени.

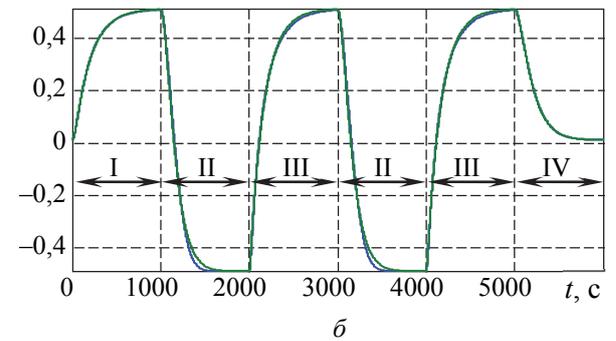
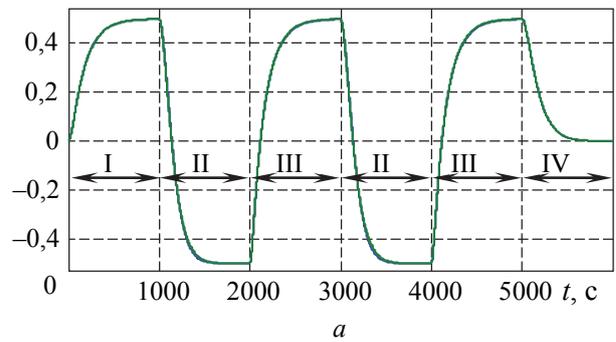


Рис. 2. Переходной процесс для объекта второго порядка с переменной динамикой и результат его аппроксимации: а – при  $TV_1 = 80-160$  и  $TV_2 = 30-50$ ; б –  $TV_1 = 60-200$  и  $TV_2 = 30-50$

Таблица 1

**Идентификация при  $TV_1 = 80-160$  и  $TV_2 = 30-50$**

Параметры	Номер интервала идентификации			
	I	II	III	IV
$TC_1$	31,02	80,69	14,98	120,2
$TC_2$	153,5	80,69	143,6	64,38
RISD	2,34	857	107,2	1

Таблица 2

**Идентификация при  $TV_1 = 60-200$  и  $TV_2 = 30-50$**

Параметры	Номер интервала идентификации			
	I	II	III	IV
$TC_1$	25,62	86,76	5,351	136,1
$TC_2$	182,8	86,72	160,6	73,14
RISD	1,251	226,5	41,74	1

Таблица 3  
Идентификация при  $TV_1 = 100-120$   
и  $TV_2 = 30-50$

Параметры	Номер интервала идентификации			
	I	II	III	IV
$TC_1$	38,72	94,50	28,99	107,4
$TC_2$	121,5	54,92	121,3	52,23
RISD	1	29,4613	10,4631	1,3988

Таблица 4  
Идентификация при  $TV_1 = 80-160$   
и  $TV_2 = 35-45$

Параметры	Номер интервала идентификации			
	I	II	III	IV
$TC_1$	151,9	80,73	16,44	123,0
$TC_2$	29,91	80,72	141,9	59,36
RISD	1,7065	212,9412	43,6120	1

Таблица 5  
Идентификация при  $TV_1 = 80-160$   
и  $TV_2 = 15-65$

Параметры	Номер интервала идентификации			
	I	II	III	IV
$TC_1$	33,74	80,51	10,54	86,96
$TC_2$	158,9	80,50	148,5	104,4
RISD	1	973,1861	36,0148	5,9460

Таблица 6  
Идентификация при  $TV_1 = 100-120$   
и  $TV_2 = 15-65$

Параметры	Номер интервала идентификации			
	I	II	III	IV
$TC_1$	127,0	84,63	127,6	97,77
$TC_2$	41,18	63,88	23,35	68,83
RISD	1	34,87	10,37	1,730

Хуже всего аппроксимировались результаты при несовпадении направления воздействия на объект и градиента зависимости динамики (II). В этом случае для улучшения аппроксимации необходимо увеличивать порядок передаточной функции.

Интегральное значение среднеквадратичного отклонения (СКО) отличалось от диапазона и направления отклонения (табл. 7). Чем меньше отклонение, тем лучше качество аппроксимации. Полученные результаты хорошо коррелируются с результатами прикладных экспериментов с тепловыми объектами [10, 11].

**Особенности настройки объектов с переменной динамикой.** Настройку систем управления для объектов с переменной динамикой можно производить из разных позиций. Самым простым является нахождение таких настроек, при которых система будет устойчива и обеспечит приемлемое качество управления в диапазоне изменяющейся динамики. Исходя из

полученных результатов, видим, что подход хорош при небольшом диапазоне отклонений выходной величины. В противоположном случае встает более сложный вопрос, так как динамика вверх и вниз может иметь существенные отличия.

Таблица 7  
Минимальное значение СКО

Эксперимент	Минимальное значение ISD
$TV_1 = 80-160$ и $TV_2 = 30-50$	0,000220
$TV_1 = 60-200$ и $TV_2 = 30-50$	0,00447
$TV_1 = 100-120$ и $TV_2 = 30-50$	0,000269
$TV_1 = 80-160$ и $TV_2 = 35-45$	0,000219
$TV_1 = 80-160$ и $TV_2 = 15-65$	0,000326
$TV_1 = 100-120$ и $TV_2 = 15-65$	0,000272

В качестве примера был выбран вариант, при котором  $TV_1 = 80-160$  и  $TV_2 = 30-50$ . Настройка проводилась для нелинейной модели в том же диапазоне изменения выходной величины, что и при идентификации по интегральному критерию [12-14]:

$$\int_0^{\infty} t^2 |e(t)| dt \rightarrow \min, \quad (3)$$

где  $e(t) = (SP - y)$  – сигнал ошибки между сигналом задания и выходным сигналом;  $t$  – время.

Структура системы представляла собой такой же объект, как при идентификации, но с датчиком в обратной связи (рис. 3).

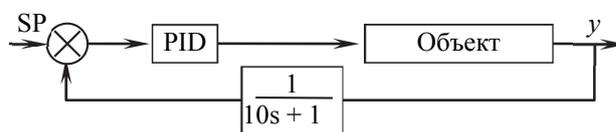


Рис. 3. Структура системы

Кроме настроек, которые были найдены путем минимизации критерия на всем диапазоне с использованием структуры (рис. 1), осуществлен поиск настроек для передаточных функций, которые определены в результате идентификации (табл. 8):

$$W = \frac{1}{(80,69s + 1)(80,69s + 1)}; \quad (4)$$

$$W = \frac{1}{(14,98s + 1)(143,6s + 1)}. \quad (5)$$

Таблица 8  
Результаты настройки для разных вариантов

Объект	$k_p$	$t_i$	$t_d$
5	6,7507	23,9011	106,4977
4	14,4137	11,2619	587,8606
Универсальные настройки	2,6662	58,0469	60,0686

Универсальные настройки дают разный вид переходного процесса. При увеличении сигнала задания наблюдаются затухающие колебания, при уменьшении – медленный аperiодический переходной процесс. Переходной процесс при универсальных настройках представлен на рис. 4.

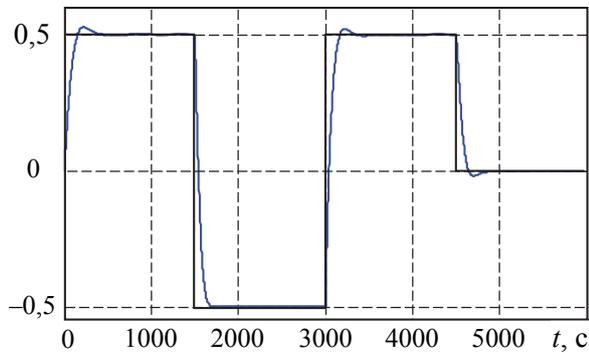


Рис. 4. Переходной процесс для объекта второго порядка с переменной динамикой и результат его аппроксимации при  $TV_1 = 80-160$  и  $TV_2 = 30-50$

Для сравнения было произведено моделирование, при котором в качестве объекта брались передаточные функции, которые получены при идентификации (4) и (5), рис. 5.

Результаты моделирования показывают, что использование аппроксимации нелинейной системы линейными моделями не дает инструмента по прогнозированию поведения объекта с переменной динамикой. Результат поведения системы, скорее всего, является чем-то средним в части основных качеств переходных процессов.

Для выбранного объекта управления можно было предложить структуру с переменными настройками ПИД-регулятора в зависимости от сигнала задания, если основные возмущения идут по этому каналу. Если отклонения от стационарного состояния происходят по причине возмущений, то в качестве изменений настроек могут выступать показания измерительного преобразователя выходного параметра. Все это можно объединить в вариант табличного управления, который широко используется в промышленных вариантах.

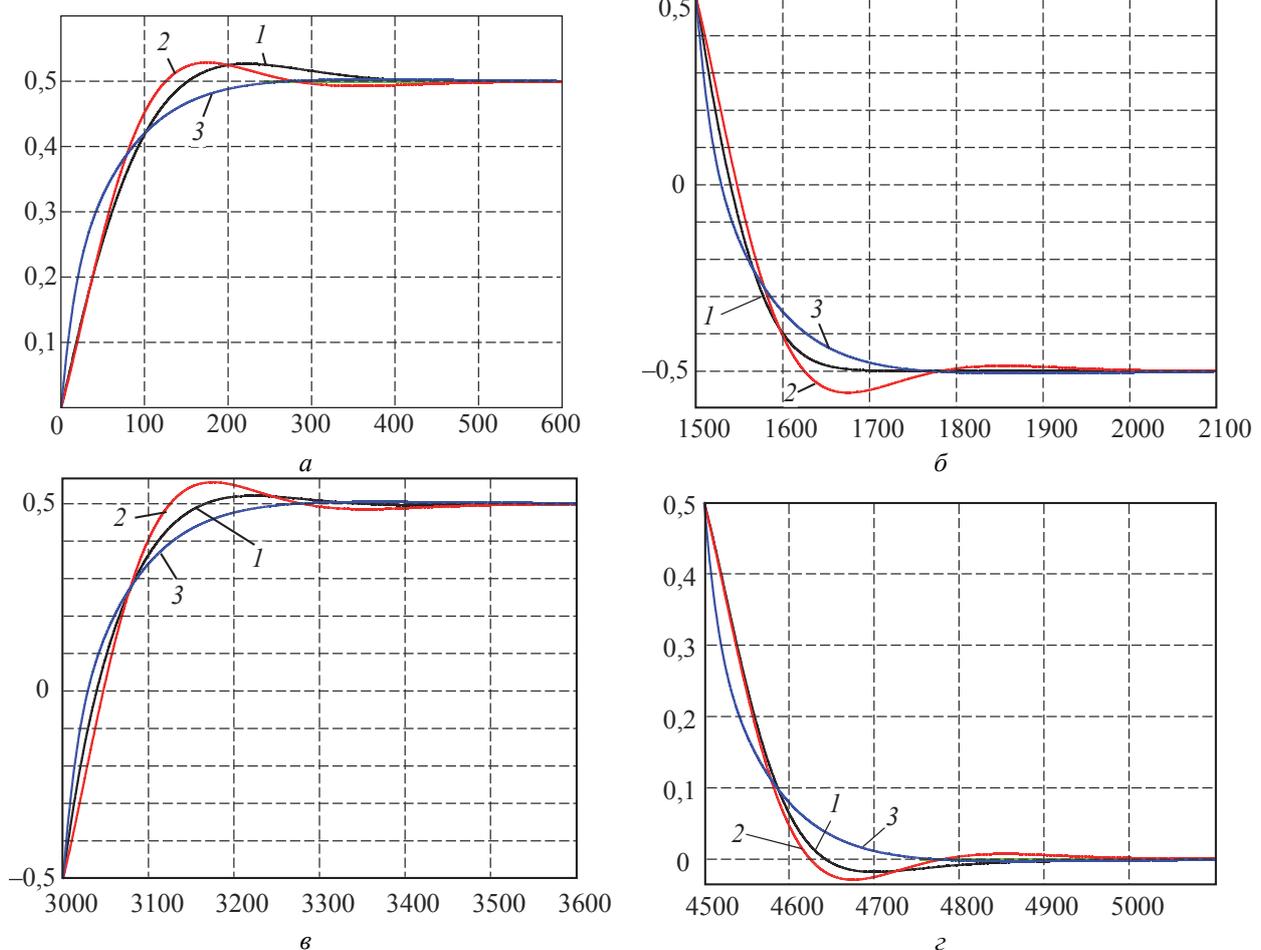


Рис. 5. Переходной процесс на тактах:  
 а – I; б – II; в – III; г – IV;  
 1 – при универсальных настройках на объекте с переменной динамикой (1);  
 2 – при модели объекта (4); 3 – модели (5)

Выбранный вариант анализа нелинейных объектов не учитывает всех аспектов. С другой стороны, применение уравнений в частных производных позволяет получить более качественный анализ. Предложенный механизм анализа является некоторым промежуточным вариантом между линеаризацией и уравнениями в частных производных. Однако возможность имитационного моделирования в современных математических пакетах позволяет произвести анализ широкого класса задач объектов с переменной динамикой.

**Заключение.** 1. Для выбора подхода к настройке системы управления объектами с нелинейной

динамикой следует производить оценку возможных изменений параметров.

2. При широком изменении постоянных времени объекта управления поиск настроек следует производить с учетом нелинейных свойств.

3. Оценка результатов настройки ПИД-регулятора для данного типа объектов на аппроксимированных моделях является достаточно косвенной.

4. Экспериментальное определение модели объектов с переменной динамикой следует выполнять с учетом присутствия асимметрии.

5. Для обеспечения качества поддержания параметров лучше использовать регуляторы с изменяющимися характеристиками.

### Список литературы

1. Hangos K.M., Cameron I.T. Process modelling and model analysis. San Diego: Academic Press, 2001. 543 p.
2. Smedsrud H. Dynamic model and control of heat exchanger networks // 5th year project work. Norwegian University of Science and Technology. Department of Chemical Engineering, 2007. 50 p.
3. Dorfman K. D., Prodromos D. Numerical Methods with Chemical Engineering Applications. Cambridge University Press, 2017. 511 p.
4. Bequette B. W. Process Control: Modeling, Design and Simulation. Upper Saddle River, N. J.: Prentice Hall PTR, 1998. 621 p.
5. Mikles J., Fikar M. Process Modelling, Identification, and Control. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2007. 497 p.
6. Boufadene M. Nonlinear Control Systems Using MATLAB / CRC Press. Taylor & Francis Group, 2018. 58 p.
7. Vepa R. Nonlinear Control of Robots and Unmanned Aerial Vehicles An Integrated Approach / CRC Press. Taylor & Francis Group, 2016. 544 p.
8. Baldea M., Daoutidis P. Dynamics and Nonlinear Control of Integrated Process Systems. Cambridge: Cambridge University Press, 2012. 257 p.
9. Lisauskas S., Udris D., Uznys D. Direct Torque Control of Induction Drive Using Fuzzy Controller // Elektronika ir Elektrotechnika. 2013. Vol. 19 (5). P. 13–16.
10. Marozava M., Hryniuk D. Experimental study of the variation dynamic's for air heat exchanger // Mokslas – Lietuvos ateitis / Science – Future of Lithuania. 2017. Vol. 9, no. 3. P. 297–301.
11. Оценка динамики изменения температуры по длине металлического стержня / Д. А. Гринюк [и др.] // Автоматизация и энергосбережение машиностроительного и металлургического производств, технология и надежность машин, приборов и оборудования: материалы XIII Междунар. науч.-техн. конф., 27 марта 2018 г. Вологда: ВоГУ, 2018. С.85–88.
12. Hryniuk D., Suhorukova I., Oliferovich N., Orobei I. Complex tuning of the PID controller according to integral criteria // Open Conference Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream). Vilnius, 2018. P. 1–4. DOI: 10.1109/eStream.2018.8394117.
13. Hryniuk D., Suhorukova I., Orobei I. Non-linear PID controller and methods of its setting // Open Conference Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream). Vilnius, 2017. P. 1–4. DOI: 10.1109/eStream.2017.7950327.
14. Сухорукова И. Г., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Применение в ПИД-законе регулирования нелинейных функций преобразования ошибки // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 95–98.

### References

1. Hangos K.M., Cameron I.T. Process modelling and model analysis. San Diego, Academic Press Publ., 2001. 543 p.
2. Smedsrud H. Dynamic model and control of heat exchanger networks. 5th year project work. Norwegian University of Science and Technology. Department of Chemical Engineering Publ., 2007. 50 p.
3. Dorfman K. D., Prodromos D. Numerical Methods with Chemical Engineering Applications. Cambridge University Press Publ., 2017. 511 p.

4. Bequette B. W. Process Control: Modeling, Design and Simulation. Upper Saddle River, N. J., Prentice Hall PTR Publ., 1998. 621 p.
5. Mikles J., Fikar M. Process Modelling, Identification, and Control. Springer-Verlag Berlin Heidelberg Publ., 2007. 497 p.
6. Boufadene M. Nonlinear Control Systems Using MATLAB. CRC Press. Taylor & Francis Group Publ., 2018. 58 p.
7. Vepa R. Nonlinear Control of Robots and Unmanned Aerial Vehicles An Integrated Approach. CRC Press. Taylor & Francis Group Publ., 2016. 544 p.
8. Baldea M., Daoutidis P. Dynamics and Nonlinear Control of Integrated Process Systems. Cambridge, Cambridge University Press Publ., 2012, pp. 2012–257.
9. Lisauskas, S., Udris, D. and Uznyš, D. Direct Torque Control of Induction Drive Using Fuzzy Controller. *Elektronika ir Elektrotechnika*, 2013, vol. 19 (5), pp. 13–16.
10. M. Marozava, D. Hryniuk. Experimental study of the variation dynamic's for air heat exchanger. Mokslas – Lietuvos ateitis. *Science – Future of Lithuania*, 2017, vol. 9, no. 3, pp. 297–301.
11. Hryniuk D. A. Suhorukova I. G., Olyferovich N. M., Stabljetskiy V. A. Assessment of the dynamics of temperature changes along the length of the metal rod. *Avtomatizatsiya i energosberezheniye mashinostroitel'nogo i metallurgicheskogo proizvodstv, tekhnologiya i nadezhnost' mashin, priborov i oborudovaniya: materialy Mezhdunar. nauch.-tekhn. konf.* [Automation and energy saving of machine-building and metallurgical industries, technology and reliability of machines, instruments and equipment: materials of the XIII International Scientific and Technical Conference]. Vologda, 2018, pp. 85–88 (In Russian).
12. Hryniuk D., Suhorukova I., Olyferovich N., Orobei I. Complex tuning of the PID controller according to integral criteria. *Open Conference Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream)*. Vilnius, 2018, pp. 1–4. DOI: 10.1109/eStream.2018.8394117.
13. Hryniuk D., Suhorukova I., Orobei I. Non-linear PID controller and methods of its setting. *Open Conference Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream)*. Vilnius, 2017, pp. 1–4. DOI: 10.1109/eStream.2017.7950327.
14. Suhorukova I. G., Hryniuk D. A., Orobei I. O. Application of non-linear error conversion functions in the PID law. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2013, no. 6: Physics and Mathematics. Informatics, pp. 95–98 (In Russian).

### Информация об авторах

**Гринюк Дмитрий Анатольевич** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: hryniuk@tut.by

**Олиферович Надежда Михайловна** – ассистент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: olyferovich@belstu.by

**Сухорукова Ирина Геннадьевна** – старший преподаватель кафедры программной инженерии. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: irina\_x@rambler.ru

**Оробей Игорь Олегович** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: orobei@tut.

### Information about the authors

**Hryniuk Dzmitry Anatol'yevich** – 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: hryniuk@tut.by

**Olyferovich Nadezhda Mikhaylovna** – 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: olyferovich@belstu.by

**Suhorukova Irina Gennad'yevna** – Senior Lecturer, the Department of Software Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: irina\_x@rambler.ru

**Orobei Igor Olegovich** – 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: orobei@tut.by

*Поступила после доработки 15.06.2021*

УДК 681.53

**Д. А. Гринюк, Н. М. Олиферович, И. Г. Сухорукова**  
Белорусский государственный технологический университет

### **ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА СГЛАЖИВАНИЯ СИГНАЛОВ**

В статье рассматриваются вопросы обработки данных с первичных измерительных преобразователей. Повышение чувствительности современных преобразователей сопряжено с высоким уровнем помех. Однако во многих случаях требуется сохранить полезный сигнал с минимальными искажениями после обработки.

В качестве объекта рассмотрен сигнал с датчика геометрических перемещений при измерении нелинейной деформации. Для задачи был выбран вариант кусочной аппроксимации квадратичной функцией. Оптимизация алгоритма сглаживания проводилась путем исследования на модельном сигнале, который подобен измеренному. Для повышения соотношения сигнал/шум предложено использовать двойное сглаживание. Проведен математический эксперимент для оптимизации предложенной схемы. Основная цель заключалась в определении оптимального значения окна аппроксимации для первичного и вторичного сглаживаний и проведения сравнения с однократным использованием данного алгоритма. Для этого был сгенерирован сигнал с присутствием пяти гармоник информативного сигнала с аддитивным шумом и высокочастотной паразитивной гармоникой. В качестве основного критерия выступало сохранение мощности гармоник информативного сигнала. Результаты показали, что выбранный метод сглаживания имеет чувствительность к оптимальному значению окна. Несмотря на теоретические предпосылки к отсутствию влияния многократного сглаживания на результат, поставленный эксперимент показал эффективность данного подхода. Использование многократного сглаживания позволяет уменьшить нагрузку на вычислительные ресурсы при обработке с одновременным повышением качества для данного метода.

Полученные результаты сглаживания на математической модели позволили оптимизировать процесс обработки измерительной информации в физическом эксперименте.

**Ключевые слова:** измерительный тренд, временные ряды, сглаживание.

**Для цитирования:** Гринюк Д. А., Олиферович Н. М., Сухорукова И. Г. Оптимизация процесса сглаживания сигналов // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 72–79.

**D. A. Hryniuk, N. M. Oliferovich, I. G. Suhorukova**  
Belarusian State Technological University

### **SIGNAL SMOOTHING OPTIMIZATION**

The article deals with the issues of data processing from primary measuring converters. Increasing the sensitivity of modern converters is associated with a high level of interference. However, in many cases it is required to preserve the useful signal with minimal distortion after processing.

As an object, the signal from the sensor of geometric displacements when measuring nonlinear deformation is considered. For the problem, a variant of piecewise approximation by a quadratic function was chosen. The optimization of the smoothing algorithm was carried out by examining the model signal, which is similar to the measured one. To increase the signal-to-noise ratio, it is proposed to use double anti-aliasing. A mathematical experiment was carried out to optimize the proposed scheme. The main goal was to determine the optimal value of the approximation window for primary and secondary smoothing and to compare with a single use of this algorithm. For this, a signal was generated with the presence of five harmonics of an informative signal with additive noise and high-frequency parasitic harmonics. The main criterion was the conservation of the power of the harmonics of the information signal. The results showed that the selected smoothing method is sensitive to the optimal window value. Despite the theoretical prerequisites for the absence of the effect of multiple smoothing on the result, the experiment showed the effectiveness of this approach. The use of multiple anti-aliasing allows to reduce the load on computational resources during processing while improving the quality for this method.

The obtained results of smoothing on a mathematical model made it possible to optimize the process of processing measurement information in a physical experiment.

**Key words:** measuring trend, time series, smoothing.

**For citation:** Hryniuk D.A., Olinerovich N. M., Suhorukova I. G. Signal smoothing optimization. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 72–79 (In Russian).

**Введение.** При анализе информации с измерительных преобразователей всегда встает вопрос о рациональном уменьшении шумов. Более простым вариантом является решение в преобразователях, где полезную информацию несет первая гармоника. Тогда за счет различных цифровых и аналоговых фильтров необходимо сгладить шумы. Фильтры могут несколько увеличивать динамическую ошибку, но не искажают информацию. Однако при проведении исследований встает вопрос о сохранении формы сигнала [1–4]. Это, в первую очередь, характерно для исследований в научных лабораториях. Такие вопросы решаются и при обработке сигналов в томографии [5–8].

Применение различных вариантов линейных фильтров приводит к различному влиянию на амплитуду и фазу гармоник сигналов. Разнообразие методов, используемых в задачах анализа и моделирования временных рядов, велико [9]. При обработке данных используют методы математической статистики [10]: критерий согласия Колмогорова, теорема Вальда, теорема Гофдинга и т. д. В последнее время набирает популярность использование различных нечетких, нейронных, вейвлет-преобразований и других [11]. Так как задачи по выделению полезной информации очень различаются, то приходится использовать различные варианты для достижения приемлемого результата обработки данных.

Популярны варианты фильтров, основанных на скользящем взвешенном среднем; скользящем среднем арифметическом; методе Савицкого – Голея; сглаживании гауссианой [12, 13]. Скользящее среднее – один из самых быстрых методов сглаживания. Однако результат тяжело прогнозируется.

Перспективным является подход, предложенный в работе [12], основанный на методе наименьших квадратов (МНК), который, несмотря на сложность модели, имеет очень низкую вычислительную сложность. Согласно этому методу,  $2n + 1$  последовательных равноотстоящих точек аппроксимируются МНК полиномом  $2k$ -й степени ( $k < n$ ) и в качестве сглаженного значения используется величина полинома в  $(n + 1)$ -й точке. Оказалось, что математически это значение вычисляется путем скользящего взвешенного среднего с весами точек, положительными в центре окна фильтрации.

Для повышения качества возможен вариант многократного сглаживания скользящим взвешенным средним. Однако, согласно

центральной предельной теореме теории вероятностей [14], можно не получить выигрыша. В случае неотрицательных значений весов скользящего взвешенного среднего и при распределении со вторым моментом  $M_2$  можно не добиться улучшения. Это явление не зависит от метода сглаживания. При увеличении числа повторений  $n$  результат будет приближаться к однократному сглаживанию скользящим взвешенным средним с весами, распределенными по закону Гаусса, и вторым моментом  $M_2$ .

Многократное сглаживание имеет смысл при комбинации методов с различным принципом [8]. При медианном сглаживании рассчитывают медианное среднее по  $2n + 1$  точкам, и оно считается сглаженным значением в центральной  $(n + 1)$  точке. Фильтр Калмана для формирования результата фильтрации использует рекурсию предыдущих значений. При некоторых структурах фильтра Калмана получается эквивалент экспоненциально взвешенного среднего [15, 16].

**Цель и методика исследований.** При проведении исследований механических деформаций композитных структур была выявлена проблема сильной зашумленности измерительного тренда (рис. 1). Стояла задача выбора метода и настроек для максимального сохранения формы сигнала. Для обработки данных был выбран алгоритм с использованием метода наименьших квадратов [17, 18].

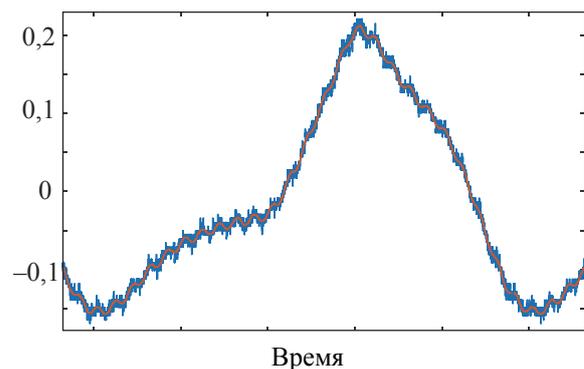


Рис. 1. Измерительный тренд с датчика контроля деформации и результат его сглаживания

Квадратичная аппроксимация

$$y(t) = d_1 + d_2t + d_3t^2, \tag{1}$$

где

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_3 & w_2 & w_1 \\ w_4 & w_3 & w_2 \\ w_5 & w_4 & w_3 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}; \tag{2}$$

$$w_j = (t_1)^{j-1} + (t_2)^{j-1} + \dots + (t_N)^{j-1}; \quad (3)$$

$$b_j = (t_1 x_1)^{j-1} + (t_2 x_2)^{j-1} + \dots + (t_N x_N)^{j-1}; \quad (4)$$

$$t_k = [0 \Delta t 2\Delta t \dots (N-2) \Delta t (N-1) \Delta t], \quad (5)$$

здесь  $\Delta t$  – время квантования.

Одним из основных параметров оптимальной выборки данного метода является выбор окна усреднения  $N$  и возможность использования многократного сглаживания.

С этой целью было произведено моделирование и последующий анализ двух сигналов той же частоты с наложением шумов и помех, которые характерны для исходной задачи.

Один из сигналов ( $MS_1$ ) (рис. 2) представлял собой гармонический сигнал с наложением псевдослучайного шума. В другом случае был смоделирован сигнал ( $MS_2$ ) сложной формы с пятью гармониками в близких соотношениях, которые характерны для сигнала с первичного преобразователя. К последнему варианту была добавлена синусоидальная высокочастотная помеха с некратной основной гармоникой, что характерно для сигнала на рис. 1. Исходные сигналы можно видеть на рис. 2, 3.

По сравнению с рис. 1 амплитуда шумов была увеличена для выявления зависимости. Каждый из модельных сигналов имел эквивалентное количество точек на период (8022), как и у экспериментального сигнала.

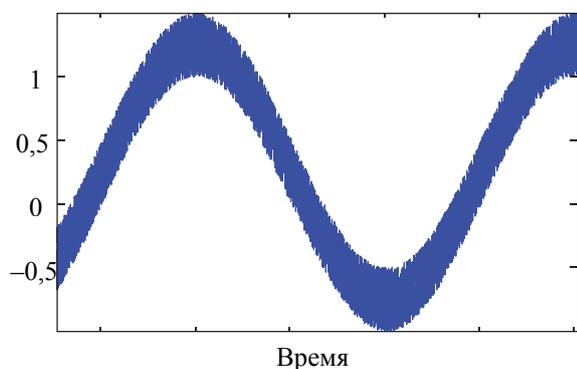


Рис. 2. Модельный сигнал  $MS_1$

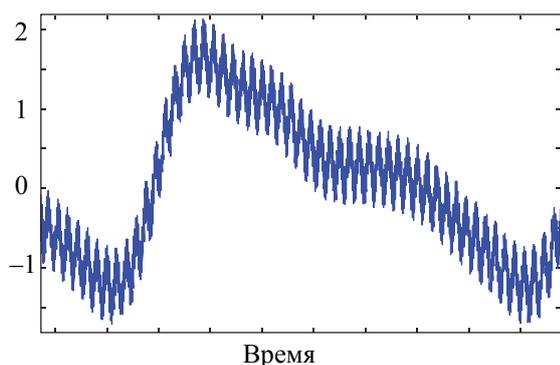


Рис. 3. Модельный сигнал  $MS_2$

Каждый из модельных сигналов сглаживался выбранным алгоритмом дважды в разных комбинациях  $N_1$  первичного и  $N_2$  вторичного тактов.  $N_1$  принимал следующие значения: 5, 9, 13, 17, 23, 29, 35, 43, 51, 105, 151, 281, 341, 381, 421, 521, 621, 721, 821, 921, 969, 1017, 1065, 1111, 1301, 1491. Для оценки качества, мощности шумов и полезных сигналов использовались спектральный анализ и теорема Парсеваля.

**Результаты и обсуждение.** Результаты сглаживания первого модельного сигнала показаны на рис. 4–6. Увеличение параметров  $N_1$  и  $N_2$ , как было сказано выше, демонстрирует, что увеличение окна способствует асимптотическому сходимости отношения сигнал/шум между однократным и двукратным сглаживанием (рис. 4).

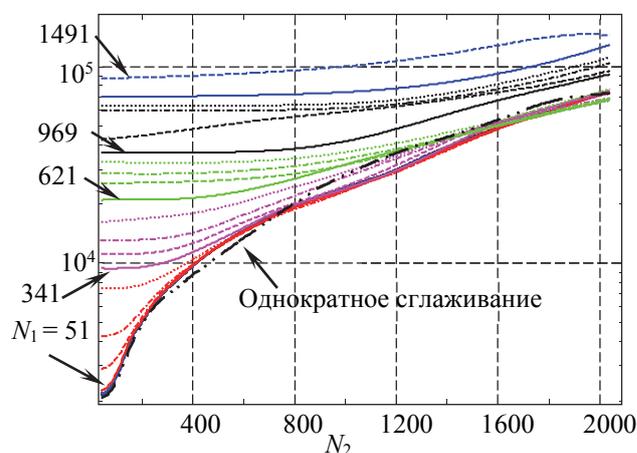


Рис. 4. Отношение исходный сигнал/шум после сглаживания для  $MS_1$

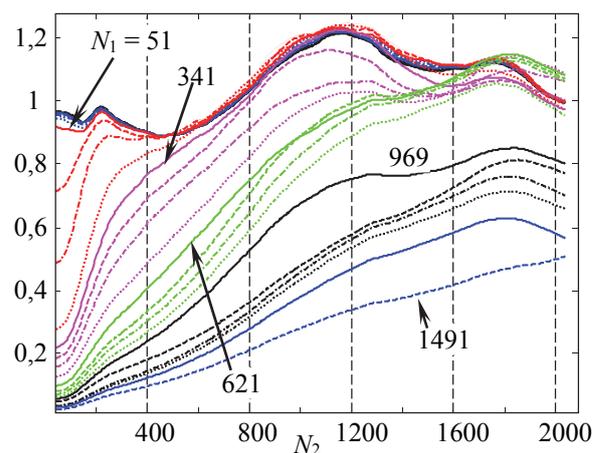


Рис. 5. Отношение мощности помех при однократном и двукратном сглаживании

Следует обратить внимание на рис. 5, 6, они демонстрируют, что после значения  $N_2$  1000–1200 намечается устойчивая тенденция изменения амплитуды основного сигнала. При этом, если первичное сглаживание происходило

в диапазоне до 300, то амплитуда полезного сигнала незначительно изменяется. Оптимальным выбором здесь будет двукратное первичное  $N_1 = 250-300$  и вторичное  $N_2 = 1200-1800$  сглаживание. Даже при  $N_1 = 621$  и  $N_2 = 1200-1400$  позиция больше выигрышная, чем при однократном сглаживании (рис. 6, а).

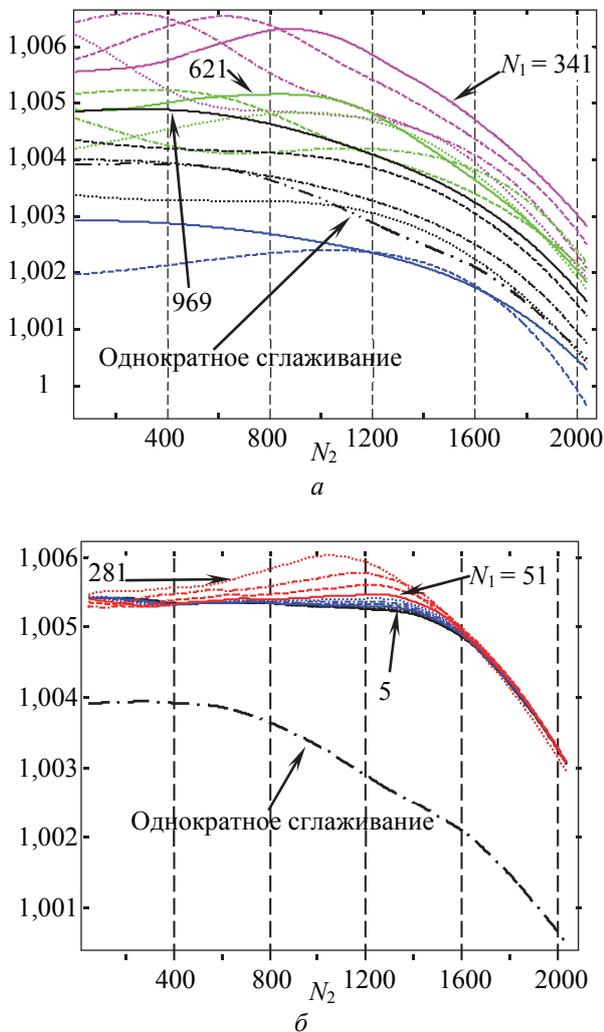


Рис. 6. Зависимость амплитуды первой гармоники от  $N_2$  после второго такта сглаживания для  $MS_1$  при  $N_1$ : а – от 341 до 1491; б – от 5 до 281

В целом при сглаживании модельного сигнала  $MS_2$  наблюдается схожая ситуация, однако присутствуют нюансы (рис. 6–8). Наличие гармонической помехи показывает существенное влияние на результат сглаживания величины  $N_1$  и  $N_2$  как при однократном, так и при двукратном сглаживании.

При двукратном сглаживании для значений  $N_1$  выше 341 гармоническая помеха не проявляется. В этом случае на окно усреднения получалось больше трех периодов гармонической помехи.

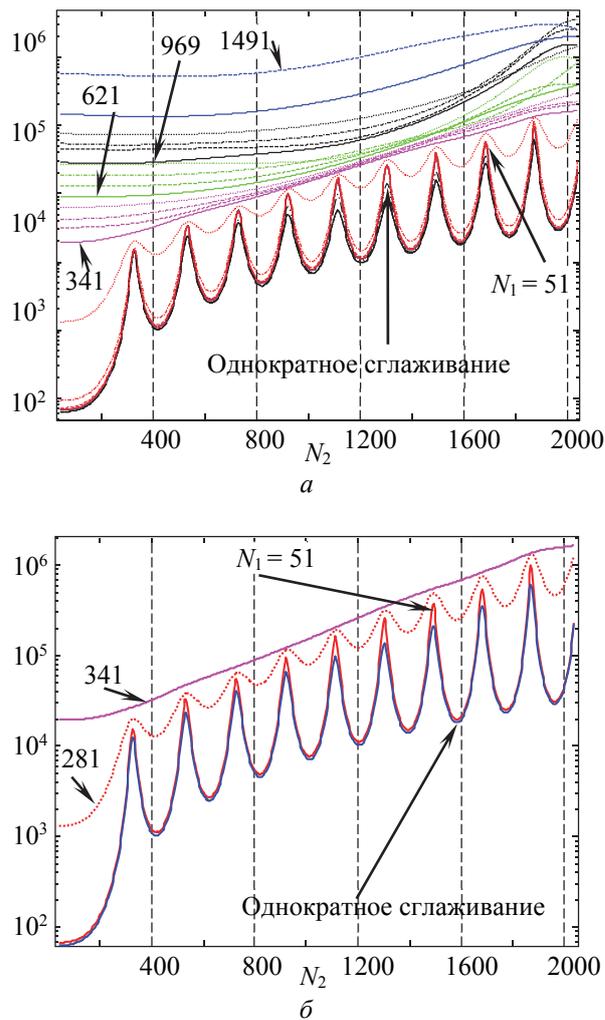


Рис. 7. Отношение исходный сигнал/шум после сглаживания для  $MS_2$ : а – весь диапазон; б – от 5 до 281 для отдельных  $N_1$

Согласно рис. 8, однократное сглаживание выигрывает перед двукратным только при небольших значениях  $N_1 = 9-13$ . Во всех остальных случаях двукратное сглаживание дает лучший результат. Особенно, если при выборе значения  $N_1$  учитывать волновой характер подавления гармонической помехи. При значениях  $N_1$  выше 341 превосходство двукратного сглаживания является очень существенным даже при небольших значениях  $N_2$ .

В отношении изменений амплитуды информативного канала наблюдается схожая картина, как и для предыдущего модельного сигнала. Существует диапазон, в котором амплитуда подвергается минимальному влиянию вследствие процесса сглаживания (рис. 9). Однако следует отметить, что изменение амплитуды более существенно, чем для модельного сигнала  $MS_1$ . Уменьшение амплитуды в первом случае на рассматриваемом диапазоне не достигало 1%, здесь же при максимальном значении  $N_1$  и  $N_2$  достигает почти 5%.

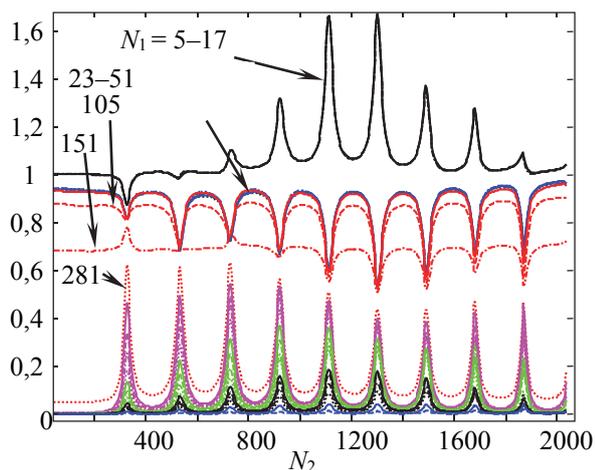


Рис. 8. Отношение мощности помех при однократном и двукратном сглаживании сложного сигнала

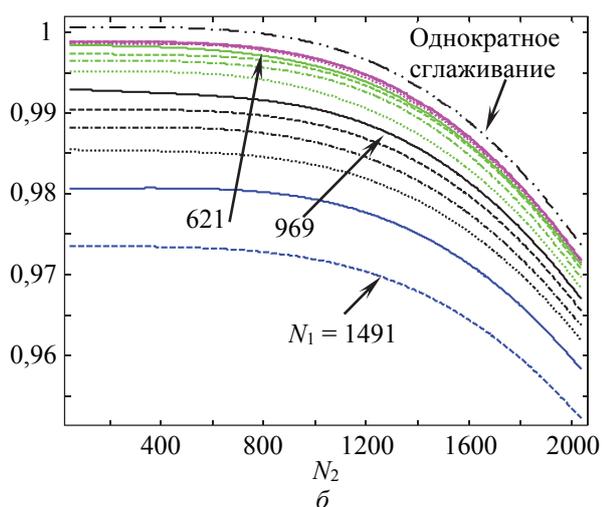
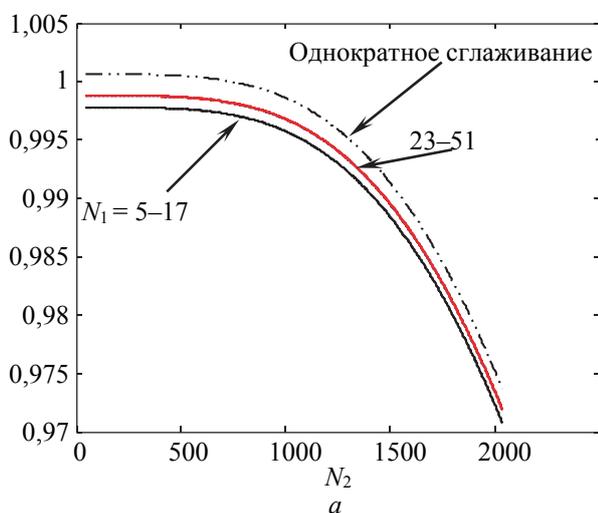


Рис. 9. Зависимость мощности информативного сигнала от  $N_2$  после второго такта сглаживания для  $MS_1$  при  $N_1$ :  
 а – от 5 до 281;  
 б – от 341 до 1491

Присутствие гармонической помехи не проявляется на рис. 9, в то же время амплитуда первой гармоники как при однократном, так и при двукратном сглаживании испытывает влияние данного воздействия. Только при значениях  $N_1$  выше 341 влияние синусоидальной помехи стремится к нулю.

Однократное сглаживание приводит к незначительному повышению мощности полезного сигнала, однако при двукратном, даже при начальном, диапазоне наблюдаются потери мощности (рис. 10).

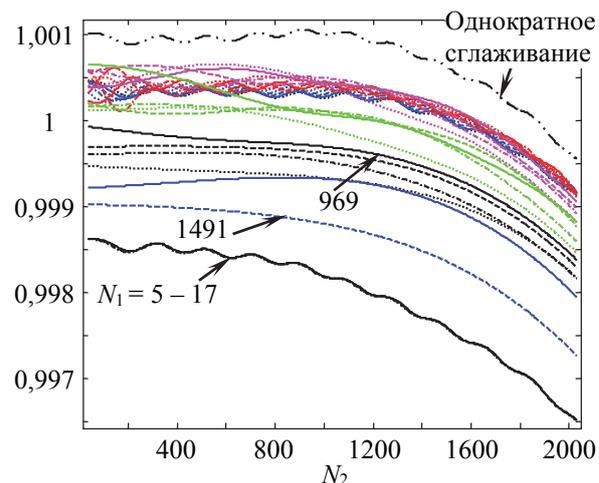


Рис. 10. Изменение амплитуды первой гармоники

Характер кривых на рис. 11. для  $MS_2$  имеет серьезные отличия от кривых для  $MS_1$ .

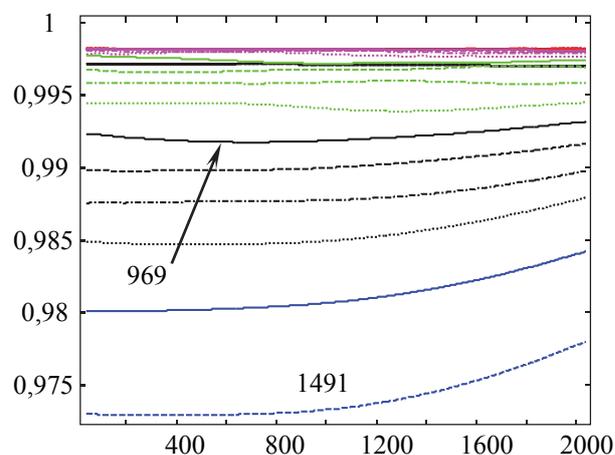


Рис. 11. Отношение мощностей полезного сигнала при однократном и двукратном сглаживании для  $MS_2$

На рис. 12 представлены тренды временных характеристик в местах наибольших градиентов для некоторых значений  $N_1$  и  $N_2$ . Сигналы имеют разную фазу для облегчения анализа.

Визуально из представленных фрагментов следует, что при выборе предпочтений настроек параметров сглаживания диапазон при данных характеристиках помех следует отдавать значениям  $N_1 = 330-800$  и  $N_2 = 400-1000$ . Следует

отметить, что выбранный алгоритм сглаживания вносит свои коррективы в постоянную составляющую сигнала. Отсутствие постоянной составляющей в исходном сигнале не гарантирует ее появления после сглаживания.

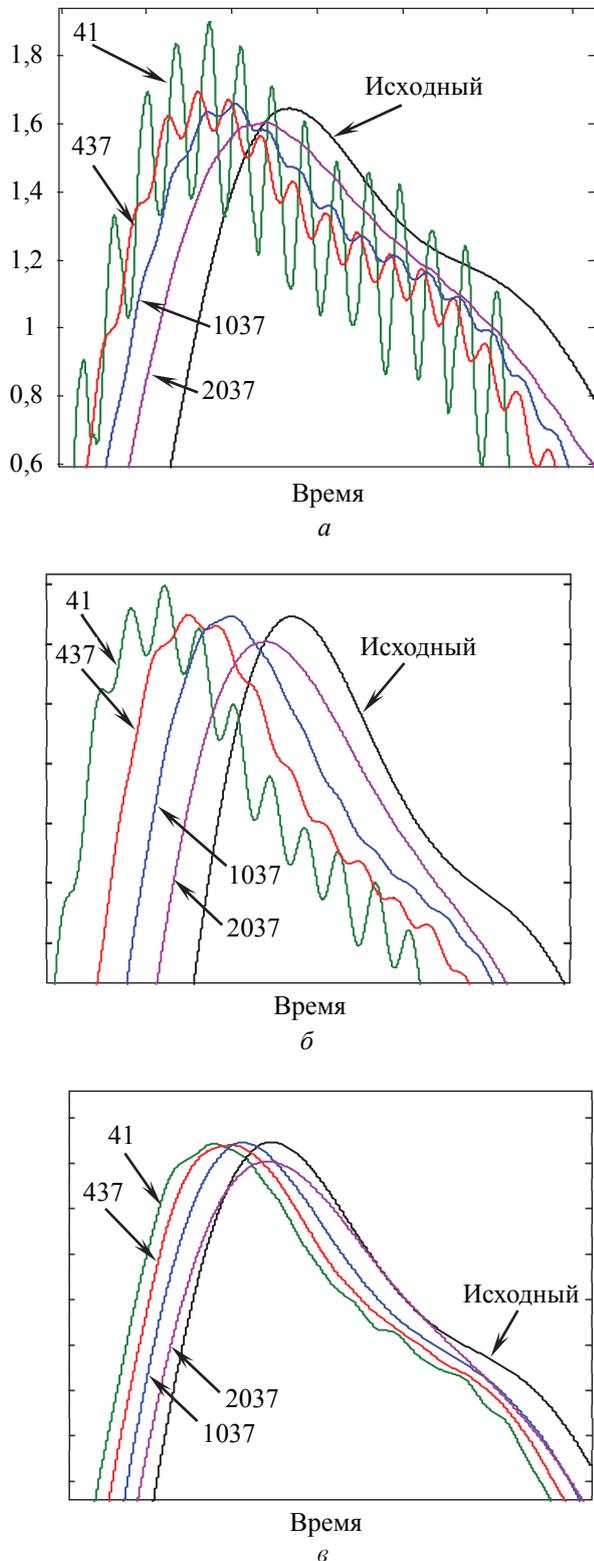


Рис. 12. Результат сглаживания для  $N_2 = 41, 437, 1037, 2037$  при  $N_1$ :  $a - 51$ ;  $b - 281$ ;  $v - 341$

Из вышесказанного следует, что при настройке алгоритма сглаживания методом наименьших квадратов следует ориентироваться на особенности измерительного тренда.

Несмотря на наличие похожего характера шумов для  $MS_1$  и  $MS_2$ , рекомендации по выбору алгоритма для решения прикладных задач сглаживания у таких сигналов может быть разным. Если для первого модельного сигнала использование двукратного сглаживания не очевидно, то для второго сигнала двукратное сглаживание дает значительный выигрыш.

Нелинейный характер работы фильтра не всегда позволяет прогнозировать его работу. Современные цифровые системы редко формируют тренды с нормальным распределением шумов и помех.

Кроме полезной информации, очень часто в измерительном тренде наблюдаются помехи от сети питания и выпрямителей, особенностей работы аналогово-цифровых преобразователей (рис. 1).

При решении задачи, которая была обозначена в начале статьи, осуществлена оценка спектральных характеристик основных гармоник полезного сигнала и шумовых составляющих.

Затем произведено моделирование и нахождение компромиссных значений  $N_1$  и  $N_2$ , при которых наблюдаются небольшие изменения мощности полезных гармоник и наибольшее подавление шумовых составляющих. После этого уже происходила окончательная обработка первичной информации. Особенностью исходных данных было плавание частоты полезного сигнала.

Полученные результаты зависимости мощности от  $N$  (например, рис. 9, 10), в частности отсутствие зависимости мощности от значения  $N$  на начальном диапазоне значений, были использованы для точного определения периода колебаний. После оптимизации процесса сглаживания флуктуации частоты не оказывали влияния на качество обработки измерительной информации.

**Заключение.** 1. Использование метода наименьших квадратов предоставляет гибкие возможности по сглаживанию измерительной информации.

2. Несмотря на теоретические предпосылки, многократное сглаживание может быть более эффективным решением задачи обработки измерительной информации.

3. Наличие в измерительном тренде паразитных гармонических составляющих требует аккуратной настройки процесса сглаживания.

### Список литературы

1. Богослав Н. М., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Экспериментальное исследование динамики круговой пропитки // Труды БГТУ. 2013. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 99–103.
2. Сухорукова И. Г., Гринюк Д. А., Оробей И. О. Повышение чувствительности измерителя протечек запорной арматуры // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 132–136.
3. Oliferovich N., Hryniuk D., Orobei I. Measuring the speed of capillary soaking with adaptation regarding coordinates // 2015 Open Conference of Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream 2015). Vilnius, Lithuania, 21 April 2015. Vilnius, 2015. P. 1–4.
4. Гринюк Д. А., Сухорукова И. Г., Олиферович Н. М. Использование алгоритмов аппроксимации для сглаживания трендов измерительных преобразователей // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2017. № 2 (200). С. 82–87.
5. Felinger A. Data analysis and signal processing in chromatography. *Data Handling in Science and Technology*, Elsevier, 1998. Vol. 21. 413 p.
6. Grushka E. Characterization of Exponentially Modified Gaussian Peaks in Chromatography // *Anal. Chem.* 1972. Vol. 44, no. 11. P. 1733–1738. DOI: 10.1021/ac60319a011.
7. Reconstruction of chromatographic peaks using the exponentially modified Gaussian function / Kalambet Y. A. [et al] // *J. Chemom.* 2011. Vol. 25, no. 7. P. 352–356. DOI: 10.1002/cem.1343
8. Каламбет Ю. А. Оптимизация параметров линейного сглаживания хроматографических пиков // *Научное приборостроение*. 2019. Т. 29, № 3. С. 51–60.
9. Hangos K. M., Cameron I. T. Process modelling and model analysis. San Diego: Academic Press, 2001. 543 p.
10. *Mathematical Statistics*. Samuel S. Wilks. Wiley, New York, 1962. XVI. 644 p.
11. Mallat S. A wavelet tour of signal processing. San Diego: Academic Press, 1999. 620 с.
12. Savitzky A., Golay M. J. E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures // *Anal. Chem.* 1964. Vol. 36, no. 8. P. 1627–1639. DOI: 10.1021/ac60214a047.
13. Delley R. Series for the exponentially modified Gaussian peak shape // *Anal. Chem.* 1985. Vol. 57, no. 1. P. 388–388. DOI: 10.1021/ac00279a094.
14. Вентцель Е. С. Теория вероятностей. М.: Высшая школа, 1999. 576 с.
15. Kaniewski P., Gil R., Konatowski S. Estimation of UAV position with use of smoothing algorithms // *Metrol. Meas. Syst.*, 2017. Vol. 24, no. 1. P. 127–142.
16. Kalman R. E. A new approach to linear filtering and prediction problems // *J. Basic Eng.* 1960. Vol. 82, no. 1. P. 35–45. DOI: 10.1115/1.3662552.
17. Hryniuk D., Suhorukova I., Oliferovich N. Adaptive smoothing and filtering in transducers // 2016 Open Conference of Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream 2016), Vilnius, Lithuania, 21 April 2016. Vilnius, 2016. P. 1–4.
18. Катковник В. Я. Непараметрическая идентификация и сглаживание данных: метод локальной аппроксимации. М.: Наука, 1985. 336 с.

### References

1. Bogoslav N. M., Hryniuk D. A., Orobei I. O. Experimental research of the dynamics of circular impregnation. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2013, no. 6: Physics and Mathematics. Informatics, pp. 99–103 (In Russian).
2. Suhorukova I. G., Hryniuk D. A., Orobei I. O. Increased sensitivity stand leaks stop valves. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2015, no. 6: Physics and Mathematics. Informatics, pp. 132–136 (In Russian).
3. Oliferovich N., Hryniuk D., Orobei I. Measuring the speed of capillary soaking with adaptation regarding coordinates. *2015 Open Conference of Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream 2015)*, Vilnius, Lithuania, 21 April 2015. Vilnius, 2015, pp. 1–4.
4. Hryniuk D. A., Suhorukova I. G., Oliferovich N. M. Using Approximation Algorithms to Smooth Transmitter Trends. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2017, no. 2: Physics and Mathematics. Informatics, pp. 82–87 (In Russian).
5. Felinger A. Data analysis and signal processing in chromatography. *Data Handling in Science and Technology*. 1998, Elsevier, vol. 21. 413 p.
6. Grushka E. Characterization of Exponentially Modified Gaussian Peaks in Chromatography. *Anal. Chem.*, 1972, vol. 44, no. 11, pp. 1733–1738. DOI: 10.1021/ac60319a011.
7. Kalambet Y. A., Kozmin Y. P., Mikhailova K. V., Nagaev I. Y., Tikhonov P. N. Reconstruction of chromatographic peaks using the exponentially modified Gaussian function. *J. Chemom.*, 2011, vol. 25, no. 7, pp. 352–356. DOI: 10.1002/cem.1343.

8. Kalambet Yu. A. Optimization of parameters of linear smoothing of chromatographic peaks. *Nauchnoye priborostroyeniye* [Scientific instrumentation], 2019, vol. 29, no 3 pp. 51–60.
9. Hangos K. M., Cameron I. T. Process modelling and model analysis. San Diego, Academic Press Publ., 2001. 543 p.
10. Mathematical Statistics. Samuel S. Wilks. Wiley, New York, 1962. XVI. 644 p.
11. Mallat S. A wavelet tour of signal processing. San Diego, Academic Press Publ., 1999. 620 с.
12. Savitzky A., Golay M. J. E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Anal. Chem.*, 1964, vol. 36, no. 8, pp. 1627–1639. DOI: 10.1021/ac60214a047.
13. Delley R. Series for the exponentially modified Gaussian peak shape. *Anal. Chem.*, 1985, vol. 57, no. 1, pp. 388–388. DOI: 10.1021/ac00279a094.
14. Wentzel E. S. *Teoriya veroyatnostey* [Probability theory]. Moscow, Vysshaya Shkola Publ., 1999, 576 с.
15. Kaniewski P., Gil R., Konatowski S. Estimation of UAV position with use of smoothing algorithms. *Metrol. Meas. Syst.*, 2017, vol. 24, no. 1, pp. 127–142.
16. Kalman R. E. A new approach to linear filtering and prediction problems. *J. Basic Eng.*, 1960, vol. 82, no. 1, pp. 35–45. DOI: 10.1115/1.3662552.
17. Hryniuk D., Suhorukova I., Olyferovich N. Adaptive smoothing and filtering in transducers. *2016 Open Conference of Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream 2016)*, Vilnius, Lithuania, 21 April 2016. Vilnius, 2016, pp. 1–4.
18. Katkovnik V. Ya. *Neparametricheskaya identifikatsiya i sglazhivaniye dannykh: metod lokal'noy approksimatsii* [Nonparametric Identification and Data Smoothing: Method of Local Approximation]. Moscow, Nauka Publ., 1985. 336 p.

#### Информация об авторах

**Гринюк Дмитрий Анатольевич** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: hryniuk@tut.by

**Олиферович Надежда Михайловна** – ассистент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: oliferovich@belstu.by

**Сухорукова Ирина Геннадьевна** – старший преподаватель кафедры программной инженерии. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: irina\_x@rambler.ru

#### Information about the authors

**Hryniuk Dzmitry Anatol'yevich** – 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: hryniuk@tut.by

**Olyferovich Nadezhda Mikhaylovna** – 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: oliferovich@belstu.by

**Suhorukova Irina Gennad'yevna** – Senior Lecturer, the Department of Software Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: irina\_x@rambler.ru

Поступила после доработки 15.06.2021

УДК 519.687.1

**М. В. Дубовик, В. В. Смелов, Г. Л. Тимонович**  
Белорусский государственный технологический университет

### ТОЧНЫЕ ГРАНИЦЫ ЭФФЕКТИВНОСТИ АЛГОРИТМОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАПРОСОВ МЕЖДУ СЕРВЕРАМИ

Статья посвящена оценке эффективности алгоритмов диспетчеризации http-запросов между серверами. Для оценки эффективности предлагается найти ее теоретический максимум и минимум путем построения точной верхней и точной нижней границ эффективности алгоритмов распределения запросов между серверами. Главной проблемой является построение точной верхней границы. В целом вычисление границ можно свести к построению и анализу множества рациональных планов распределения между серверами поступающих от клиентов запросов, оценке эффективностей алгоритмов распределения запросов и последующему нахождению функций экстремума эффективности в каждый момент времени. Предложенный метод вычисления точных границ эффективности предполагает, что известны конфигурация программной системы, последовательность запросов во времени и их трудоемкость. Алгоритм, используемый методом для вычисления границ, имеет экспоненциальную сложность от времени и является трудноразрешимым для реальных конфигураций программных систем. Таким образом, этот метод для оценки эффективности алгоритмов диспетчеризации http-запросов является непригодным для применения в инженерных задачах.

**Ключевые слова:** алгоритмы распределения нагрузки, балансировка нагрузки, оценка эффективности, точные границы эффективности, план распределения запросов.

**Для цитирования:** Дубовик М. В., Смелов В. В., Тимонович Г. Л. Точные границы эффективности алгоритмов распределения запросов между серверами // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 80–86.

**M. V. Dubovik, V. V. Smelov, G. L. Timonovich**  
Belarusian State Technological University

### EXACT BOUNDARIES FOR THE EFFICIENCY OF THE ALGORITHMS FOR DISTRIBUTING REQUESTS BETWEEN SERVERS

The article is devoted to evaluating the efficiency of algorithms for dispatching http requests between servers. To evaluate the efficiency, it is proposed to find the theoretical maximum and minimum efficiency by constructing the exact upper and exact lower bounds for the efficiency of algorithms for distributing requests between servers. The main problem is plotting an accurate upper bound. In general, the calculation of the boundaries can be reduced to the construction and analysis of a set of rational plans for the distribution of requests from clients between the servers, the evaluation of the efficiency of the algorithms for the distribution of requests, and then finding of the efficiency extremum functions at each moment of time. The proposed method for calculating the exact boundaries of efficiency assumes that the configuration of the software system, the sequence of requests in time and their complexity are known. The algorithm used by the method for calculating the boundaries has exponential time complexity and is difficult to solve for real configurations of software systems. Thus, this method for evaluating the efficiency of algorithms for dispatching http requests is unsuitable for use in engineering problems.

**Key words:** load balancing algorithms, load balancing, efficiency evaluation, precise efficiency boundaries, requests distribution plan.

**For citation:** Dubovik M. V., Smelov V. V., Timonovich G. L. Exact boundaries of the efficiency of the algorithms for distributing requests between servers. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 2 (248), pp. 80–86 (In Russian).

**Введение.** В статье [1] описывается математическая модель для анализа алгоритмов распределения запросов между серверами (далее ARD-алгоритмы, от англ. algorithms for requests distributing) в программной системе. Формально модель описывается четверкой:

$$W = \left\langle \left\{ C_j, j = \overline{1, j} \right\}, \left\{ K_l, l = \overline{1, l} \right\}, B, \left\{ S_i, i = \overline{1, i} \right\} \right\rangle, \quad (1)$$

где  $C_j, j = \overline{1, j}$  – множество клиентов;  $K_l, l = \overline{1, l}$  – множество категорий запросов;  $B$  – балансировщик;  $S_i, i = \overline{1, i}$  – множество серверов.

Если кратко рассматривать модель, то каждый клиент  $C \in \{C_j, j = \overline{1, j}\}$  представляет собой двойку:

$$C = \langle K, \lambda(t) \rangle, \quad (2)$$

где  $K \in \{K_l, l = \overline{1, l}\}$  – категория запросов, генерируемых клиентом;  $\lambda(t)$  – интенсивность запросов, генерируемых клиентом.

Балансировщик, в свою очередь, представляет собой четверку:

$$B = \langle P, I_B, A, O_B \rangle, \quad (3)$$

где  $P$  – процедура распознавания категории запроса;  $I_B$  – процедура обработки запроса;  $A$  – алгоритм выбора сервера для обработки запроса;  $O_B$  – процедура обработки ответа.

Сервер  $S \in \{S_i, i = \overline{1, i}\}$  представляет собой пятерку:

$$S = \langle h, k, F, I_S, O_S \rangle, \quad (4)$$

где  $h$  – максимальное количество запросов, которые могут одновременно обрабатываться сервером;  $k$  – коэффициент, который при умножении на значение категории запроса дает время, затрачиваемое данным сервером на обработку этого запроса;  $F$  – процедура вычисления величины дополнительного времени обработки запроса из-за загруженности сервера;  $I_S$  – процедура обработки запроса;  $O_S$  – процедура обработки ответа.

Критерием эффективности  $\varepsilon$  ARD-алгоритма на интервале времени  $(0, t)$  в [1] принято отношение:

$$\varepsilon(t) = \frac{M(t)}{L(t)}, \quad (5)$$

где  $L(t)$  – количество поступивших в балансировщик запросов;  $M(t)$  – количество поступивших в балансировщик ответов к заданному моменту времени  $t$ . При этом предполагается, что чем это отношение ближе к 1, тем более эффективным считается алгоритм.

В общем случае эффективность ARD-алгоритма зависит от конфигурации программной системы (количество серверов и их производительность, интенсивность клиентских запросов и их трудоемкость и т. д.) и может изменяться в течение времени. Очевидно, что оценка эффективности алгоритма имеет смысл для заданной конфигурации и на данный момент времени: сравнение эффективности двух ARD-алгоритмов для разных конфигураций программной системы и/или в разные моменты времени, может дать различные результаты.

Для оценки  $E_A(t)$  эффективности ARD-алгоритма  $A$  удобно иметь оценки нижней  $\underline{E}(t)$  и верхней  $\overline{E}(t)$  границ эффективности ARD-алгоритма, вычисленные при заданных условиях:

$$P = \left\langle \left\{ C_j, j = \overline{1, j} \right\}, \left\{ K_l, l = \overline{1, l} \right\}, \left\{ S_i, i = \overline{1, i} \right\} \right\rangle. \quad (6)$$

Графически верхняя и нижняя границы эффективности ARD-алгоритма представлены на рис. 1.

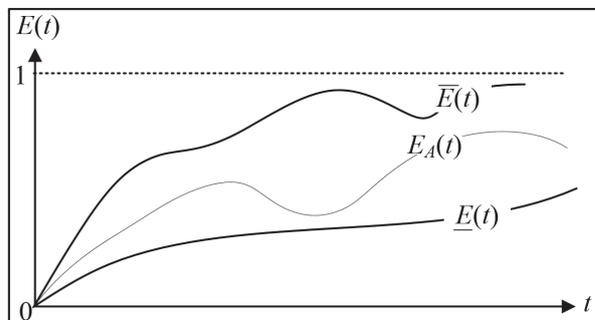


Рис. 1. Границы эффективности ARD-алгоритмов

Очевидно, что в любой момент времени  $t$  эффективность любого ARD-алгоритма  $E_A(t) \leq 1$  и в качестве верхней границы можно было бы выбрать функцию  $\overline{E}(t) \equiv 1$ , но эта оценка не дает возможности ответить на вопрос: достижима ли в принципе (теоретически) при заданных условиях  $P$  заданная эффективность  $\varepsilon$ . Нижняя граница  $\underline{E}(t) \equiv 0$  тоже малоинформативная, поэтому в качестве оценки нижней границы целесообразно выбрать эффективность какого-нибудь известного и просто реализуемого алгоритма, например Round Robin [2].

Интерес представляет величина, отражающая теоретический максимум эффективности ARD-алгоритмов. Далее такую оценку  $\overline{E}(t)$  будем называть точной верхней границей эффективности ARD-алгоритмов. При этом следует отметить еще раз, что точная оценка верхней границы зависит от заданных условий  $P$ , поэтому, чтобы подчеркнуть это, будем использовать обозначение  $\overline{E}_P(t)$ .

Ниже рассматривается математическая постановка задачи вычисления точной верхней границы  $\overline{E}_P(t)$  эффективности ARD-алгоритмов и предложен метод ее вычисления.

**Основная часть.** Очевидно, что теоретический максимум  $\overline{E}_P(t)$  эффективности на заданном участке времени  $[0, t_e]$  может быть достигнут алгоритмом  $A$  в том случае, если он может предсказать моменты времени и трудоемкости поступающих от клиентов запросов, а также производительности серверов и моменты времени завершения обработки серверами запросов. В этом случае, задача вычисления функции  $\overline{E}_P(t)$  сводится к задаче поиска и анализа планов распределения между серверами поступающих от клиентов запросов (далее для краткости – ARD-планов).

На рис. 2 представлен пример построения ARD-плана на отрезке дискретного времени  $[0, 10]$ . План описывает распределение между двумя серверами запросов, поступающих от двух клиентов.

---t---	C00	C01	S00[k=01,h=01]	S01[k=02,h=02]	L	M	M/L	h[0]	h[1]	
0:	1	3	0	0	2	0	0	00	01	--- 0: C00->S00 C01->S01
1:	0	3	1	0	3	1	0,33	00	01	--- 1: C01->S00
2:	1	0	0	0	4	1	0,25	00	00	--- 2: C00->S01
3:	0	3	0	0	5	1	0,2	00	00	--- 3: C01->X
4:	0	3	1	1	6	3	0,5	00	01	--- 4: C01->S00
5:	1	0	0	0	7	3	0,43	00	00	--- 5: C00->S01
6:	1	3	0	1	9	4	0,44	00	01	--- 6: C00->X C01->X
7:	0	3	1	1	10	6	0,6	00	02	--- 7: C01->S00
8:	1	3	0	0	12	6	0,5	00	01	--- 8: C00->S01 C01->X
9:	1	0	0	0	13	6	0,46	00	01	--- 9: C00->X
10:	1	0	1	1	14	8	0,57	00	02	---10: C00->S00

Рис. 2. Пример ARD-плана

Собственно, план на рис. 2 представлен в крайнем правом столбце, содержащем символическое описание распределения запросов в каждый момент времени  $t \in [0, 10]$ . При этом моменты времени  $t$  обозначены в плане первым слева столбцом и продублированы в последнем. Например, запись «0: C00 → S00 C01 → S01» обозначает, что в момент времени  $t = 0$  запрос клиента 0 направлен на обработку серверу 0 и запрос клиента 1 направлен серверу 1, запись «4: C01 → S00» соответствует отправке запроса клиента 1 серверу 0 в момент времени  $t = 4$ .

Трудоёмкость запросов указывается в столбцах с заголовками C00 и C01. Например, в момент времени  $t = 0$  поступило два запроса: от клиента 0 с трудоёмкостью 1 и от клиента 1 с трудоёмкостью 3. В момент времени  $t = 4$  поступает один запрос от клиента 1 с трудоёмкостью 3.

Моменты времени завершения обработки серверами запросов описываются в столбцах с заголовками S00 и S01. Каждый сервер характеризуется  $h$  – максимальным количеством подключений в один момент времени и  $k$  – коэффициентом трудоёмкости выполнения запросов. Сервер 0 в каждый момент времени может обслуживать только одного клиента ( $h = 1$ ), а продолжительность выполнения им запросов совпадает с их трудоёмкостью ( $k = 1$ ). Сервер 1 может одновременно обслуживать двух клиентов ( $h = 2$ ), при этом продолжительность выполнения запросов в два раза больше их трудоёмкости ( $k = 2$ ). Например, если в момент времени  $t = 0$  поступил запрос от клиента 0 с трудоёмкостью 1 и этот запрос распределен серверу 0, то сервер может его исполнять только в том случае, если он в этот момент не обслуживает другого клиента, и выполнять его он будет 1 единицу времени. Если от клиента 1 в этот же момент времени  $t = 0$  поступит запрос с трудоёмкостью 3 и он будет направлен для обработки серверу 1, то сервер примет его к исполнению (так как он не занят обработкой других запросов) и будет исполнять его 6 единиц времени. В столбцах S00 и S01 указывается количество обработанных запросов (отправленных

ответов) в этот момент времени. Например, сервер 0 в момент времени  $t = 1$  завершит обработку одного запроса, поступившего в момент времени  $t = 0$ , а сервер 1 в момент времени  $t = 6$  завершит обработку запроса трудоёмкости 3, поступившего на обработку в момент времени  $t = 0$ .

Столбцы с заголовками  $h[0]$  и  $h[1]$  описывают количество неиспользованных серверами подключений в каждый момент времени. Например, в момент времени  $t = 4$  сервер 0 больше не может принимать на обработку запросы (значение равно 0), а сервер 1 может принять на обработку еще один запрос.

Для каждого момента времени подсчитывается с нарастающим итогом количество поступивших от клиентов запросов (столбец  $L$ ), количество обработанных запросов ( $M$ ) и эффективность ( $M/L$ ). Например, на момент завершения времени  $t = 4$  в систему поступило 6 запросов, обработано из них 3, эффективность системы  $3/6 = 0,5$ .

Обратим внимание, в плане (рис. 2) на момент времени  $t = 3$ : запись «3: C01 → X» обозначает, что в момент времени  $t = 3$  алгоритм распределения не смог по каким-то причинам (будет пояснение ниже) выбрать сервер для обработки поступившего от клиента 1 запроса. Этот случай соответствует отказу в обслуживании и потере системой запроса, что приводит к снижению производительности. Заметим, что отказы есть и в другие моменты времени  $t = 6, 8, 9$ .

Во всех случаях имеется возможность назначить сервер 1 ( $h[1] > 1$ ) для обработки запроса. Объясняется это свойством применяемого алгоритма планирования, который распределяет запросы между серверами строго равномерно, не учитывая предельную их загруженность. Стоит отметить, что при распределении запросов выбираемые в плане серверы чередуются.

На рис. 3 приведены примеры еще двух ARD-планов, в основе которых задача равномерного распределения запросов.

---t---	c00	c01	S00[k=01,h=01]	S01[k=02,h=02]	L	M	M/L	h[0]	h[1]	
0:	1	3	0	0	2	0	0	00	01	--- 0: C00->S00 C01->S01
1:	0	3	1	0	3	1	0,33	00	01	--- 1: C01->S00
2:	1	0	0	0	4	1	0,25	00	00	--- 2: C00->S01
3:	0	3	0	0	5	1	0,2	00	00	--- 3: C01->X
4:	0	3	1	1	6	3	0,5	00	01	--- 4: C01->S00
5:	1	0	0	0	7	3	0,43	00	00	--- 5: C00->S01
6:	1	3	0	0	9	4	0,44	00	00	--- 6: C00->S01 C01->X
7:	0	3	1	1	10	6	0,6	00	01	--- 7: C01->S00
8:	1	3	0	1	12	7	0,58	00	00	--- 8: C00->S01 C01->S01
9:	1	0	0	0	13	7	0,54	00	00	--- 9: C00->X
10:	1	0	1	1	14	9	0,64	00	01	---10: C00->S00
11:	0	0	1	0	14	10	0,71	01	01	---11:
12:	0	0	0	0	14	10	0,71	01	01	---12:
13:	0	0	0	0	14	10	0,71	01	01	---13:
14:	0	0	0	1	14	11	0,79	01	02	---14:

---t---	c00	c01	S00[k=01,h=01]	S01[k=02,h=02]	L	M	M/L	h[0]	h[1]	
0:	1	3	0	0	2	0	0	00	01	--- 0: C00->S01 C01->S00
1:	0	3	0	0	3	0	0	00	00	--- 1: C01->S01
2:	1	0	0	0	4	1	0,25	00	00	--- 2: C00->S01
3:	0	3	1	0	5	2	0,4	00	00	--- 3: C01->S00
4:	0	3	0	1	6	3	0,5	00	00	--- 4: C01->S01
5:	1	0	0	0	7	3	0,43	00	00	--- 5: C00->X
6:	1	3	1	0	9	4	0,44	00	00	--- 6: C00->S00 C01->X
7:	0	3	1	1	10	6	0,6	01	00	--- 7: C01->S01
8:	1	3	0	0	12	6	0,5	00	00	--- 8: C00->S00 C01->X
9:	1	0	1	0	13	7	0,54	00	00	--- 9: C00->S00
10:	1	0	1	1	14	9	0,64	01	00	---10: C00->S01
11:	0	0	0	0	14	9	0,64	01	00	---11:
12:	0	0	0	0	14	10	0,71	01	01	---12:
13:	0	0	0	1	14	11	0,79	01	02	---13:
14:	0	0	0	0	14	11	0,79	01	02	---14:

Рис. 3. Примеры рациональных ARD-планов:

а – распределение запросов по серверам начинается с сервера 0;

б – распределение запросов по серверам начинается с сервера 1

Но в отличие от плана, приведенного на рис. 2, на рис. 3 в случае предельной загрузки выбранного сервера осуществляется попытка направить запрос на следующий в последовательности сервер. И лишь в том случае, когда все перебранные серверы не могут принять запрос, происходит отказ от обслуживания запроса.

Такие планы будем в дальнейшем называть рациональными ARD-планами, алгоритмы их построения – рациональными алгоритмами планирования и ARD-алгоритмы, которые распределяют запросы в соответствии с рациональными ARD-планами, – рациональными ARD-алгоритмами.

Два плана на рис. 3 построены на основе рационального алгоритма планирования и отличаются выбором сервера в момент времени  $t = 0$ . При этом в конечный момент времени  $t = 10$  в обоих случаях производительность системы совпала ( $\epsilon_0(10) = \epsilon_1(10) = M(10) / L(10) = 0,64$ ), но в другие моменты времени она разная.

Разницу в производительностях системы  $\epsilon_0(t), \epsilon_1(t)$  на каждый момент времени при распределении запросов по планам, представленным на рис. 3, можно наблюдать на рис. 4.

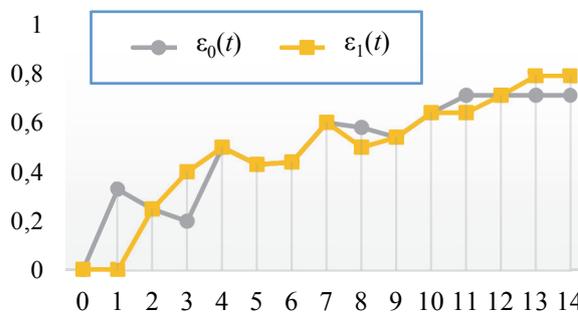


Рис. 4. Изменение производительности программной системы при распределении запросов по планам, представленным на рис. 3

По всей видимости, функции  $\underline{E}(t) = \min(\epsilon_0(t), \epsilon_1(t))$  и  $\overline{E}(t) = \max(\epsilon_0(t), \epsilon_1(t))$ , где  $t = 1, 10$ ,  $\epsilon_0(t), \epsilon_1(t)$  – значения в столбцах  $M / L$  планов (рис. 3), их можно рассматривать как точные (нижнюю и верхнюю) границы рационального ARD-алгоритма при заданных условиях (рис. 5).

Пусть  $A = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k\}$  множество всех рациональных ARD-алгоритмов, а  $\Pi = \{\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k\}$  множество всех рациональных ARD-планов при заданных условиях  $P$ . Очевидно, что любой алгоритм  $\alpha \in A$  реализует один из планов  $\pi \in \Pi$ .

При этом каждый план  $\pi_i \in \Pi$ ,  $i = \overline{1, k}$  характеризуется функцией эффективности  $\varepsilon_i(t) = \frac{M_i(t)}{L_i(t)}$  на отрезке времени  $[0, t_e]$ . Тогда функции  $\underline{E}_P(t) = \min_i \varepsilon_i(t)$  и  $\overline{E}_P(t) = \max_i \varepsilon_i(t)$  являются точными (нижней и верхней) границами эффективности для множества алгоритмов  $A$  на отрезке времени  $[0, t_e]$  при заданных условиях  $P$ .

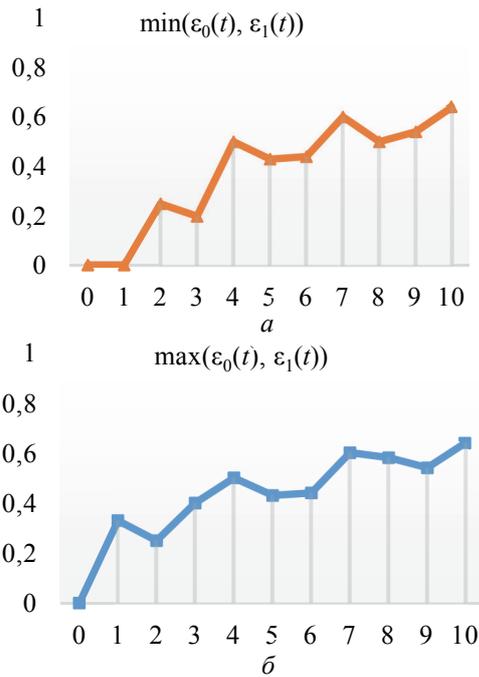


Рис. 5. Точные границы эффективности для рационального ARD-алгоритма:  $a$  – нижняя граница;  $б$  – верхняя граница

Рассмотрим пример вычисления точных границ эффективности для всех рациональных ARD-алгоритмов в программной системе (условия  $P$ ) с конфигурацией, описанной в табл. 1.

Вычисление точных границ  $\underline{E}_P(t)$  и  $\overline{E}_P(t)$  при заданных условиях  $P$  (табл. 1) на отрезке времени  $[0, 10]$  сводится к двум задачам:

– построение множества  $\Pi = \{\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k\}$  всех рациональных ARD-планов;

– анализ функций эффективности  $\varepsilon_i(t) = \frac{M_i(t)}{L_i(t)}$ ,  $i = \overline{1, k}$ ,  $t \in [0, t_e]$  планов и построение

функций  $\underline{E}_P(t) = \min_i \varepsilon_i(t)$ ,  $\overline{E}_P(t) = \max_i \varepsilon_i(t)$  точных границ.

Построение множества  $\Pi$  по сути является задачей рекурсивного перебора и осуществляется пошагово для каждого момента  $t = \overline{1, 10}$  дискретного времени:  $\Pi_0, \Pi_1, \dots, \Pi_{10}$ , где

$\Pi_t = \{\pi_{t,1}, \pi_{t,2}, \dots, \pi_{t,k_t}\}$  – множество планов, построенное на шаге  $t$ . При этом  $\Pi_{t+1} = \varphi(\Pi_t)$ , где  $\varphi$  – процедура построения множества всевозможных планов на основе множества планов, полученных на предыдущем шаге. Несложно вычислить, что максимально возможное количество планов, которое может быть получено на шаге  $t = 10$  при крайних условиях (в каждый момент времени 2 запроса, серверы обеспечивают неограниченное количество подключений), составляет  $4^{11}$  и растет экспоненциально по закону  $(c \cdot s)^{t+1}$ , где  $c$  – количество клиентов,  $s$  – количество серверов,  $t$  – момент дискретного времени.

Таблица 1

### Конфигурация программной системы

Общие параметры	
Количество клиентов	2
Количество серверов	2
Количество категорий запросов	2
Время моделирования, ед. модельного времени	10
Категории	
1	$K_1 = 1$
2	$K_3 = 3$
Клиенты $C = \langle K, \lambda(t) \rangle$	
1	$K = K_1$ , последовательность запросов (рис. 2)
2	$K = K_3$ , последовательность запросов (рис. 2)
Серверы $S = \langle h, k, F, I_S, O_S \rangle$	
1	$h = 1, k = 1, F(t) \equiv 0, I_S, O_S$ – не используются
2	$h = 2, k = 2, F(t) \equiv 0, I_S, O_S$ – не используются
Балансировщик $B = \langle P, I_B, A, O_B \rangle$	
Любой рациональный ARD-алгоритм	

В нашем случае количество разных планов составляет  $|\Pi_{10}| = 47$ . Другими словами, существует 47 различных способов рационального распределения запросов (рис. 2) на отрезке времени  $[0, 10]$ . Все полученные планы можно разбить на пять групп (табл. 2) по величине  $\varepsilon(10)$  – значению эффективности в конечный момент времени  $t = 10$ .

Таблица 2

### Группы планов по значению эффективности

$\varepsilon(10)$	Количество планов	$\max_{0 \leq t \leq 10} \varepsilon(t)$
0,43	3	0,60
0,50	4	0,60
0,57	20	0,60
0,64	16	0,64
0,71	4	0,71

На рис. 6,  $a, б, в, г, д$  представлены графики 47 функций, сгруппированных по семействам (табл. 2).

График на рис. 6,  $e$  отображает точную нижнюю  $\underline{E}_P(t) = \min_i \varepsilon_i(t)$  и точную верхнюю  $\overline{E}_P(t) = \max_i \varepsilon_i(t)$  границы эффективности рациональных ARD-алгоритмов при заданных условиях  $P$  (табл. 1).

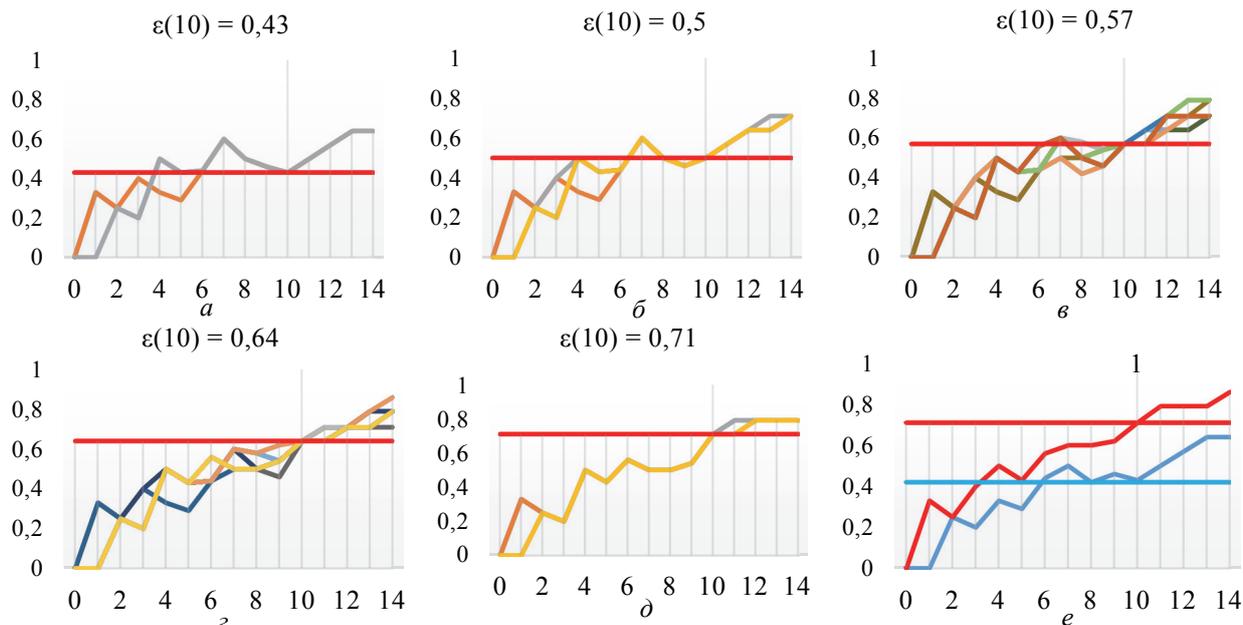


Рис. 6. Графики функции:  
 $a - \varepsilon(t), t = \overline{0,10}, \varepsilon(10) = 0,43$ ;  $б - \varepsilon(t), t = \overline{0,10}, \varepsilon(10) = 0,5$ ;  $в - \varepsilon(t), t = \overline{0,10}, \varepsilon(10) = 0,57$ ;  
 $г - \varepsilon(t), t = \overline{0,10}, \varepsilon(10) = 0,64$ ;  $д - \varepsilon(t), t = \overline{0,10}, \varepsilon(10) = 0,71$ ;  $e - \underline{E}_p(t) = \min_i \varepsilon_i(t)$ ,  
 $\overline{E}_p(t) = \max_i \varepsilon_i(t), t = \overline{0,10}$

На рис. 6, *e* обратим внимание на следующее: значения функций  $\underline{E}_p(2) = \overline{E}_p(2)$  – совпадают точке  $t = 2$ ; максимальное значение эффективности на отрезке времени  $[0, 10]$  достигается в точке  $t = 10$  ( $\overline{E}_p(10) = 0,71$ ); на отрезке времени  $[6, 10]$  эффективность не ниже значения  $0,42$  ( $\underline{E}_p(t) \geq 0,42, t \in [6, 10]$ ). Другими словами, на отрезке времени  $[0, 10]$  при условиях  $P$  любой рациональный ARD-алгоритм в точке  $t = 2$  имеет эффективность, равную  $0,25$ ; достигает максимальной эффективности в точке  $t = 10$ ; имеет эффективность не менее  $0,42$  на отрезке времени  $[6, 10]$ . На рис. 7 совмещены рис. 6, *e* и 4.

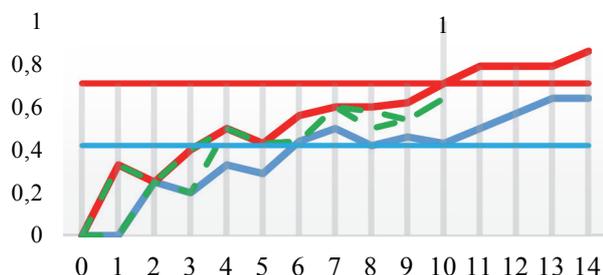


Рис. 7. Точные границы рационального алгоритма равномерного распределения запросов (рис. 3), не выходя за пределы функций  $\overline{E}_p(t)$  и  $\underline{E}_p(t)$  (рис. 6, *e*) на отрезке времени  $t = \overline{0,10}$

Стоит отметить, что графики функций точных границ рационального алгоритма равномерного распределения запросов соответствуют всем описанным здесь свойствам.

**Заключение.** Предложенный метод вычисления точных границ эффективности ARD-алгоритмов предполагает, что помимо конфигурации принимающей и обрабатывающей клиентские запросы программной системы, известна последовательность (во времени) запросов и их трудоемкость. В реальных условиях может быть известна только конфигурация и, в лучшем случае, интенсивности запросов по категориям трудоемкости их обслуживания. Алгоритм для вычисления границ имеет экспоненциальную сложность от времени  $t$  и является трудно разрешимым для реальных конфигураций программных систем (включающих более 10 серверов и несколько десятков одновременно поступающих запросов). Кроме того, как правило, интерес представляет эффективность программной системы в установившемся режиме, стабилизация работы которой может занимать достаточно продолжительный интервал времени. Все это делает непригодным применение предложенного метода для оценки эффективности ARD-алгоритмов в инженерных задачах, когда требуется оценить эффективность существующей программной системы. Оценка эффективности в таких случаях, как правило, осуществляется с помощью нагрузочного тестирования, которое позволяет на основе собранной статистики получить обоснованную оценку.

Интерес представляют адаптивные ARD-алгоритмы, которые «умеют приспосабливаться» к изменениям конфигурации программной системы, интенсивности и структуры потока

запросов. В этом случае важен процесс адаптации, который, по сути, является переходным процессом и в результате которого система минимизирует потерю эффективности (в случае неблагоприятных изменений) или, наоборот, максимизирует эффективность при благоприятных изменениях. Переходной процесс

может быть описан как множество сценариев (планов) адаптации системы на ограниченном (относительно небольшом) отрезке времени. При этом можно вычислить точные границы эффективности, которые позволяют оценить «коридор возможностей» адаптационного алгоритма.

### Список литературы

1. Дубовик М. В., Смелов В. В. Математическая модель для анализа алгоритмов распределения запросов между серверами // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 1 (242). С. 31–35.

2. Stuti D., Prashant M. Utilizing Round Robin Concept for Load Balancing Algorithm at Virtual Machine Level in Cloud Computing // International Journal of Computer Applications. 2014. Vol. 94, no. 4. P. 23–29.

### References

1. Dubovik M. V., Smelov V. V. Mathematical model for analyzing algorithms for distributing requests between servers. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2021, no. 1 (242), pp. 31–35 (In Russian).

2. Stuti D., Prashant M. Utilizing Round Robin Concept for Load Balancing Algorithm at Virtual Machine Level in Cloud Computing. *International Journal of Computer Applications*, 2014, vol. 94, no. 4, pp. 23–29.

### Информация об авторах

**Дубовик Марина Владимировна** – магистрант кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: dubovik@belstu.by

**Смелов Владимир Владиславович** – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: smw@belstu.by

**Тимонович Георгий Леонидович** – кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: tgl@hmti.ac.by

### Information about the authors

**Dubovik Marina Vladimirovna** – Master’s degree student, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: dubovik@belstu.by

**Smelov Vladimir Vladislavovich** – PhD (Engineering), Associate Professor, Head of the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: smw@belstu.by

**Timonovich Georgy Leonidovich** – PhD (Engineering), Associate Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tgl@hmti.ac.by

*Поступила после доработки 14.09.2021*

# СОДЕРЖАНИЕ

<b>ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ.....</b>	<b>5</b>
<b>МАТЕМАТИКА.....</b>	<b>5</b>
<b>Якименко А. А.</b> К вопросу о модальном управлении одной трехмерной системой нейтрального типа в общециклическом случае при кратных корнях.....	5
<b>Яроцкая Л. Д.</b> Асимптотика интегралов, связанных с аппроксимацией модифицированных функций Бесселя и их комбинаций.....	11
<b>Можей Н. П.</b> Четырехмерные однородные пространства с почти симплектической структурой. Вещественный случай.....	15
<b>МЕХАНИКА .....</b>	<b>22</b>
<b>Грода Я. Г., Грода Н. Г., Ласовский Р. Н., Бильданов Э. Э., Гапанюк Д. В.</b> Кинетическая диффузия в решеточном флюиде с конкурирующими взаимодействиями на простой кубической решетке.....	22
<b>Ласовский Р. Н., Грода Я. Г., Гапанюк Д. В., Грода Н. Г.</b> Проводимость в трехмерных решеточных моделях с конкурирующим взаимодействием.....	28
<b>ФИЗИКА .....</b>	<b>33</b>
<b>Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Кулеш А. А., Рогач А. А.</b> Комплексный статистико-вариационный расчет термодинамических и структурных характеристик гетерогенной системы «кристаллическая наночастица – однородная газовая среда».....	33
<b>Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Кулеш А. А., Рогач А. А.</b> Проверка сходимости итерационной процедуры решения системы интегральных уравнений для гетерогенной системы «кристаллическая наночастица – газообразная среда».....	41
<b>Бобрович О. Г.</b> Формирование поверхностного слоя методом вакуумного осаждения кобальта и молибдена на графит.....	47
<b>Мадьяров В. Р.</b> Влияние магнитоплазменных эффектов на прохождение субмиллиметровых волн через полупроводники.....	53
<b>Карлович Т. Б., Сухоцкий А. Б., Данильчик Е. С.</b> Конвекция Рэлея – Бенара в вытяжной шахте над однорядным горизонтальным пучком из оребренных труб.....	58
<b>ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ.....</b>	<b>65</b>
<b>МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ .....</b>	<b>65</b>
<b>Гринюк Д. А., Олиферович Н. М., Сухорукова И. Г., Оробей И. О.</b> Моделирование и настройка систем с нелинейной динамикой.....	65
<b>Гринюк Д. А., Олиферович Н. М., Сухорукова И. Г.</b> Оптимизация процесса сглаживания сигналов.....	72
<b>Дубовик М. В., Смелов В. В., Тимонович Г. Л.</b> Точные границы эффективности алгоритмов распределения запросов между серверами.....	80

# CONTENTS

---

<b>PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES.....</b>	<b>5</b>
<b>MATHEMATICS.....</b>	<b>5</b>
<b>Yakimenka A. A.</b> To the question of modal control for one three-dimensional neutral type system in general cyclic case with double roots .....	5
<b>Yauotskaya L. D.</b> Asymptotics of integrals associated with the approximation of modified Bessel functions and their combinations.....	11
<b>Mozhey N. P.</b> Four-dimensional homogeneous spaces with almost symplectic structure. The real case.....	15
<b>MECHANICS .....</b>	<b>22</b>
<b>Groda Ya. G., Groda N. G., Lasovsky R. N., Bildanau E. E., Gapanjuk D. V.</b> Jump diffusion in the lattice fluid with competing interactions on a simple cubic lattice .....	22
<b>Lasovsky R. N., Groda Ya. G., Gapanjuk D. V., Groda N. G.</b> Conductivity in three-dimensional lattice models with competitive interaction.....	28
<b>PHYSICS.....</b>	<b>33</b>
<b>Narkevich I. I., Farafontova E. V., Kulesh A. A., Rogach A. A.</b> Comprehensive statistical-variational calculation of thermodynamic and structural characteristics of heterogeneous system «crystalline nanoparticle – homogeneous environment» .....	33
<b>Narkevich I. I., Farafontova E. V., Kulesh A. A., Rogach A. A.</b> Verification of the convergence of the iterative solution procedure of system of integral equations for heterogeneous system «crystalline nanoparticle – gaseous environment» .....	41
<b>Bobrovich O. G.</b> Vornation of the surface layer by vacuum deposition of cobalt and molybdenum on graphite.....	47
<b>Mad'yarov V. R.</b> The effect of magnetoplasma phenomena on the submillimeter waves passage through semiconductors .....	53
<b>Karlovich T. B., Suhotskii A. B., Danilchik E. S.</b> Rayleigh – Benard convection in exhaust shaft over one row horizontal bundle of finned pipes.....	58
<b>COMPUTER SCIENCE AND ENGINEERING SCIENCES .....</b>	<b>65</b>
<b>MODELLING OF PROCESSES AND MANAGEMENT IN TECHNICAL SYSTEMS .....</b>	<b>65</b>
<b>Hryniuk D. A., Oliferovich N. M., Suhorukova I. G., Orobei I. O.</b> Modeling and tuning control objects with nonlinear dynamics .....	65
<b>Hryniuk D. A., Oliferovich N. M., Suhorukova I. G.</b> Signal smoothing optimization .....	72
<b>Dubovik M. V., Smelov V. V., Timonovich G. L.</b> Exact boundaries for the efficiency of the algorithms for distributing requests between servers.....	80

Редактор *Р. М. Рябая*  
Компьютерная верстка *А. Н. Петрова, Д. С. Жих*  
Корректор *Р. М. Рябая*

Подписано в печать 15.09.2021. Формат 60×84<sup>1</sup>/<sub>8</sub>.  
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать ризографическая.  
Усл. печ. л. 10,4. Уч.-изд. л. 11,0.  
Тираж 100 экз. Заказ .

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.